Gaußsche Wellenpakete

Herleitung

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen (also mit Potential $V = 0$)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \qquad \Leftrightarrow \qquad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t) = 0$$

ist gegeben durch

$$\psi(x,t) \sim \exp(ipx/\hbar - iEt/\hbar)$$

für $E = p^2/2m$, wie man durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung leicht nachrechnen kann. Mit $k \coloneqq p/\hbar$ und $\omega \coloneqq E/\hbar$ können wir dies vereinfacht schreiben als

$$\psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}.$$

Diese Wellenfunktion hat einen freien Parameter: k. Ist k festgelegt, folgt daraus sofort

$$E \equiv E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad p \equiv p(k) = \hbar k, \qquad \omega \equiv \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

(natürlich könnten wir auch jeden anderen Parameter als „frei" wählen und die übrigen würden dann durch diesen festgelegt[1]). Dieses $\psi(x,t)$ löst die Schrödinger-Gleichung also für beliebige Wert von k. Da die Schrödinger-Gleichung eine lineare Differentialgleichung ist, sind auch Linearkombinationen, wie etwa

$$\sum_{k=k_1,k_2,k_3} c_k\, e^{i(kx-\omega t)}$$

für beliebige c_k, Lösungen der Schrödinger-Gleichung.[2] Da k kontinuierlich ist, können wir statt zu summieren auch über k integrieren:

$$\Psi(x,t) \coloneqq \int_{-\infty}^{\infty} dk\, c(k)\, e^{i(kx-\omega t)}.$$

Dies löst für beliebige Funktionen $c(k)$ die Schrödinger-Gleichung:

[1] Nunja, nicht ganz; da $E \sim k^2$ können wir einem festen Wert von E einen positiven oder negativen Impuls zuordnen. Umgekehrt ist es eindeutig, also wählen wir lieber k (oder genauso gut p) als freien Parameter.

[2] An dieser Stelle habe ich im letzten Tut auch ein bisschen etwas durcheinandergebracht; ich glaube ich habe behauptet, Linearkombinationen von Lösungen der Schrödinger-Gleichung erfüllen die Schrödinger-Gleichung *nicht*, „weil ja die Energien unterschiedlich sind". Das war falsch. Richtig ist: Linearkombinationen $\sum_n c_n\psi_n$ von *Eigenfunktionen* des Hamiltonoperators ψ_n, die also die Eigenwertgleichung $H\psi_n = E_n\psi_n$ erfüllen, sind *nicht* auch Eigenfunktionen des Hamilton-Operators:

$$H\sum_n c_n\psi_n = \sum_n c_n H\psi_n = \sum_n c_n E_n\psi_n \nsim \sum_n c_n\psi_n.$$

Linearkombinationen $\sum_i c_i\psi_i$ für Lösungen der *Schrödinger-Gleichung* hingegen *sind* auch wieder Lösungen der Schrödinger-Gleichung (da die Schrödinger-Gleichung eine lineare Differentialgleichung ist):

$$i\hbar\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = H\psi_i \qquad \Rightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_i c_i\psi_i = i\hbar\sum_i c_i\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = \sum_i c_i H\psi_i = H\sum_i c_i\psi_i.$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,c(k)\underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)e^{i(kx-\omega t)}}_{=0}=0.$$

$c(k)$ ist wie gesagt beliebig. Gauß-Funktionen sind schön. Wählen wir mal $c(k)$ als Gauß-Funktion und schauen dann, ob da sinnvolle Sachen bei rauskommen:

$$c(k)=\frac{1}{\sqrt{2\sigma}\pi^{3/4}}\exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Mit dieser Wahl finden wir

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\sigma}\pi^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}\right)e^{i(kx-\omega t)}\\&=\frac{\exp(-k_0^2/2\sigma^2-i\omega t)}{\sqrt{2\sigma}\pi^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \exp\left(\frac{-k^2}{2\sigma^2}+\left(ix+\frac{k_0}{\sigma^2}\right)k\right)\\&=\frac{\exp(-k_0^2/2\sigma^2-i\omega t)}{\sqrt{2\sigma}\pi^{3/4}}\sqrt{2\sigma^2\pi}\exp\left(\frac{1}{2}(i\sigma x+k_0/\sigma)^2\right)=\frac{\sqrt{\sigma}}{\pi^{1/4}}e^{-\sigma^2x^2/2}e^{i(k_0x-\omega t)}.\end{aligned}$$

Nun haben wir eine Wellenfunktion $\Psi(x,t)$, die – wie oben gezeigt – eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung ist und die gleichzeitig für $x\to\pm\infty$ abfällt. Real- und Imaginärteil von Ψ schwingen sinus-/cosinusförmig, diese Sinus-/Cosinus-Schwingungen sind eingehüllt von einer Gaußfunktion. Insbesondere gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte[1]

$$|\Psi(x,t)|^2=\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}e^{-\sigma^2x^2}$$

(wir haben den Vorfaktor in $c(k)$ von Anfang an so gewählt, dass Ψ nun normiert ist).

Warum Gaußsche Wellenpakete?

Die „einfachen" Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung, $\psi\sim e^{i(kx-\omega t)}$, haben den entscheidenden Nachteil, dass sie nicht quadratintegrabel/normierbar sind. Außerdem gilt für sie $|\psi|^2=\text{const}$; es ist aber unphysikalisch, dass freie Teilchen überall sein können. Immerhin haben Teilchen in der klassischen Physik einen festen Ort und irgendwie muss die Quantenmechanik im klassischen Limes einem Teilchen auch einen festen Ort zuschreiben.

Mit der Beschreibung durch Wellenpakete lassen sich Teilchen beschreiben, die „ein bisschen" lokalisiert sind. Wie lokalisiert genau lässt sich beim Gaußschen Wellenpaket über den Parameter σ festlegen.

Dennoch hätten wir natürlich auch andere Funktionen als die Gaußfunktion für $c(k)$ wählen können, um ein freies Teilchen zu lokalisieren. Ob diese dann auch geeignet wären, reale freie Teilchen sinnvoll zu beschreiben, müsste das Experiment zeigen. Gaußsche Wellenpakete haben einige schöne Eigenschaften. Zum Beispiel ist die Fouriertransformation eines Gaußschen Wellenpaketes – also Ψ im Impulsraum – auch wieder ein Gaußsches Wellenpaket. Das wäre bei anderen Funktionen $c(k)$ nicht der Fall. Zudem ist das Gaußsche Wellenpaket dasjenige mit der geringsten Unschärfe, das heißt bei keiner anderen Wahl für $c(k)$ wäre $\Delta P\cdot\Delta X$ kleiner.

[1] Die Feststellung aus dem Tut, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an den Nulldurchgängen der Sinus-/Cosinusschwingungen zu finden, verschwindet, war also falsch.