Veronika Hammerl

Visualisieren der Quantenmechanik mit Hilfe der Wignerfunktion

Diplomarbeit
zur Erlangung des akademischen Titels einer
Magistra
an der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Karl-Franzens-Universität Graz

Betreuer: Ao. Univ. Prof. Mag. Dr. Ulrich Hohenester

Istitut für Physik, Fachbereich Theoretische Physik
Karl-Franzens-Universität Graz

2008

Vorwort

In dieser Diplomarbeit soll die grafische Darstellung von eindimensionalen quantenmechanischen Phänomenen mit Hilfe der Wignerfunktion untersucht und bewertet werden. Dabei wird das Resultat mit der üblichen Darstellung des Betragsquadrats der Wellenfunktion verglichen. Die grafische Auswertung der Wignerfunktion W, einer Wellenfunktion, ist dreidimensional: W in Abhängigkeit von Ort und Impuls. Wenn man $W(x,p)$ farbkodiert darstellt, erhält man eine zweidimensionale Darstellung im Phasenraum, der zu Beginn der Diplomarbeit eingeführt wird. Als Beispiele werden solche Phänomene im Phasenraum klassisch behandelt, die im Verlauf der Diplomarbeit einer quantenmechanischen Betrachtungsweise unterzogen werden. Durch den Vergleich werden Unterschiede und vergleichbare Eigenschaften aufgezeigt.
Nach einer kurzen Einführung in die Quantenmechanik wird die Wignerfunktion, mit den für die Diplomarbeit relevanten Eigenschaften beschrieben. Nun können quantenmechanische Probleme in ihrer zeitlichen Entwicklung mit Hilfe der Wignerfunktion verfolgt werden. Darunter befinden sich unter anderen die quantenmechanische Dispersion, Wellenfunktionen im Oszillatorpotenzial und ein Wellenpaket, das auf verschiedene Formen von Potenzialbarrieren trifft.
Ein weiters Kapitel behandelt die Dekohärenz, die mit Hilfe der Wignerfunktion dargestellt wird. Tritt bei einem quantenmechanischen System Dekohärenz auf, ist es nicht mehr durch eine Wellenfunktion beschreibbar. Daher kann eine grafische Darstellung des Betragsquadrats der Wellenfunktion nicht erfolgen. Die Wignerfunktion hingegen kann ausgegeben werden und eine grafische Auswertung ist dadurch möglich. Hier erweist sich die Wignerfunktion als besonders vorteilhaft.
Das letzte, mir persönlich sehr wichtige Kapitel befasst sich mit der Anwendung für den Schulunterricht. Quantenmechanische Phänomene, die meiner Meinung nach, mit Hilfe der Wignerfunktion für Schüler anschaulicher und leichter verständlich darstellbar sind, werden didaktisch aufbereitet. Neben einer konkreten Unterrichtsvorbereitung befinden sich ein Arbeitsblatt und weitere Unterrichtsmaterialien in diesem Kapitel.

Danksagung

Ich danke dem Herrn Univ. Prof. Dr. Ulrich Hohenester für die Idee zu dieser Arbeit, die mir persönlich neue, vertiefende Einblicke in die Quantenmechanik ermöglicht hat. Weiters möchte ich ihm für die programmtechnische Aufbereitung der Problemstellung danken. Besonders wertvoll für mich war seine freundliche Betreuung.

Inhaltsverzeichnis

1 Die klassische Physik im Phasenraum **7**
1.1 Die Bewegung im harmonischen Oszillatorpotential . . . 7
1.2 Das gekoppelte Pendel . . . 8
1.3 Ein Ensemble von Teilchen . . . 10
1.4 Ein Ensemble im harmonischen Oszillatorpotenzial . . . 13

2 Die Quantenmechanik **15**
2.1 Komplementarität . . . 16
2.2 Der mathematische Hintergrund . . . 16
2.3 Die Messung . . . 17
2.3.1 Statistische Interpretation . . . 18
2.3.2 Dekohärenz . . . 18

3 Die Wignerfunktion **21**
3.1 Eigenschaften der Wignerfunktion . . . 21
3.2 Die Darstellung von Wellenfunktionen . . . 23

4 Einfache zeitabhängige Probleme **27**
4.1 Potenzialbarrieren . . . 29
4.1.1 Die positive Potenzialstufe . . . 29
4.1.2 Die negative Potenzialstufe . . . 33
4.1.3 Der Tunneleffekt . . . 33
4.1.4 Das kastenförmige Potenzialloch . . . 37

5 Dekohärenz mit der Wignerfunktion **43**
5.1 Dekohärenz bei zwei Wellenpaketen . . . 43
5.2 Die numerische Methode . . . 45
5.3 Dekohärenz durch Kopplung zweier Oszillatoren . . . 48

6 Anwendung für den Schulunterricht **51**
6.1 Der Lehrplan und Vorraussetzungen . . . 51
6.2 Unterrichtsvorbereitung für den Lehrer/die Lehrerin . . . 52
6.2.1 Material . . . 57

A Numerische Methoden **61**
A.1 Das Crank-Nicolson Verfahren 61
A.2 Berechnen der Wignerfunktion 63

Kapitel 1

Die klassische Physik im Phasenraum

Als Einleitung soll hier der Phasenraum anhand von einfachen Beispielen der klassischen Physik erklärt werden. Die Beispiele wurden aufgrund von Analogien zu quantenmechanischen Beispielen gewählt, die in dieser Diplomarbeit diskutiert werden sollen.
Der Phasenraum ist eine zweidimensionale Darstellung vom Ort x (waagrechte Achse) gegen den Impuls p (senkrechte Achse). In den meisten Fällen soll nur eine räumliche Dimension betrachtet werden, so dass Ort und Impuls eindimensionale Größen sind. Der Einfachheit halber wird die Masse $m = 1$ gewählt.
Ein freies Teilchen M befindet sich an einem Ort x und hat eine gewisse Geschwindigkeit v, beziehungsweise einen Impuls p. Das Teilchen kann durch einen exakten Punkt im Phasenraum dargestellt werden. In der zeitlichen Entwicklung bewegt sich das Teilchen bei positivem Impuls mit der Geschwindigkeit $v = p$ nach rechts, wie es in Abbildung 1.1 angedeutet ist. Wäre p negativ, würde sich das Teilchen an der zur x-Achse gespiegelten Position im Phasenraum befinden und nach links bewegen.

1.1 Die Bewegung im harmonischen Oszillatorpotential

Befindet sich das klassische Teilchen in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential (ein Beispiel wäre das Federpendel), so kann die Bewegung durch die folgende Differenzialgleichung beschrieben werden [7]:

$$m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} = -m \cdot \omega_0^2 \cdot x \,, \quad \omega_0 = 1. \tag{1.1}$$

(Bei dem Federpendel ist $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$, mit der Federkonstante k.) Der Lösungsansatz dieser Differenzialgleichung lautet:

$$x\,(t) = A \cdot \cos\,(t + \varphi_0) + B \sin\,(t + \varphi_0)\,. \tag{1.2}$$

Die Anfangsbedingungen für dieses Teilchen werden folgendermaßen gewählt: Das Teilchen befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ in Ruhe am Punkt der maximalen Auslenkung x_{max} und bei $\varphi_0 = 0$. Damit kann man die eindeutige Lösung bestimmen, die gegeben ist durch:

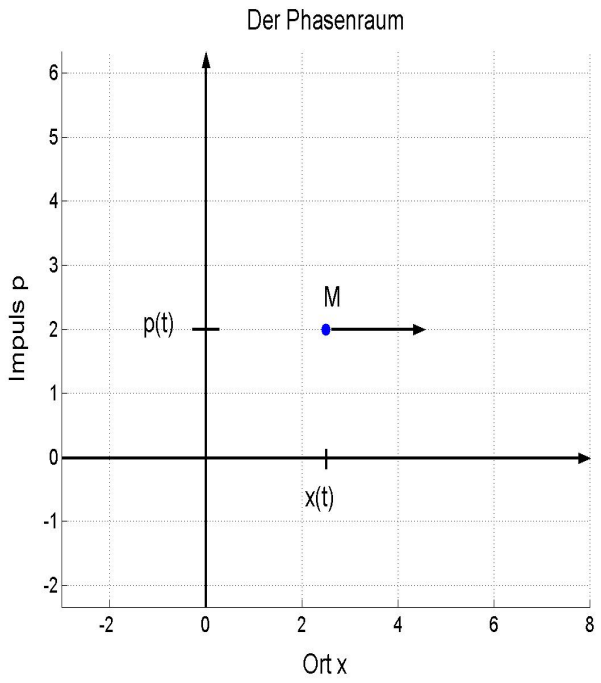


Abbildung 1.1: *Die Darstellung eines freien Teilchens im Phasenraum. Das Teilchen hat den Impuls $p(t)$, befindet sich am Ort $x(t)$ und bewegt sich im Laufe der Zeit nach rechts.*

$x = x_{max} \cdot \cos(t)$. Einmal abgeleitet erhält man für den Impuls $p = -x_{max} \cdot \sin(t)$. Im Phasenraum bewegt sich das Teilchen auf einer Kreisbahn mit der Kreisfrequenz $\omega_0 = 1$ und dem Radius x_{max}. Das wird im linken Bild der Abbildung 1.2 angedeutet. Im Punkt 1 befindet sich das Teilchen bei maximaler Geschwindigkeit genau am tiefsten Punkt des Potenzials. Im Punkt 2 ist das Teilchen in Ruhe bei maximaler Auslenkung auf der anderen Seite des Potenzials angelangt. Von dort bewegt es sich zurück zum Ausgangspunkt. Jegliche Energieverluste aufgrund von Reibung sind hier vernachlässigt, dadurch erhält man eine geschlossene Kreisbahn im Phasenraum. Das Potenzial, das im rechten Bild der Abbildung 1.2 dargestellt ist, lautet:

$$V(x) = \frac{x^2}{2}.$$

Es folgt ein weiteres Beispiel der klassischen Mechanik, das in einem folgendem Teil der Diplomarbeit im Bezug auf quantenmechanische Systeme genauer betrachtet wird. Im Kapitel „Dekohärenz durch Kopplung zweier Oszillatoren“ wird darauf eingegangen.

1.2 Das gekoppelte Pendel

Zwei Massenpunkte befinden sich je in einem Oszillatorpotenzial. Beide sind durch einen weiteren Oszillator gekoppelt. Man kann sich das leicht anhand von zwei Federpendel vorstellen, die durch eine weitere Feder verbunden sind, wie in Abbildung 1.3 gezeigt. Das System hat zwei Freiheitsgrade. Jedes Teilchen hat eine Positon x_i, die in der Grafik eingezeichnet ist.

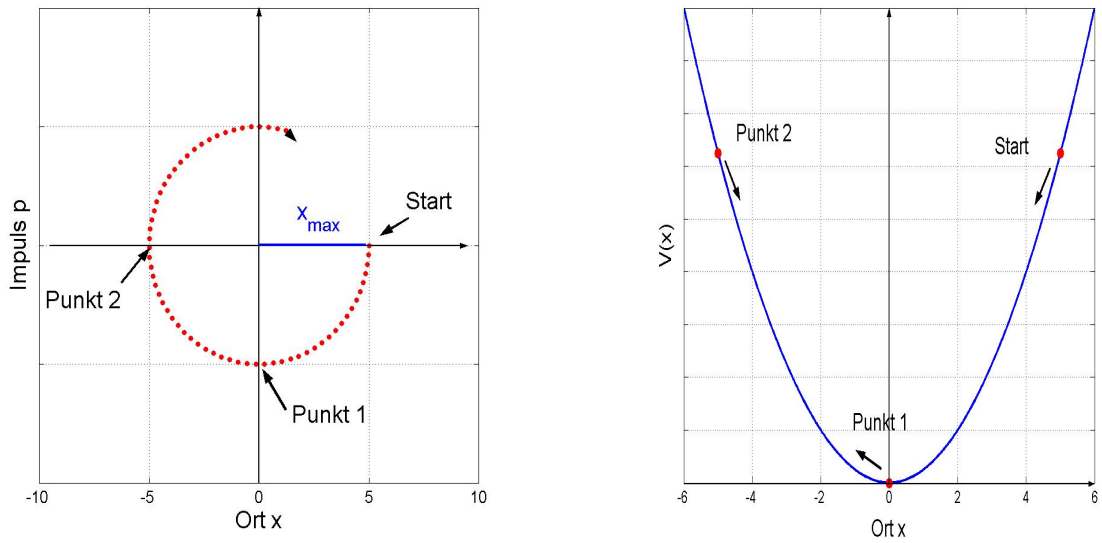


Abbildung 1.2: *Ein Teilchen ($m = 1$) befindet sich im harmonischen OszillatorPotenzial. Im linken Bild ist die Bewegung im Phasenraum berechnet und dargestellt, die eine Kreisbahn ergibt. Das konstante zeitliche Intervall zwischen zwei Punkten beträgt $\Delta t = 0.08$. Die Darstellung im rechten Bild zeigt das Teilchen im Potenzial an drei ausgezeichneten Punkten, die im linken Bild gekennzeichnet sind.*

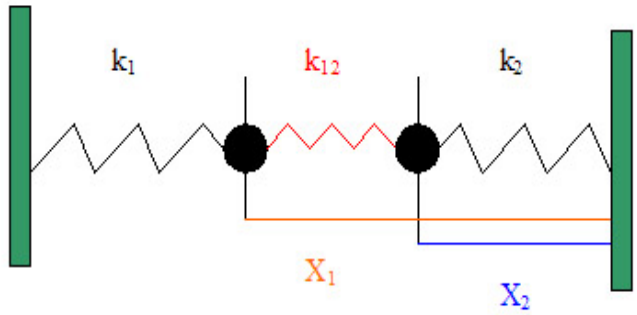


Abbildung 1.3: *Eine schematische Darstellung des gekoppelten Federpendels.*

Dann ergibt sich die gesamte kinetische Energie:

$$T = \frac{m_1}{2}\left(\frac{dx_1}{dt}\right)^2 + \frac{m_2}{2}\left(\frac{dx_2}{dt}\right)^2.$$

Die potenzielle Energie setzt sich zusammen aus dem Potenzial jedes Massenpunktes und dem der Verbindungsfeder:

$$U = k_1\frac{x_1^2}{2} + k_2\frac{x_2^2}{2} + k_{12}\frac{(x_1 - x_2)^2}{2}.$$

k_1 sei hier gleich k_2 und $m_1 = m_2 = 1$ gewählt. Die Lagrangefunktion[1] ergibt sich aus $L = T - U$ und die Bewegunsgleichungen aus den Lagrangegleichungen 2. Art:

$$\frac{dx_1^2}{dt^2} = -kx_1 - k_{12}\left(x_1 - x_2\right) \quad \frac{dx_2^2}{dt^2} = -kx_2 - k_{12}\left(x_2 - x_1\right).$$

Diese zwei gekoppelten Differenzialgleichungen kann man mit Addition und Subtraktion entkoppeln und lösen. Diese Rechnung sei hier nicht angegeben. Mit den Anfangsbedingungen $x_1(0)$, $x_2(0)$ erhält man:

$$x_{1,2}(t) = \frac{1}{2}\cdot\left(x_1(0)\cos(\omega t) \pm x_2(0)\cos\left(\omega' t\right)\right),$$

mit $\omega = \sqrt{k}$, $\omega' = \sqrt{k + 2k_{12}}$. Die Bewegung einer Masse im Phasenraum ist ellipsenähnlich und andeutungsweise in Abbildung 1.4 dargestellt. Die Anfangsbedingungen für diese Bahnkurve lauten: $x_1(0) = -4$; $x_2(0) = 7$; $k = 1$; $k_{12} = 0.5$. Sie wurden so gewählt, damit sie mit jenen aus dem Kapitel „Dekohärenz durch Kopplung zweier Oszillatoren“ übereinstimmen. Die in Abbildung 1.4 gezeigten Grafiken wurden in Matlab generiert und die Punkte berechnet.

1.3 Ein Ensemble von Teilchen

Verschiedene quantenmechanische Vorhänge können nicht mit der Bewegung eines einzelnen klassischen Teilchens verglichen werden. Man betrachtet daher für den Vergleich ein Ensemble von Teilchen im Phasenraum. Dieses ist zusammengesetzt aus Teilchen, der Masse $m = 1$, die in der Anzahl sowohl im Ort als auch im Impuls eine bestimmte Verteilung aufweisen. Im Folgenden wird für beide Variablen eine Normalverteilung gewählt. Eine grafische Darstellung zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich in der Abbildung 1.5.

Betrachtet man die zeitliche Entwicklung dieses Systems, so ist Folgendes zu beachten: Jedes Teilchen bewegt sich unabhängig von den anderen, mit einer gewissen Geschwindigkeit $v = p$. Daraus ergibt sich $x = x_0 + t \cdot v$ für jedes Teilchen. Dies wurde für jedes Teilchen in Matlab berechnet und in der Abbildung 1.6 grafisch für die Zeitpunkte $t = 0, 1, 2$ ausgewertet. Aufgrund der Verteilung der Teilchen und damit der unterschiedlichen Geschwindigkeiten beziehungsweise Impulse, wird das Ensemble im Phasenraum auseinander gezogen.

[1] Der Lagrange Formalismus und die Lagrangegleichungen 2. Art wurden entnommen aus [7] Kapitel 2, Seite 68.

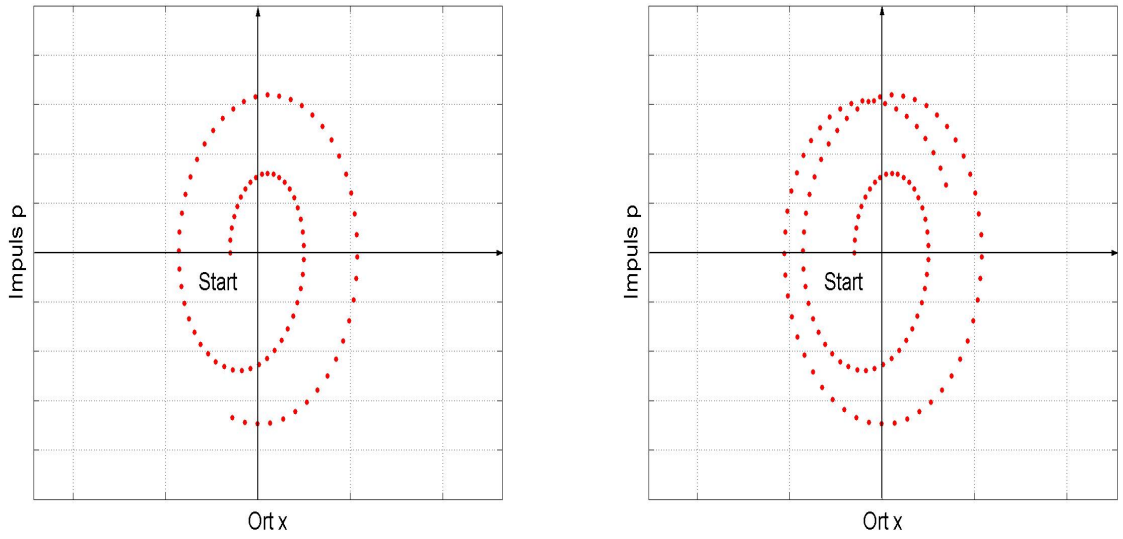


Abbildung 1.4: *Die Bewegung einer Masse des gekoppelten Federpendels ist in beiden Grafiken dargestellt. Der Startpunkt ist bei $t = 0$ und der Endpunkt im linken Bild bei $t = 8$ und im rechten Bild bei $t = 11$. Das konstante zeitliche Intervall zwischen zwei Punkten beträgt $\Delta t = 0.1$.*

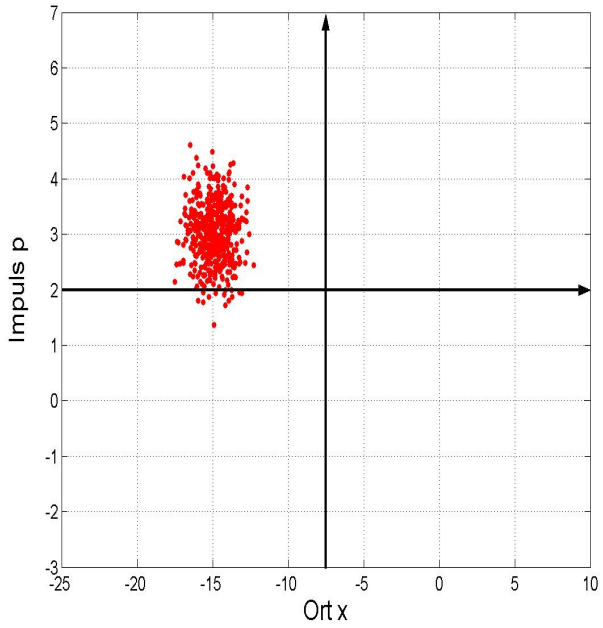


Abbildung 1.5: *Ein Ensemble von Teilchen im Phasenraum. Jedes Teilchen befindet sich an einem Ort $x(t)$ und hat einen bestimmten Impuls $p(t)$.*

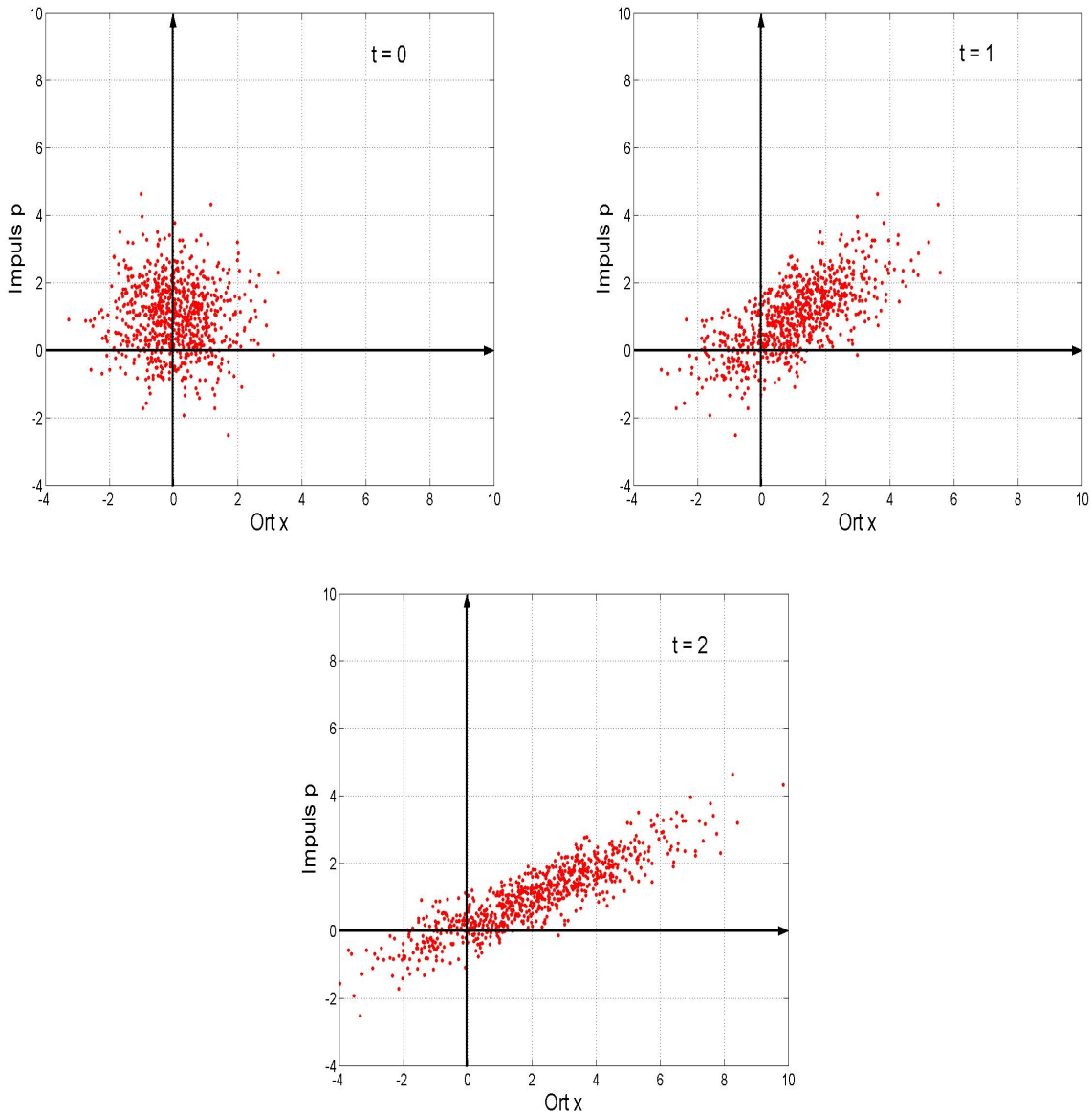


Abbildung 1.6: *Im Laufe der Zeit wird ein Ensemble von Teilchen auseinandergezogen. Teilchen mit einem höheren Impuls legen in der gleichen Zeit einen größeren Weg zurück.*

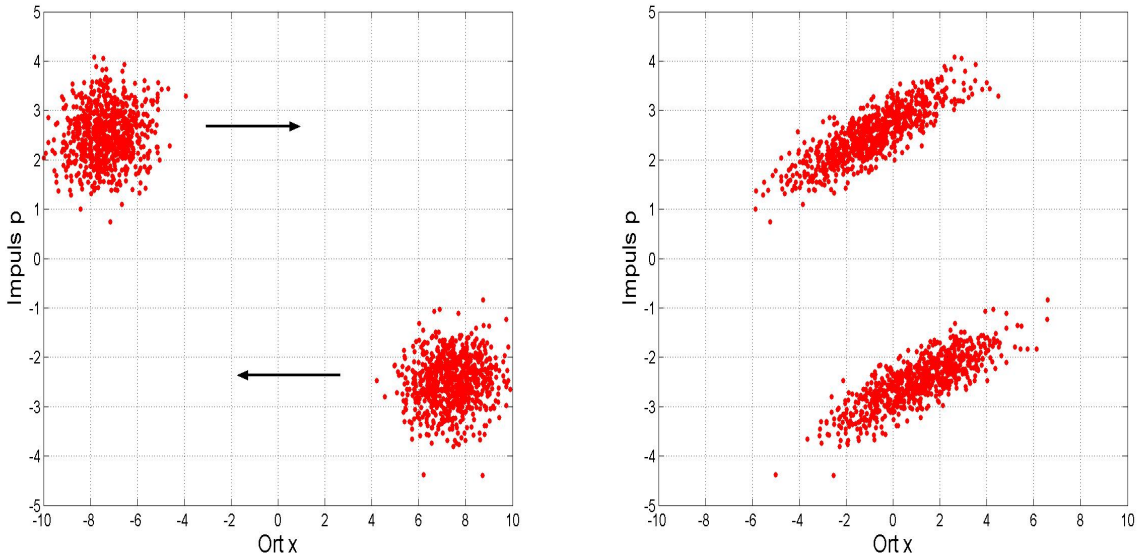


Abbildung 1.7: *Zwei normalverteilte Sytseme von Massenpunkten, die sich aufeinander zu bewegen.*

In Abbildung 1.7 ist dargestellt, was passiert, wenn sich zwei Ensembles von Teilchen aufeinander zu bewegen und Stoßprozesse ausgeschlossen sind. Ohne Wechselwirkung bewegen sich die zwei Ensembles im Phasenraum aneinander vorbei. Betrachtet man den Vorgang im Ort, so erkennt man, dass ein Ensemble sich tatsächlich durch das andere bewegt. In der Quantenmechanik ergibt sich hier ein wesentlicher Unterschied, der noch genau beschrieben werden wird.

1.4 Ein Ensemble im harmonischen Oszillatorpotenzial

Die Bewegungsgleichung 1.1 und der Lösungsansatz (siehe Gleichung 1.2) sind für mehrere Teilchen gleich wie für ein einzelnes. Der Unterschied besteht in den Anfangsbedingungen. Bei einem Enseble von N Teilchen, die im Ort um $\overline{x}$ und im Impuls um $\overline{p}$ normalverteilt sind, ergibt sich folgende Lösung:

$$x_i\left(t\right) = x_{i_0} \cdot \cos\left(t\right) + p_{i_0} \sin\left(t\right)$$

$$\frac{dx_i\left(t\right)}{dt} = p_i = -x_{i_0} \cdot \sin\left(t\right) + p_{i_0} \cos\left(t\right),$$

mit den Anfangsbedingungen für das i-te Teilchen $x_0 = x_{i_0}$, $p_0 = p_{i_0}$ zum Zeitpunkt $t = 0$, für $i = 1, \ldots N$. In der grafischen Darstellung im Phasenraum beschreibt jedes Teilchen unabhängig von den anderen eine Kreisbahn um den Nullpunkt. Damit ist die Bahnkurve des gesamten Ensembles ebenfalls kreisförmig. Das ist in der Abbildung 1.8 dargestellt.

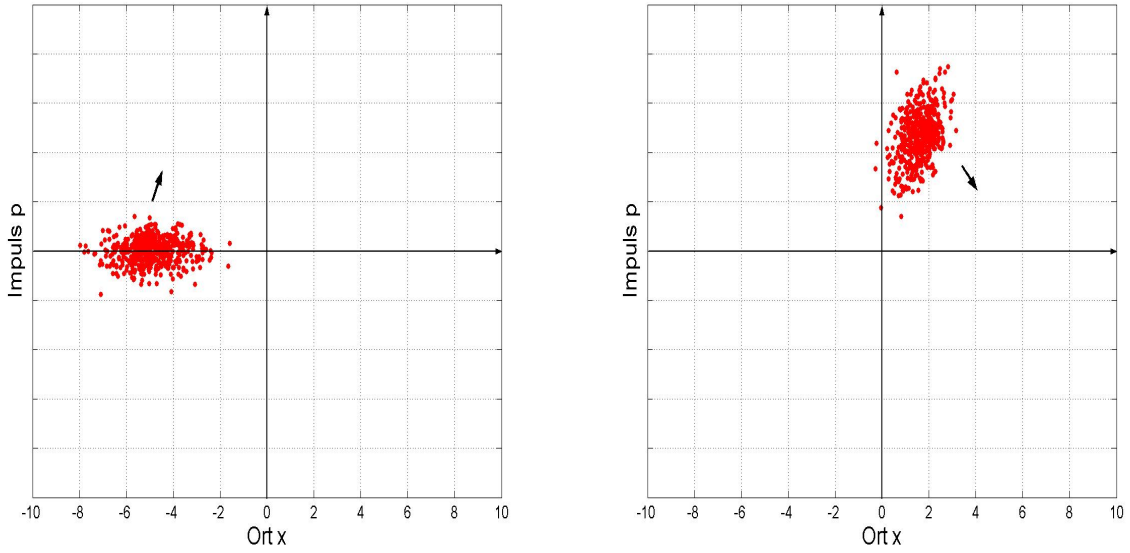


Abbildung 1.8: *Ein Ensemble von Teilchen im harmonischen Oszillatorpotenzial. Jedes Teilchen führt unabhängig von den anderen eine Kreisbewegung im Phasenraum um den Nullpunkt aus.*

Kapitel 2

Die Quantenmechanik

Die Quantenmechanik ist daraus entstanden, dass eine Reihe von Experimenten zum Beispiel mit einer Lichtquelle (Photoeffekt, Compton-Effekt) je nach Versuchsanordnung Teilchen- oder Wellencharakter zeigten. In der klassischen Physik sind diese Eigenschaften unvereinbar, daher wurde nach neuen Konzepten gesucht, die hier kurz zusammengefasst werden sollen. Mathematisch wird ein quantenmechanisches Objekt mit einer Wellenfunktion $\psi(x,t)$ identifiziert. Das Betragsquadrat $|\psi(x,t)|^2$ liefert die Wahrscheinlichkeit, das Objekt (ein Teilchen zum Beispiel) am Ort x zum Zeitpunkt t zu finden, es handelt sich dabei um eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im gesamten möglichen Raum zu finden, muss eins sein. Daher folgt die Normierungsbedingung für die Wellenfunktion:

$$\int |\psi|^2 \, dx = \int \psi^* \cdot \psi \, dx = 1,$$

wobei ψ^* die komplex-konjugierte Funktion von ψ ist. Wenn man N Teilchen betrachtet, die unabhängig voneinander im gleichen Zustand $\psi(x)$ sind, und man bei jedem Teilchen eine Ortsmessung durchführt, so ist die Häufigkeit der Messwerte wie $|\psi(x,t)|^2$ verteilt. Aus diesem Grund wurden in dem vorherigen Kapitel verschiedene Beispiele der klassischen Physik mit einem Ensemble von Teilchen betrachtet.

Eine Wellenfunktion kann in zwei Formen dargestellt werden: $\psi(x,t)$, die Ortsdarstellung und $\varphi(p,t)$, die Impulsdarstellung. Mittels Fouriertransformation gelangt man von einer zur anderen Darstellung. Beide Darstellungen beschreiben dieselbe Physik, betonen aber entweder den Teilchen- oder Wellencharakter. Betrachtet man ein Gauß'sches Wellenpaket, das in der Ortsdarstellung $|\psi(x)|^2$ eine Breite von ungefähr $\sqrt{\sigma}$ hat, so ergibt sich in der Impulsdarstellung eine Gaußverteilung mit der Halbwertsbreite von ca. $\frac{1}{\sqrt{\sigma}}$. Je genauer das quantenmechanische Objekt örtlich lokalisiert ist, bzw. je schmäler die Gaußverteilung $|\psi(x)|^2$ ist, desto breiter ist der Impuls verteilt und umgekehrt. Dieser Zusammenhang wird allgemeiner mit der Heisenbergschen Unschärferelation dargestellt:

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.1}$$

2.1 Komplementarität

Ort und Impuls nennt man zwei komplementäre Größen. Das heißt, es ist nicht möglich (aufgrund der Unschärferelation) sie gleichzeitig exakt zu bestimmen. In der klassischen Physik wäre das undenkbar, von jedem Teilchen kann man zu jedem Zeitpunkt Ort und Impuls genau bestimmen.
Die Komplementarität hängt eng mit dem Welle-Teilchen-Dualismus zusammen, der zu Beginn erwähnt wurde. Das Doppelspaltexperiment mit Elektronen, die ebenfalls sowohl Teilchen- als auch Welleneigenschaften besitzen, soll das veranschaulichen: Wird ein Elektronenstrahl auf einen Doppelspalt gerichtet, lassen sich auf dem Schirm dahinter Interferenzerscheinungen beobachten. Dabei wird die Wellenlänge, beziehungsweise der Impuls gemessen. Δp wird klein und der Wellencharakter der Elektronen tritt hervor. Bestimmt man stattdessen durch welches Loch die Elektronen hindurch fliegen, das heißt, ist der Ort genauer bestimmt, wird Δx klein. Es ergibt sich auf dem Schirm keine Interferenz und die Teilchennatur der Elektronen ist dominant. Jeweils die komplementäre Größe ist unscharf. Dabei ist auch die Reihenfolge der Messung wesentlich. Bei Interferenz ist es unmöglich im Nachhinein zu bestimmen durch welchen Spalt die Elektronen geflogen sind. Auch nach der Ortsbestimmung läßt sich der Wellencharakter der Elektronen nicht mehr nachweisen. Das System wird durch den jeweiligen Messprozess verändert. Weitere komplementäre Größen sind die Energie und Zeit, oder der Winkel und Drehimpuls.

2.2 Der mathematische Hintergrund

Um zur numerischen Berechnung der zeitlichen Entwicklung von einer Wellenfunktion zu gelangen, die mit der Wignerfunktion grafisch dargestellt wird, sind weitere Voraussetzungen notwendig. Mathematisch gesehen sind Wellenfunktionen quadratisch integrierbare Funktion $\psi(x,t)$ in einem Hilbertraum $L^2\left([a,b]\right)$ mit $a,b \in C$. Jede Linearkombination von Funktionen aus dem Hilbertraum ergibt wieder eine Funktion aus diesem. Ein Beispiel dafür ist:

$$\psi\left(x\right) = N \cdot \exp\left(i \cdot k_0 \cdot x\right) \cdot \exp\left(\frac{-\left(x-x_0\right)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right). \tag{2.2}$$

σ ist die Standardabweichung des Wellenpakets um die mittlere Position x_0 in der Darstellung $\left|\psi\left(x\right)\right|^2$. N ist eine Konstante, die die Wellenfunktion normiert und k_0 der Wellenzahlvektor zum Zeitpunkt $t=0$. Grafisch ist die Wellenfunktion in Abbildung 2.1 dargestellt.

Das innere Produkt des Hilbertraumes ist folgenderdermaßen definiert:

$$\langle \phi \mid \psi \rangle = \int \phi^*\left(x\right) \psi\left(x\right)\ dx$$

Die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion wird durch die Schrödingergleichung festgelegt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right) = \ H\ \psi\left(x,t\right). \tag{2.3}$$

Hier ist $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\ \Delta + V\left(x\right)$ der Hämiltonoperator mit $V\left(x\right)$ dem Potenzial, in dem sich das betrachtete System befindet. Es ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung im Ort x und

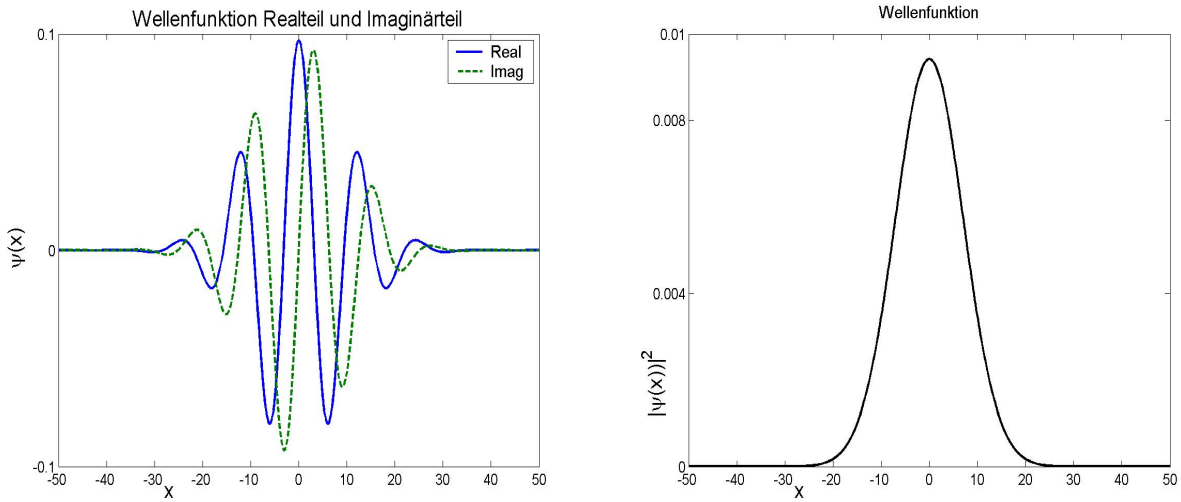


Abbildung 2.1: *Eine Gauß'sches Wellenpaket. In der ersten Gafik ist der Realteil von $\psi(x)$ blau und der Imaginärteil grün strichliert dargestellt. Die zweite Grafik zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$*

1. Ordnung in der Zeit t mit der Anfangsbedingung $\psi_0(x)$. Sie wird in den Beispielen des Kapitels „Einfache zeitabhängige Probleme“ numerisch berechnet und das Ergebnis grafisch mit Hilfe der Wignder Funktion dargestellt. Alle bisherigen Ergebnisse beziehen sich auf ein abgeschlossenes quantenmechanisches System, das dadurch mit einem einzigen ψ beschrieben werden kann, einem sogenannten reinen Zustand. Tatsächlich ist das eher selten der Fall. Für gemischte Zustände verwendet man die Dichtematrix:

$$\rho(x, x') = \sum_i p_i \cdot \psi_i^*(x) \cdot \psi_i(x'). \tag{2.4}$$

p_i wird als die Wahrscheinlichkeit interpretiert, den reinen Zustand $\psi_i(x)$ in einem statistischen Ensemble vorzufinden. Für den reinen Zustand ψ ergibt sich die Dichtematrix: $\rho\left(x, x'\right) = \psi(x) \cdot \psi\left(x'\right)^*$. Sie dient auch dazu ein Teilsystem eines größeren Systems darzustellen, wobei hier nicht näher darauf eingegangen werden soll.[1]

2.3 Die Messung

Im Kapitel „Dekohärenz“ wird an einem Beispiel ein Modell eines Messprozesses gezeigt. Einige Vorraussetzungen der Quantenmechanik sind dafür nötig, die hier kurz beschrieben sind. Findet eine Messung statt, kann das Ergebnis nicht durch die Schrödingergleichung deterministisch berechnet werden. Es können nur Wahrscheinlichkeiten angegeben werden, mit welchen man gewisse Messergebnisse erhält. Es ist nicht möglich eine Wellenfunktion zu messen und daraus Ort oder Impuls direkt zu bestimmen. Diese Observablen werden durch

[1] Die Informationen zu diesem Kapitel wurden entnommen aus [8] Kapitel 4.1 Seite 84 und [5] Kapitel 3 Seite 38.

lineare, symmetrische Operatoren (auch hermitesch genannt) A dargestellt und es gilt:

$$A \cdot \varphi_\lambda = \lambda \cdot \varphi_\lambda$$

mit λ einem Eigenwert und $\varphi_\lambda \in L^2([a,b])$ dem dazugehörigen Eigenzustand. Die Eigenwerte dieser Operatoren sind reell und die Menge aller Eigenzustände bildet eine vollständige Basis des Hilbertraumes, das heißt:

$$\psi = \sum_\lambda c_\lambda \cdot \varphi_\lambda \qquad \forall\, \psi \in L^2([a,b])\,.$$

Die Dichtematrix des Systems ψ läßt sich schreiben als:

$$\rho = \psi \cdot \psi^* = \sum_\lambda |c_\lambda|^2 \cdot \varphi_\lambda^* \cdot \varphi_\lambda + \sum_{\lambda,\mu} c_\lambda \cdot c_\mu \cdot \varphi_\lambda^* \cdot \varphi_\mu,$$

wobei $|c_\lambda|^2$ als die Wahrscheinlichkeit interpretiert wird, bei einer Messung das Ergebnis λ zu erhalten. Nach der Messung befindet sich das System im Zustand φ_λ. Nach dieser Einführung in die mathematisch- theoretischen Aspekte der Messung wird ein konkretes Experiment beschrieben.[2]

2.3.1 Statistische Interpretation

Ein quantenmechanisches Experiment besteht aus vielen verschiedenen Experimenten mit möglichst gleichen Anfangsbedingungen. Man mittelt dann über alle Messergebnisse und erhält so eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der gemessenen Größe, zum Beispiel des Orts. Die exakt gleichen Anfangsbedingungen wird man nicht erzielen können, das heißt es kann zum Beispiel vorkommen, dass die Energie eines Teilsystems aufgrund von Umwelteinflüssen fluktuiert. Diese Umwelteinflüsse können Dekohärenz bewirken, die als nächstes betrachtet wird.

2.3.2 Dekohärenz

Bei makroskopischen Objekten ist keine Interferenz messbar. Außerdem lassen sie sich genau lokalisieren und besitzen einen eindeutigen Impuls. Durch die Heisenberg'sche Unschärferelation (Gleichung 2.1) kann bei einem quantenmechanischen Teilchen weder x noch p exakt bestimmt werden. Wann erfolgt nun der Übergang von den quantenmechanischen Effekten zu den klassischen? Wie verläuft dieser Übergang und wie kann man sich diesen erklären? Eine mögliche Teilerklärung bietet die Dekohärenz. Kurz gesagt ist Dekohärenz das Verschwinden von quantenmechanischen Eigenschaften, wie zum Beispiel der Interferenz bei verschiedenen Objekten. Die Theorie besagt, dass dieser Vorgang bei größeren Objekten so schnell passiert, dass keine Interferenz messbar ist. Genauer soll nun hier die Dekohärenz durch Wechselwirkung mit der Umgebung beschrieben werden. Bei Wechselwirkung des Systems mit der Umgebung,

[2] Die Informationen zu diesem Kapitel wurden entnommen aus [6] Kapitel 2.16, Seite 105 und aus [5] Kapitel 2.4.

die ungefähr einer Messung ohne eindeutige Informationsbestimmung über das Ergebnis entspricht, passiert Folgendes:

$$\rho = \psi \cdot \psi^* \longrightarrow \sum_{\lambda} |c_\lambda|^2 \cdot \varphi_\lambda^* \cdot \varphi_\lambda \tag{2.5}$$

Die gemischten Terme mit $\varphi_\lambda^* \cdot \varphi_\mu$ mit $\mu \neq \lambda$ enthalten, fallen weg. Diese Terme bilden zum Beispiel im vierten Bild der Abbildung 3.3 genau die Interferenzerscheinungen. In diesem Zustand läßt sich das System nicht mehr durch eine Wellenfunktion beschreiben, nur durch die Dichtematrix ρ (siehe Gleichung 2.4). Der Verlust der Nichtdiagonalterme entspricht dem Übergang der quantenmechanischen zur klassischen Physik.[3]

[3]Die Informationen zu diesem Kapitel wurden entnommen aus [5] Kapitel 3.

Kapitel 3

Die Wignerfunktion

Die Wignerfunktion ist eine Darstellungsform für ein quantenmechanisches System. Das Besondere daran ist, dass die Funktion den Ort x und Impuls p als Variablen beinhaltet und beide dadurch zugleich gezeigt werden können. Die Wellenfunktion kann daher im Phasenraum dargestellt werden. Wenn ein System durch einen reinen Zustand $\varphi(x)$ beschrieben werden kann, so lautet die Wignerfunktion:

$$W(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y)\cdot\psi(x-y)\cdot e^{\frac{2ipy}{\hbar}}dy. \tag{3.1}$$

$\psi(x)^*$ ist die komplex konjugierte Funktion von $\psi(x)$. Für gemischte Zustände gilt:

$$W(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x+y,x-y)\cdot e^{\frac{2ipy}{\hbar}}dy, \tag{3.2}$$

wobei $\rho(x,x') = \sum_i p_i \cdot \psi_i^*(x)\cdot\psi_i(x')$ die Dichtematrix ist, mit p_i der Wahrscheinlichkeit, den reinen Zustand $\psi_i(x)$ vorzufinden. In Abbildung 3.1 ist in beiden Bildern ein Gauß'sches Wellenpaket mit Hilfe der Wignerfunktion dargestellt, wobei die Werte in Matlab und die Wignerfunktion in Mathematica berechnet wurden. Die linke Grafik zeigt das Wellenpaket mit einer Halbwertsbreite von $\sigma = 1$, die rechte mit $\sigma = 2$.[1]

3.1 Eigenschaften der Wignerfunktion

Die wichtigsten Eigenschaften der Wignerfunktion werden hier genannt.[2]

1. $W(x,p)$ nimmt reelle Werte an. Das heißt, W kann auch negative werden.[3] Daher ist die Interpretation von W als Wahrscheinlichkeitsdichte schwierig.

2. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Ort und Impuls können abgeleitet werden durch:

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x,p)\,dp = \rho(x,x) \;\; \left(= |\psi(x)|^2\right)$$

[1] Die Informationen zu diesem Kapitel wurden entnommen aus [5] Kapitel 3.2.3 und [4] Kapitel 2.
[2] Diese Eigenschaften sind entnommen aus [5] Kapitel 3.2.3 und [4] Kapitel 5.
[3] Ein möglicher Beweis dafür befindet sich in [4] Kapitel 7.

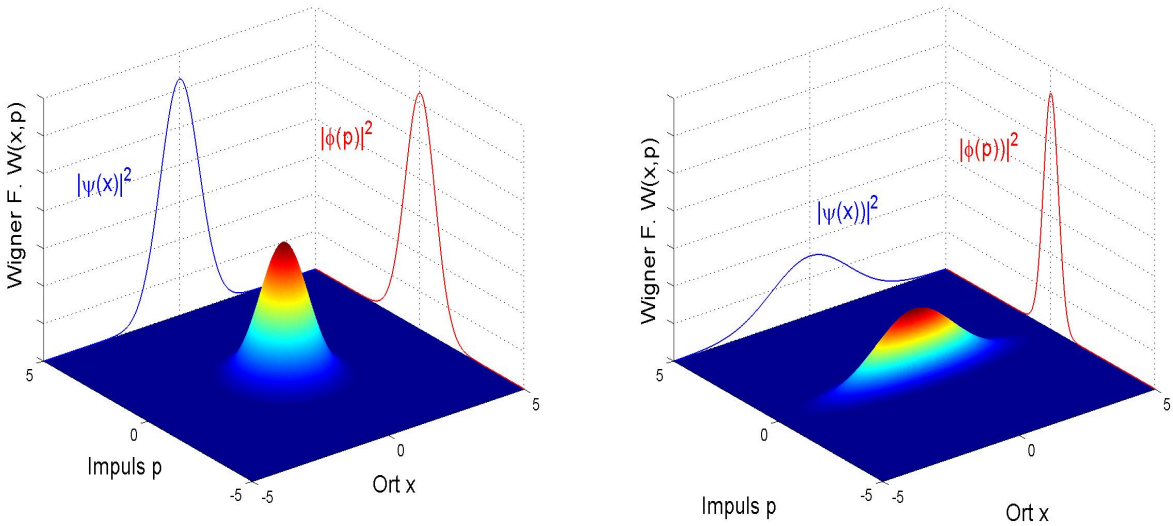


Abbildung 3.1: *Darstellung eines Gauß'schen Wellenpakets mit Hilfe der Wignerfunktion. Im ersten Bild hat* $|\psi(x)|^2$ *eine Breite von* $\sigma = 1$*, im zweiten von* $\sigma = 2$*. Bei Integration der Wignerfunktion über den gesamten Ort erhält man* $|\phi(p)|^2$*. Integriert man über alle möglichen Impulse, ergibt sich* $|\psi(x)|^2$*. Diese beiden Funktionen sind in den Grafiken gezeigt.*

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x,p)\,dx = \rho(p,p) \;\; \left(= |\phi(p)|^2\right)$$

Und es gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x,p)\,dp\,dx = tr(\rho) = 1$$

Grafisch wird das in Abbildung 3.1 dargestellt. Integriert man die Wigner Funktin über den gesamten Ort x so erhält man $|\phi(p)|^2$. Umgekehrt ergibt sich das Betragsquadrat der Ortsdarstellung bei Aufsummierung (im diskreten Fall, bei endlich vielen Werten) über die Impulskoordinate.

3. Bei einer Translation der Wellenfunktion ψ ändert sich $W(x,p)$ dementsprechend:

$$\psi(x) \longrightarrow \psi(x+a) \;\; W(x,p) \longrightarrow W(x+a,p)$$

und:

$$\psi(x) \longrightarrow e^{ip'x\frac{1}{\hbar}}\psi(x) \;\; W(x,p) \longrightarrow W(x,p-p')$$

Grafisch wird die Translation in Abbildung 3.2 für $a = 1$ und $p' = 3$ dargestellt. An den Funtionen $|\psi(x)|^2$ und $|\phi(p)|^2$, die als Projektionen wieder in den Grafiken enthalten sind, kann man das gut erkennen.
Es sei noch zusätzlich anzumerken, dass die als zweites angeführte Transformation $\phi(p) \longrightarrow \phi\left(p-p'\right)$ entspricht.

4. Leitet man die *zeitliche Entwicklung der Wignerfunktion* mit Hilfe der Schrödingergleichung her, wie es in [4] in Kapitel 8, Seite 11 gemacht wurde, kommt man zu folgendem Ergebnis:

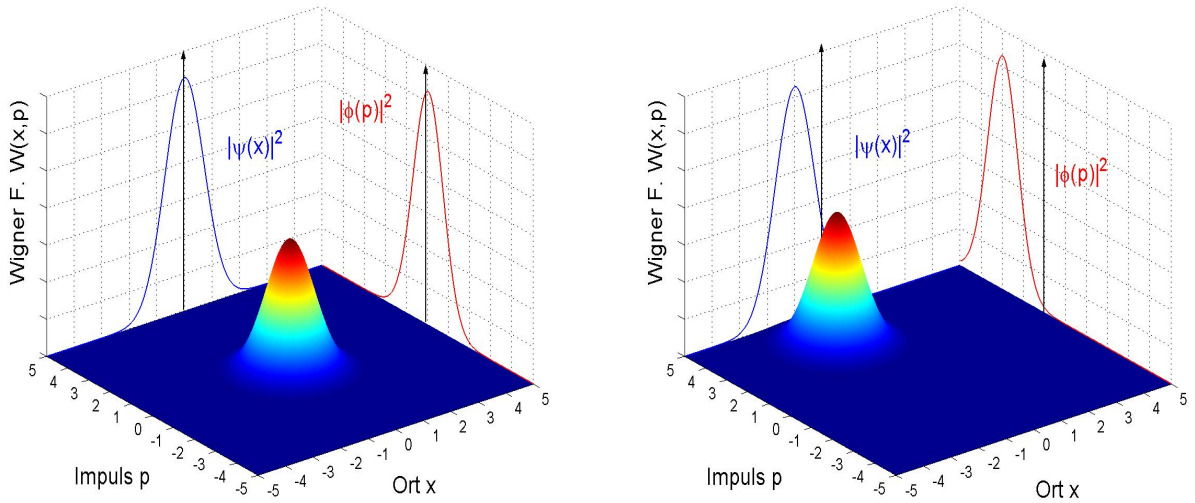


Abbildung 3.2: *Darstellung der Translation eines Gauß'schen Wellenpakets.* $|\psi(x)|^2$ *wird um* $a = 1$ *zu* $|\psi(x+a)|^2$ *verschoben.* $|\phi(p)|^2$ *ändert sich um* $p' = 3$ *zu* $\left|\phi\left(p - p'\right)\right|^2$*. Die Wignerfunktion verschiebt sich dementsprechend.*

> "Für ein System, das aus harmonischen Oszillatoren und freien Teilchen besteht, können wir die leichteren klassischen Bewegungsgleichungen lösen und erhalten die exakte quantenmechanische Lösung!"[4]

Das heißt, zum Beispiel, dass ein klassisches Teilchen in einem harmonischen Oszillatorpotenzial die gleiche Bewegung ausführt, wie ein quantenmechanisches Teilchen im Phasenraum. Daher wurden die Beispiele „Die Bewegung im harmonischen Oszillatorpotenzial" und „Das gekoppelte Pendel" zuerst klassisch untersucht. Die quantenmechanischen Äquivalente folgen noch.

3.2 Die Darstellung von Wellenfunktionen

1. **Das Gauß'sche Wellenpaket**
   In der Einleitung wurde die Heisenberg'sche Unschärferelation (Gleichung 2.1) kurz beschrieben. grafisch soll hier mit Hilfe der Wignerfunktion dargestellt werden, was mit einem Gauß'schen Wellenpaket passiert, wenn Δx beziehungsweise Δp klein wird. Dieser Effekt wird durch Varieren der Standartabweichung σ erzeugt.

$$\psi_0(x) = N \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2 \cdot \sigma^2}\right)$$

[4] Dieses Zitat wurde aus dem Englischen übersetzt und befindet sich im Kapitel 8 auf der Seite 13 oben von [4].

Die Ausgangswellenfunktion wird im ersten Bild der Abbildung 3.3 gezeigt. Im zweiten Bild sieht man einen gequetschten Zustand bei örtlicher Schärfe (Δx klein). Im dritten Bild kann der Impuls genauer bestimmt werden und x ist unscharf. Die Abbildung beinhaltet auch die Darstellung $|\psi_0(x)|^2$ als Vergleich.

2. **Interferenz zweier Wellenpakete**
   Ein Teilchen befindet sich in einem Überlagerungszustand und wird durch zwei Wellenpakete dargestellt. Dabei tritt ähnlich wie bei dem Doppelspaltexperiment, das in Kapitel 2 beschrieben wurde, Interferenz im Phasenraum auf. Diese Interferenz ist ein charakteristisch quantenmechanisches Phänomen. Die Welleneigenschaften des Teilchens treten dabei hervor. Denn, befinden sich zwei klassische Ensembles von Teilchen nahe bei einander kann im Phasenraum keine Interferenz entstehen, wie es in der Abbildung 1.7 zu sehen ist. Die gesamte Wellenfunktion, bestehend aus zwei räumlich getrennten Gauß'schen Wellenpaketen lautet:

$$\psi_0(x) = N \cdot \left[\exp\left(-\frac{(x+x_0)^2}{2 \cdot \sigma^2} \right) + \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2 \cdot \sigma^2} \right) \right]. \tag{3.3}$$

   Die auftretende Interferenz in Abbildung 3.3 mit $x_0 = 1.8$, $\sigma^2 = 0.25$ und dem Normierungsfaktor $N = \frac{1}{\sqrt{2}}$ befindet sich entlang der p-Achse und ist in der Darstellung von $\left|\psi(x)^2\right|$ nicht zu erkennen. Bei der Integration über p kommt an dieser Stelle 0 heraus, weil die Wignerfunktion positive (farblich: gelb-rot-schwarz) und negative Werte (farblich: hellblau-dunkelblau-schwarz) annimmt. Hier erkennt man den Vorteil, wenn man das System mit Hilfe der Wignerfunktion darstellt.

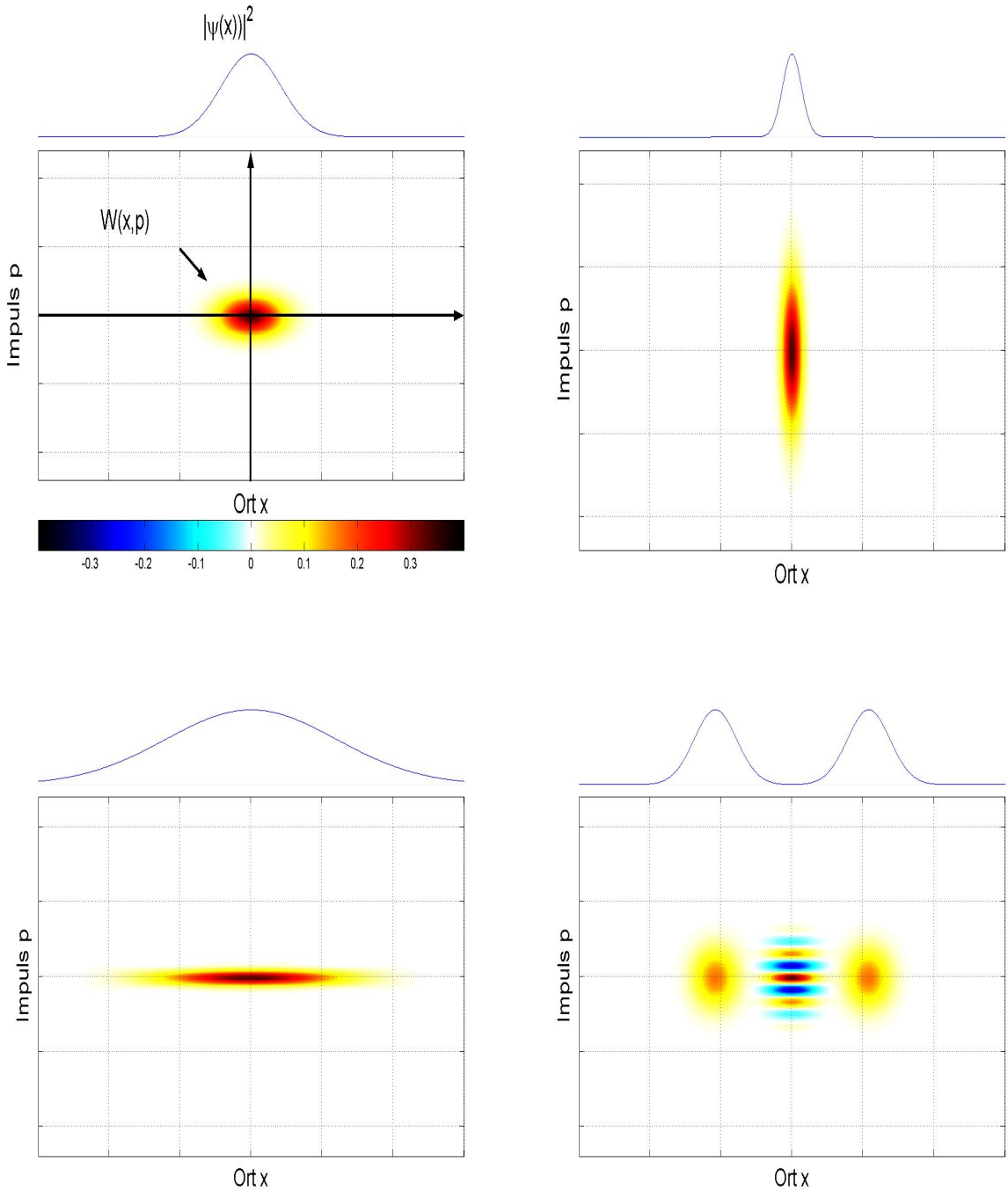


Abbildung 3.3: *Darstellung von Wellenfunktionen mit Hilfe der Wignerfunktion durch Farbkodierung von $W(x,p)$. Von links oben nach unten und rechts das obere Bild: 1. Ein Gauß'sches Wellenpaket mit $\sigma^2 = \frac{1}{2}$; 2. das Wellenpaket im, in x gequetschten Zustand bei $\sigma^2 = 0.05$ und 3. das Wellenpaket in p gequetscht, mit $\sigma^2 = 4$. Im vierten Bild ist die Überlagerung von zwei Wellenpaketen gezeigt. Es tritt dabei Interferenz auf, die in der Mitte der Grafik zu sehen ist.*

Kapitel 4

Einfache zeitabhängige Probleme

Wie schon in Kapitel 2 beschrieben, wird die zeitliche Entwicklung von Wellenfunktionen mit der Schrödingergleichung berechnet. Die Konstanten $\hbar$ und m werden stets eins gesetzt. Die Darstellung mit Hilfe der Wignerfunktion erfolgt für gewählte Zeitschritte.

1. **Die Quantenmechanische Dispersion**
   Man geht von einem Gauß'schen Wellenpaket aus, von der Form:

   $$\psi_0(x) = \left(\pi \cdot \sigma^2\right)^{-\frac{1}{4}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + ik_0 x\right)$$

   Man betrachtet die Lösung der Schrödingergleichung für die zeitliche Entwicklung eines Systems und geht von $\psi_0(x)$ aus, wobei in diesem Fall $V(x) = 0$ angenommen wird. Die Lösung dieser Differenzialgleichung 2. Ordnung mit der Anfangsbedingung $\psi_0(x)$ kann mit Hilfe der Fouriertranformation leicht hergeleitet werden (das sei hier weggelassen)[1]. Gibt man nun mit der Lösung $\psi(x,t)$ die Wignerfunktion aus, kann diese dreidimensional dargestellt werden.

   An den Grafiken in Abbildung 4.1 kann man gut erkennen, wie durch die gemischte Darstellung von Impuls p und Ort x mit Hilfe der Wignerfunktion das Gauß'sche Wellenpaket im Phasenraum dispergiert, bzw. auseinander fließt. Es ist der gleiche Effekt wie bei der Dispersion eines Ensembles von klassischen Teilchen, siehe Abbildung 1.6. Die Teile mit größerem Impuls haben eine größere Geschwindigkeit und sind daher bei $t \geq 0$ vor der mittleren Position des Wellenpakets. Das Gauß 'sche Wellenpaket wird auseinandergezogen und verschmälert sich in der Darstellung im Phasenraum.

2. **Bewegung eines gequetschten Wellenpakets im Oszillatorpotenzial**
   Es wird ein Gauß'sches Wellenpaket betrachtet, das folgende Form hat:

   $$\psi_0(x) = N \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2 \cdot 2^2} + i3x\right).$$

[1] Berechnet wurde dies zum Beispiel in [6] in Kapitel 2.9 auf der Seite 63 oder in [8] in Kapitel 3.3.2 Seite 60 und 61.

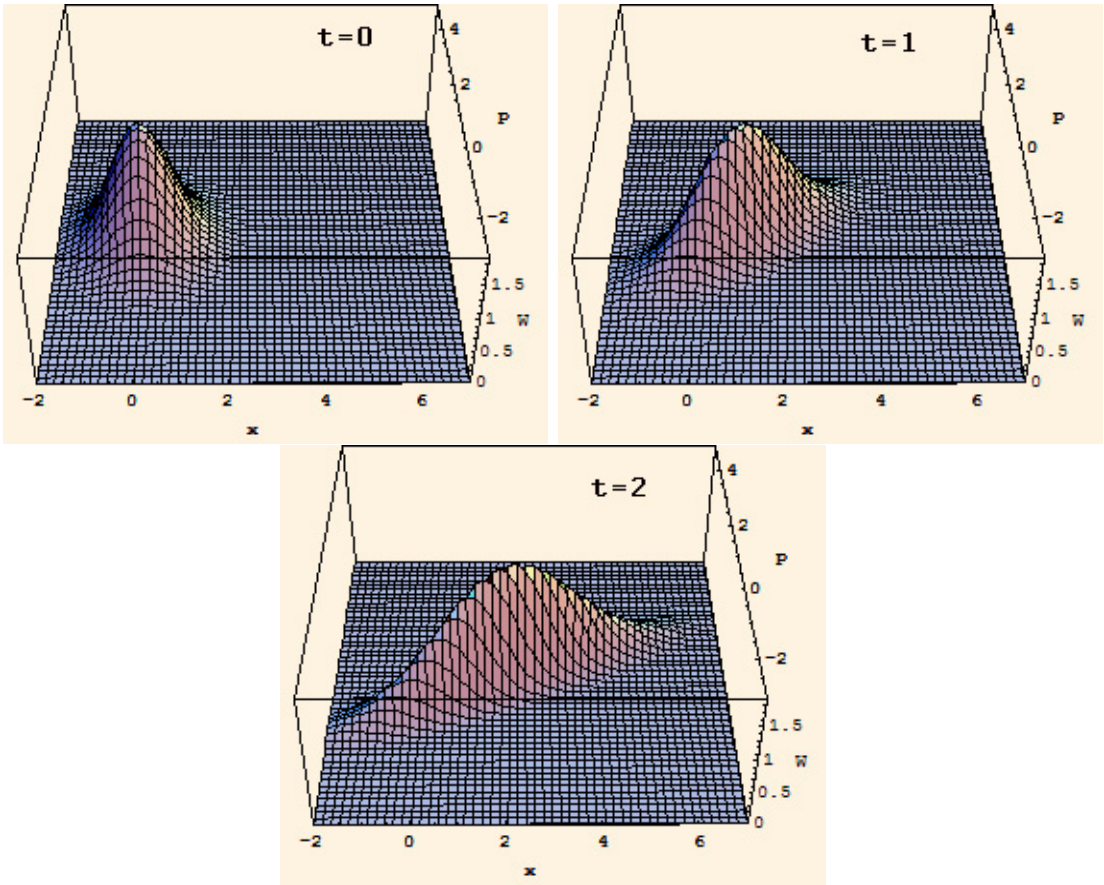


Abbildung 4.1: *Ein Gauß'sches Wellenpaket dispergiert. Der vergleichbare Effekt für ein Ensemble klassischer Teilchen ist in Abbildung 1.6 zu sehen. Das Wellenpaket in Grafik 1-3 wurde in Mathematica analytisch berechnet mit* $x_0 = 0$; $\sigma = 1$; $k_0 = 1$.*)*

Das ist ein gequetschtes Wellenpaket, das sich mit dem Impuls $p = 3$ im Phasenraum nach rechts bewegt. Dieses Wellenpaket befindet sich in einem harmonischen Oszillatorpotenzial und verändert sich zeitlich entsprechend der Schrödingergleichung (siehe Geichung 2.3). Mit Hilfe der Wignerfunktion wird es im Phasenraum dargestellt.
Mit einem numerischen Verfahren, dem Crank Nicolson Verfahren, das im Anhang beschrieben wird, wird die zeitliche Entwicklung des Wellenpakets berechnet.

In Abbildung 4.2 ist zu erkennen, dass sich das gequetschte Wellenpaket auf einer Kreisbahn im Phasenraum bewegt. Die Bewegung im Phasenraum ist die gleiche, wie bei einem Ensemble von klassischen Teilchen, die sich im harmonischen Oszillatorpotenzial befinden. Die praktische Berechnung und damit die Darstellung stimmen mit der Theorie (Eigenschaft 4 der Wignerfunktion) überein.

3. **Interferenz zweier Wellenpakete in einem Oszillatorpotenzial**
Zwei Wellenpakete, die die Form Gleichung 3.3 haben, befinden sich im Oszillatorpotenzial (welches die gleiche Form hat, wie im vorherigen Beispiel). Die zeitliche Entwicklung wird in Abbildung 4.3 für $t = 0$; 0.64; 2.24; 3.36 gezeigt.

   Die beiden Gauß'schen Wellenpakete bewegen sich aufeinander zu, interferieren örtlich und bewegen sich wieder auseinander. Hier ist klar der Vorteil der Wignerfunktion, der gemischten Darstellung von Ort und Impuls, erkennbar. Bereits zum Zeitpunkt $t = 0$ gibt es eine Interferenz, die des Impulses p (erstes Bild der Abbildung 4.3), die sich durch Drehung in eine Interferenz des Orts x entwickelt (drittes Bild der Abbildung 4.3). In der Darstellung $|\psi(x,t)|^2$ ist das nicht erkennbar.

4.1 Potenzialbarrieren

4.1.1 Die positive Potenzialstufe

Trifft ein klassisches Teilchen auf eine Potenzialstufe gibt es zwei mögliche Fälle, die auftreten können. Ist die Energie des Teilchens kleiner als die der Barriere, wird das Teilchen reflektiert. Ist das Gegenteil der Fall, bewegt sich das Teilchen über die Barriere hinweg und wird etwas verlangsamt. Der Übergang vom einen zum anderen Fall ist scharf bei $E = V_0$. Trifft ein quantenmechanisches Teilchen, das durch ein Gauß'sches Wellenpaket dargestellt wird, auf eine Potenzialbarriere, passiert in der zeitlichen Entwicklung Folgendes, wobei drei Fälle betrachtet werden:

1. $V_0 \gg E$: Die Energie des Teilchens, die gegeben ist durch $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{k^2}{2}$, ist viel kleiner als V_0. Das Wellenpaket wird vollständig reflektiert. Mit Hilfe der Wignerfunktion ist das grafisch in Abbildung 4.4 dargestellt. Ab dem zweiten Bild treten Interferenzerscheinungen entlang der x-Achse auf, das liegt daran, dass Teile des Wellenpakets bereits unterschiedliche Impulse haben und daher interferieren.

2. $E \gg V_0$: In diesem Fall bewegt sich fast der gesamte Teil des Wellenpakets über die Barriere hinweg, bis auf einen kleinen Teil, der reflektiert wird. Das kann man an der leichten Interferenz zwischen den beiden Wellenpaketen in Abbildung 4.5 erkennen. Das

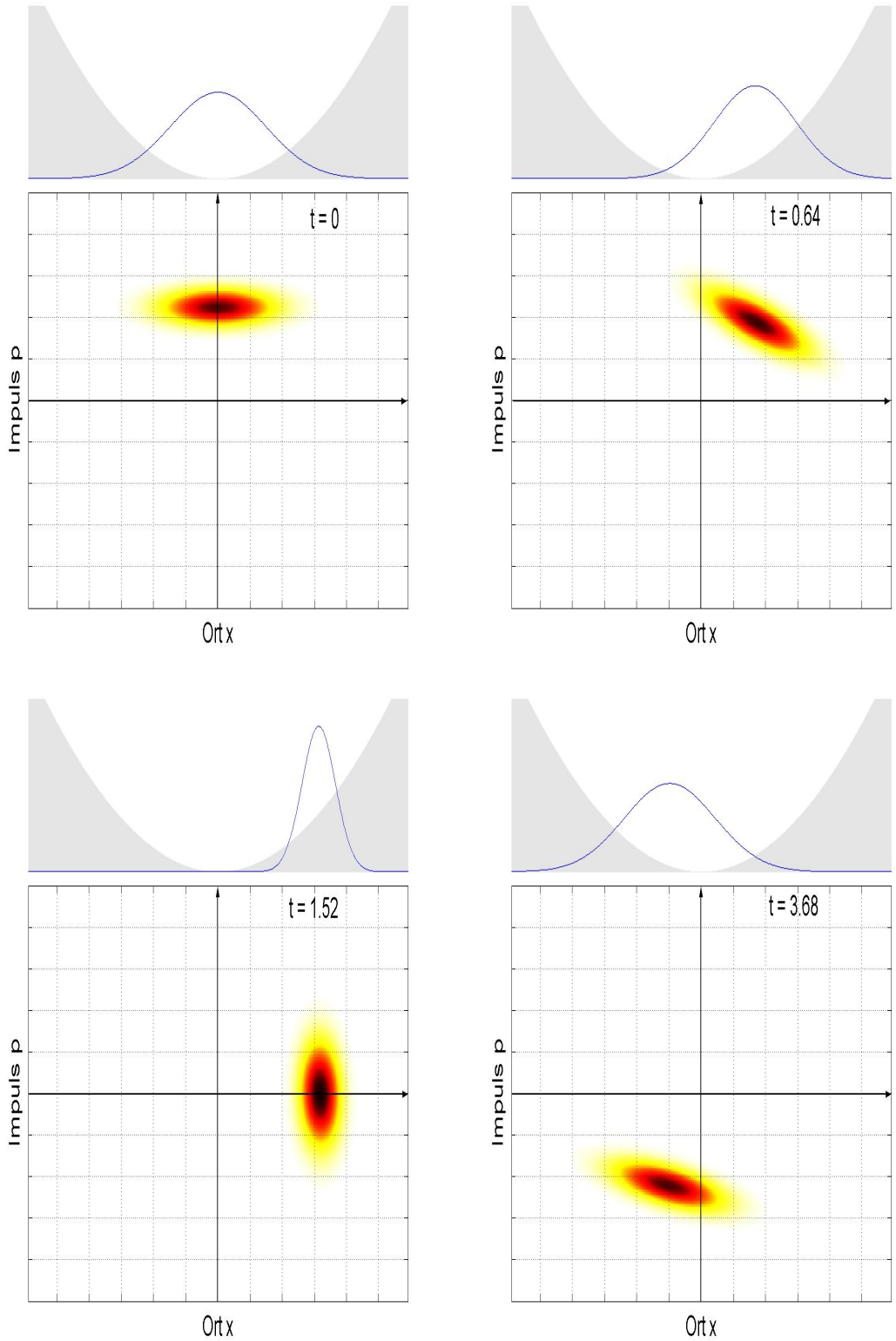


Abbildung 4.2: *Ein in p gequeschtes Gauß'sches Wellenpaket bewegt sich im harmonischen Oszillatorpotenzial. Dabei wird x von -5 bis 5 mit 500 Gitterpunkten erzeugt.*

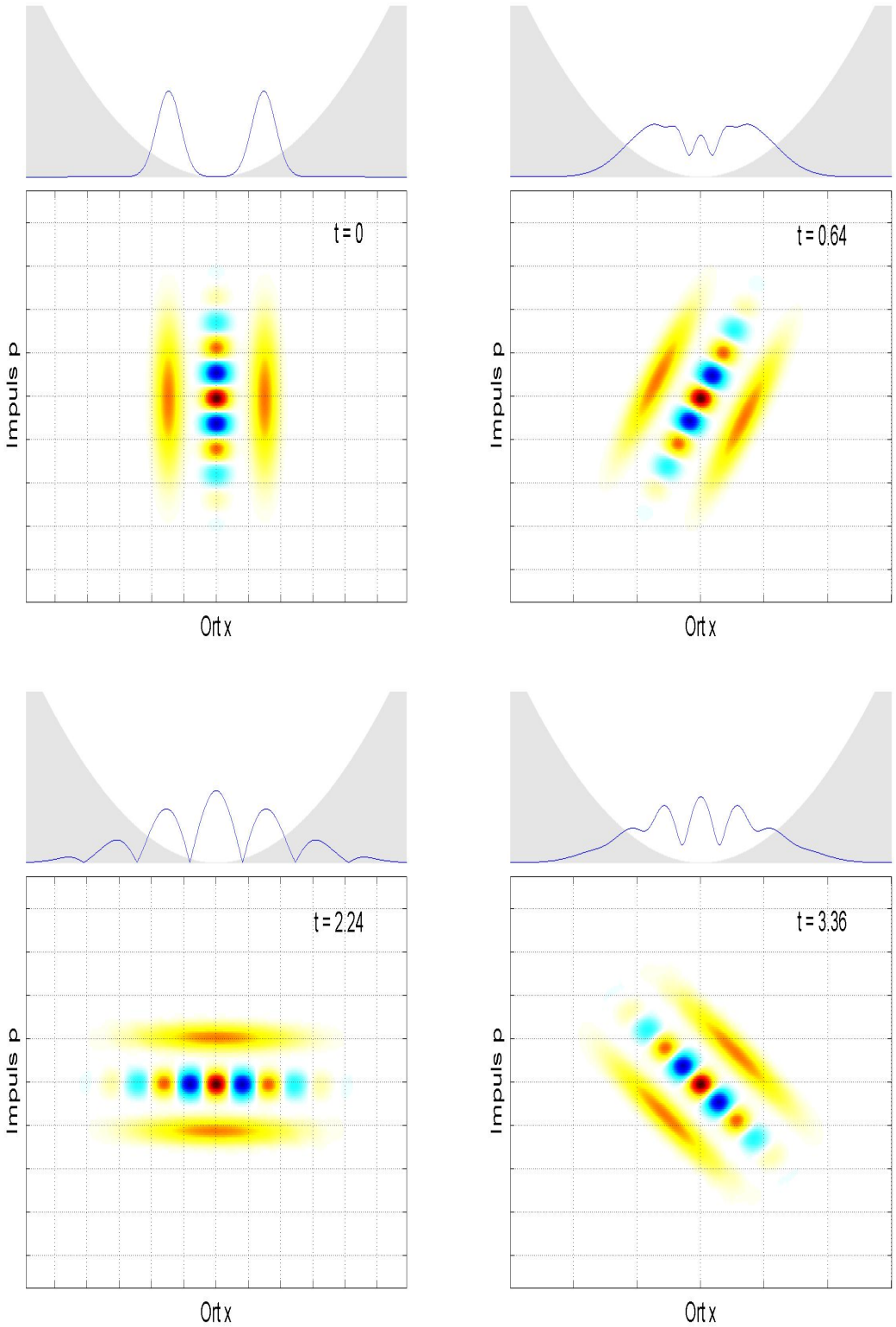


Abbildung 4.3: *Ein Überlagerungszustand der Form gemäß Gleichung 3.3 befindet sich im harmonischen Oszillatorpotenzial.*

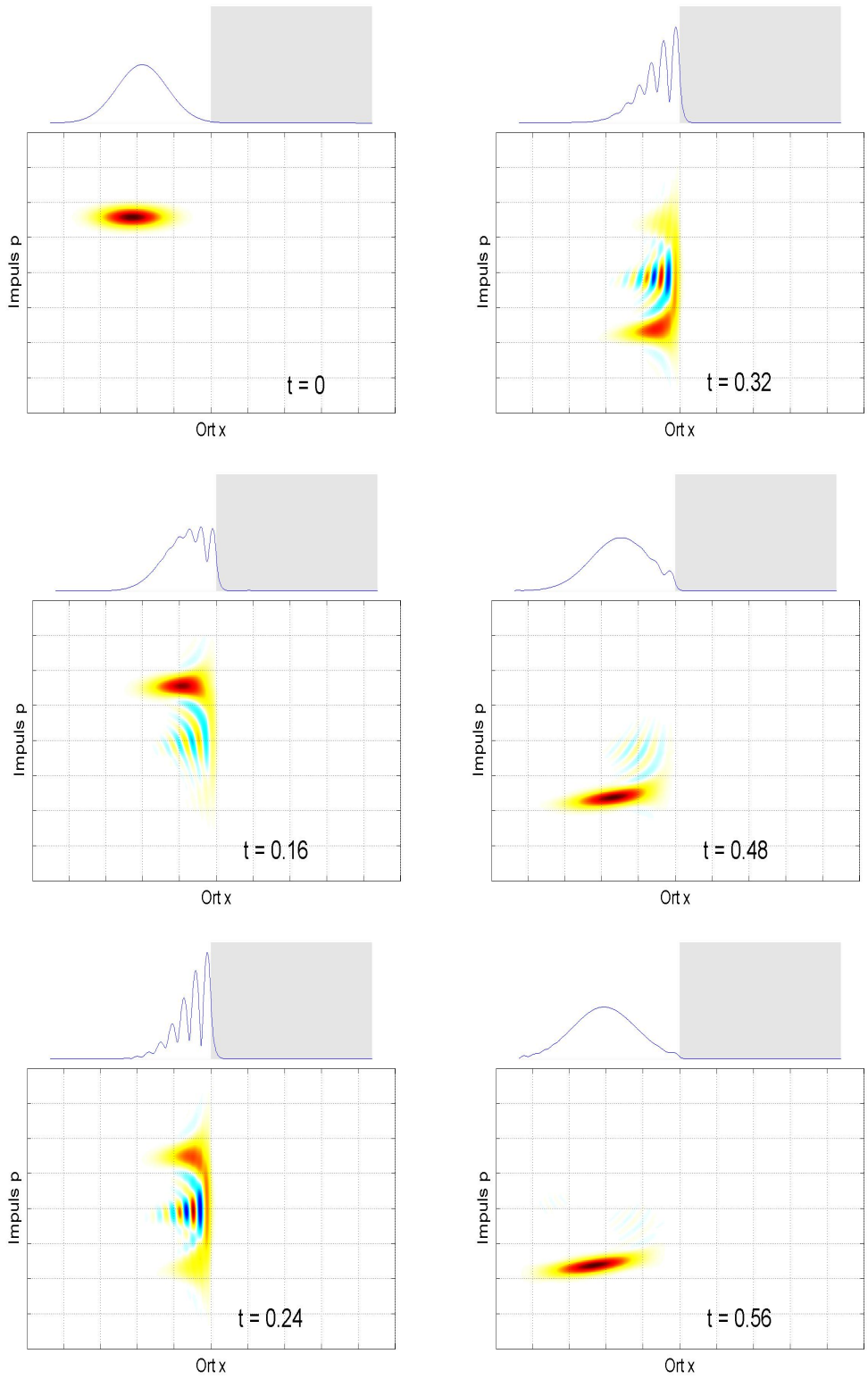


Abbildung 4.4: *Ein Gauß'sches Wellenpaket trifft auf eine Potenzialstufe V_0. Es gilt für die Energie des Wellenpakets E: $V_0 \gg E$. Daher tritt Reflexion auf.*

Wellenpaket wird zusätzlich etwas langsamer. Um diesen Effekt zu veranschaulichen, ist in Abbildung 4.5 auf der rechten Seite die zeitliche Entwicklung des Wellenpakets zu den gleichen Zeitpunkten ohne Potenzialstufe dargestellt. Vergleicht man das rechte und linke Bild unten in der Abbildung 4.5, so ist das Wellenpaket im linken Bild in x etwas zurück und liegt „tiefer“, das heißt der mittlere p-Wert ist niedriger.

3. $E \sim V_0$: Die Wahrscheinlichkeiten, dass das Teilchen reflektiert oder transmittiert wird sind ungefähr gleich. Es ist nicht möglich zu berechnen, an welcher Stelle sich das Teilchen befindet. grafisch ist dieser Fall in Abbildung 4.6 dargestellt. Es ist auch erkennbar, dass die transmittierte Welle im Vergleich zum reflektierten Wellenpaket an Impuls, beziehungsweise Geschwindigkeit, verloren hat.

Der Übergang vom einen zum anderen Fall ist fließend und es kann nur die Wahrscheinlichkeit ausgegeben werden, mit welcher sich das Teilchen an einem bestimmten Ort befindet. Zusätzlich tritt in allen Fällen eine Dispersion auf, daher sind die Wellenpakete nach der Transmission, beziehungsweise Reflexion leicht verzogen. Betrachtet man die Entwicklung des Wellenpakets ohne Potenzialstufe, siehe Abbildung 4.5 rechts von oben bis unten, erkennt man, dass dieser Effekt nicht vernachlässigbar ist. Die 6. Grafik (rechts unten) in Abbildung 4.5 wurde zum Zeitpunkt $t = 0.07$ berechnet, der gleiche Zeitpunkt zu dem in den anderen Abbildungen (4.4, 4.6) das letzte Bild (rechts unten) berechnet wurde. Daher sind diese Grafiken vergleichbar und die Dispersion gleich stark ausgeprägt. In Abbildung 4.6 im 6. Bild führt die Dispersion dazu, dass die Interferenz verzerrt und daher in der Darstellung $|\psi(x,t)|^2$ nicht mehr zu erkennen ist. In der Darstellung mit Hilfe der Wignerfunktion hingegen, ist die Interferenz gut zu erkennen.

4.1.2 Die negative Potenzialstufe

Ein klassisches Teilchen, das auf eine negative Potenzialstufe trifft, wird schneller. Bei einem quantenmechanischen Objekt ist die Situation vergleichbar mit einem Photon, das auf ein Medium mit niedrigerem Brechungsindex trifft. Das Photon kann reflektiert oder transmittiert werden. Wird es transmittiert, so erhöht sich ebenfalls die kinetische Energie des Objektes. Dieser Vorgang ist in Abbildung 4.7 gezeigt. In der Grafik ist der reflektierte Teil des Wellenpakets kaum zu erkennen. Daher ist die Wahrscheinlichkeit sehr gering, dass das Teilchen reflektiert wird. Der erhöhte Impuls des transmittierten Teils der Wellenfunktion ist durch eine positive Verschiebung in der p-Koordinate in der Wignerdarstellung zu erkennen. Dieser Teil bewegt sich auch schneller von einem Ort zum nächsten.

4.1.3 Der Tunneleffekt

Trifft ein klassisches Teilchen auf eine Potenzialbarriere einer beliebigen Breite und gilt $V_0 \gg E$, so wird das Teilchen reflektiert. In der Quantenmechanik gibt es den so genannten Tunneleffekt. Das Teilchen kann die Potenzialbarriere überwinden, wenn diese eine gewisse Höhe und Breite hat, auch wenn die Energie dafür im klassischen Sinn nicht ausreichen würde. Die Wahrscheinlichkeit, dass dieser Fall eintritt nimmt exponentiell mit der Höhe und Breite der

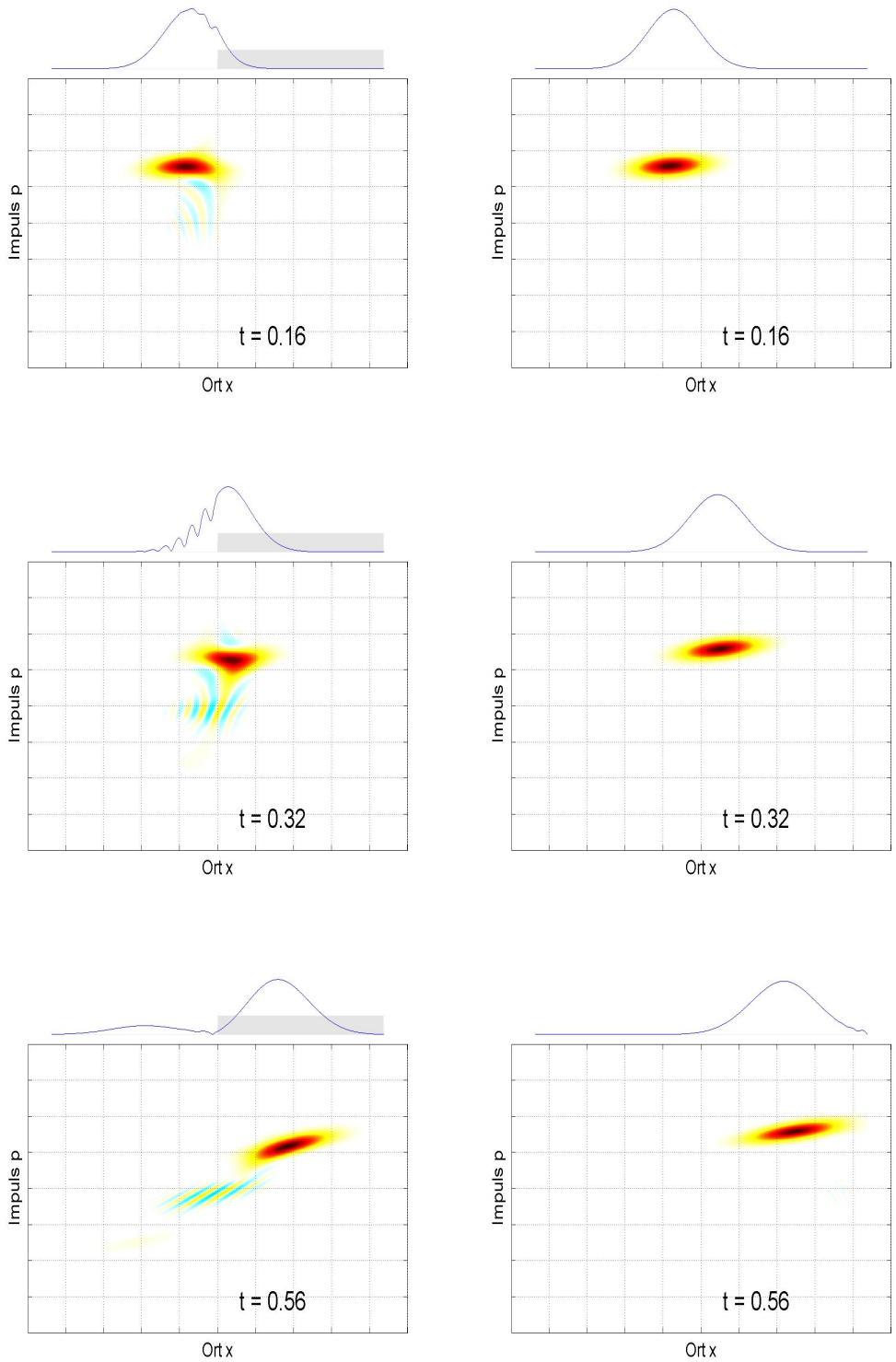


Abbildung 4.5: *Ein Gauß'sches Wellenpaket trifft auf eine Potenzialstufe V_0. Es gilt für die Energie des Wellenpakets E: $E \gg V_0$. Das Wellenpaket bewegt sich über die Barriere hinweg. Rechts ist für den Vergleich ein Wellenpaket ohne Potenzialbarriere dargestellt.*

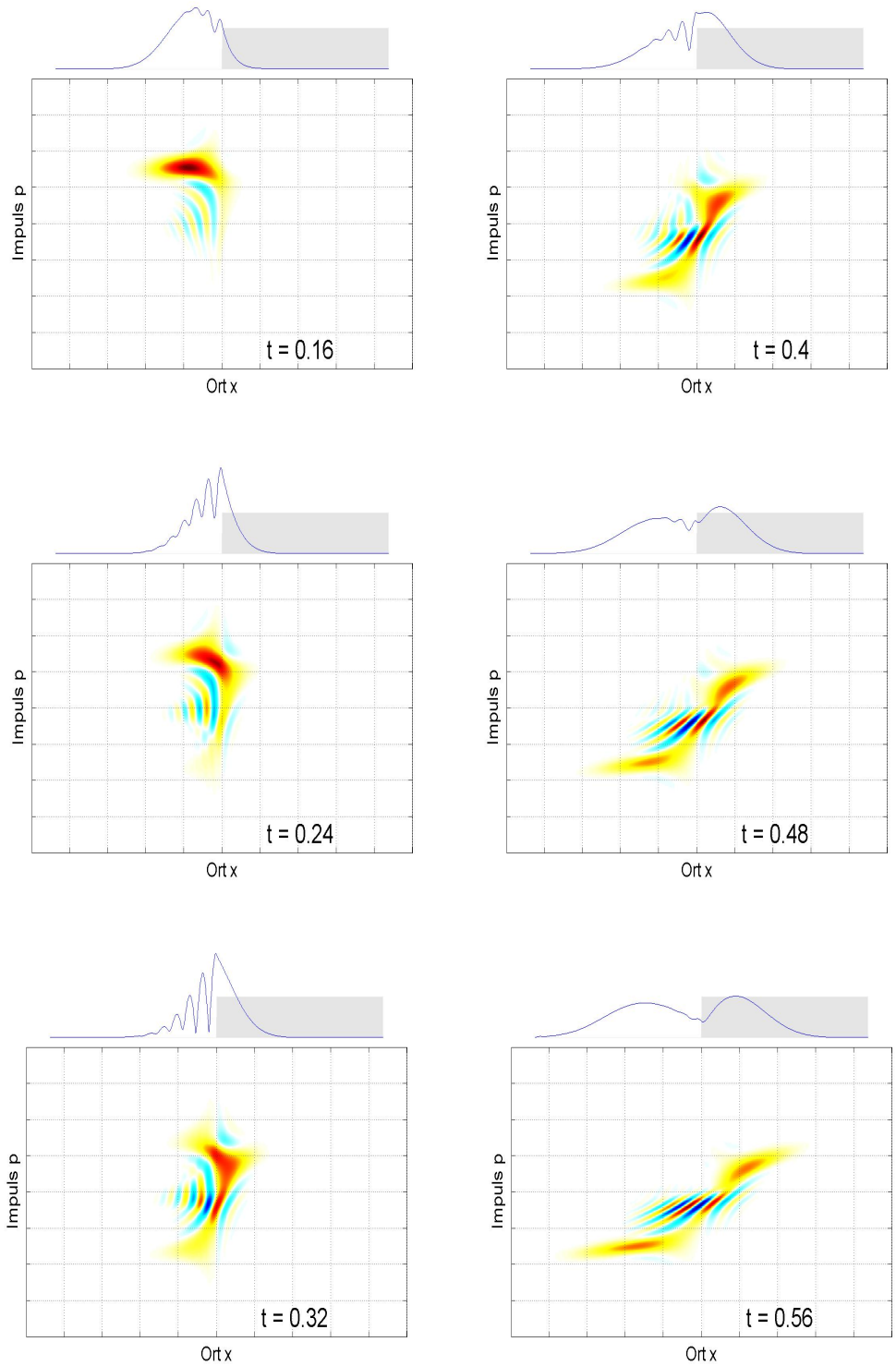


Abbildung 4.6: *Ein Gauß'sches Wellenpaket trifft auf eine Potenzialstufe V_0. Es gilt für die Energie des Wellenpakets E: $E \sim V_0$. Ein Teil des Wellenpakets wird reflektiert, ein Teil bewegt sich über die Barriere hinweg.*

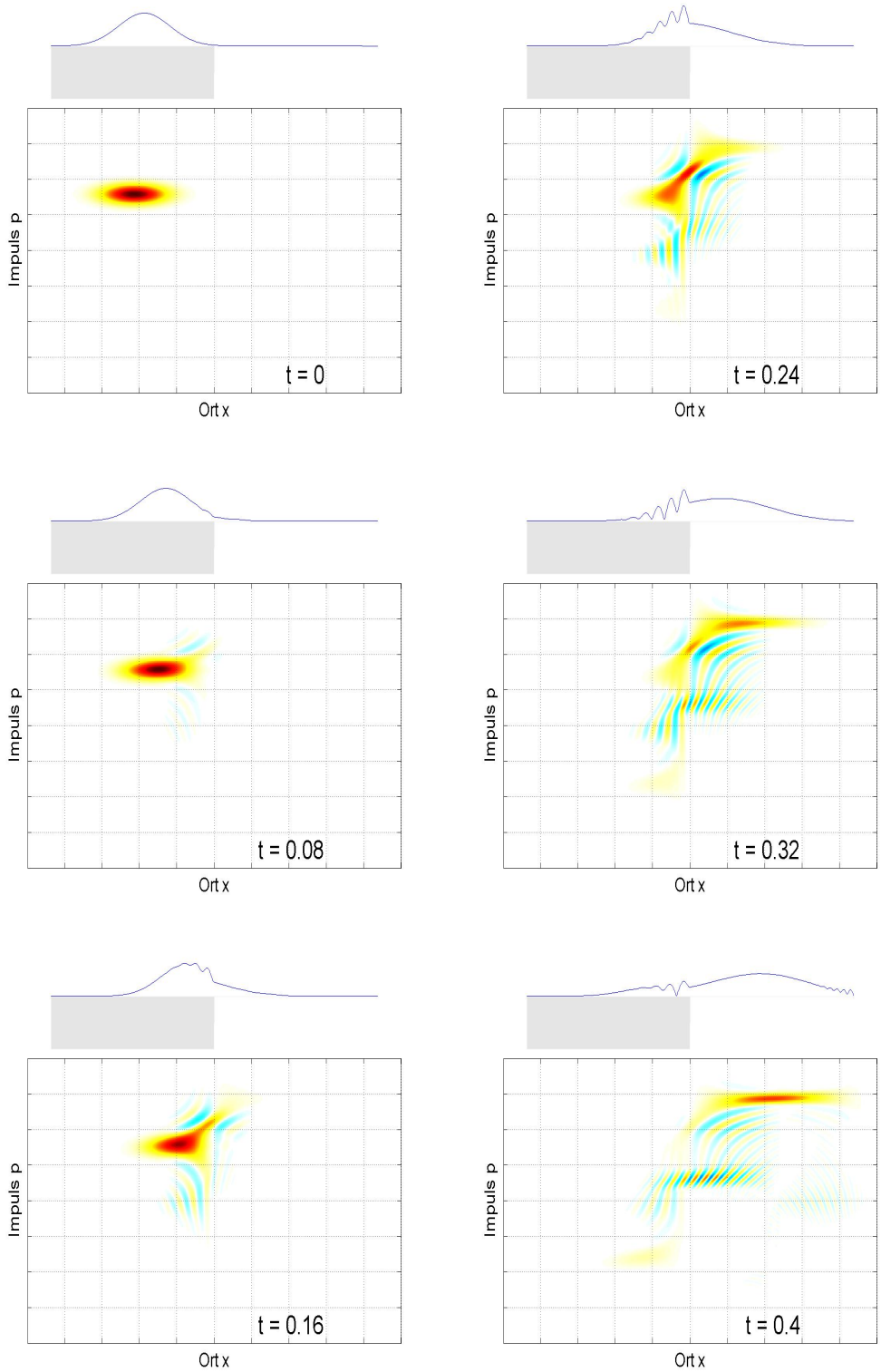


Abbildung 4.7: *Ein Wellenpaket trifft auf eine negative Potenzialstufe $V_0 = -80$. Ein kleiner Teil wird reflektiert und ein großer bewegt sich mit erhöhtem Impuls weiter nach rechts.*

Barriere ab:

$$P \sim exp\left(-2 \cdot L \cdot \sqrt{2 \cdot (V_0 - E)}\right).$$

L ist die Breite, V_0 die Höhe der Barriere und E ist die Energie des Teilchens.[2] Dieser Effekt ist auch mit einer anderen Form der Heisenbergschen Unschärferelation zu erklären: $\Delta t\ \Delta E\ \geq \frac{\hbar}{2}$. In einem sehr kleinen Zeitintervall ist die Enegie so unscharf, dass die Wahrscheinlichkeit existiert, dass das Teilchen die Potenzialbarriere überwindet. Mit Hilfe der Wignerfunktion ist dieser Tunneleffekt in Abbildung 4.8 dargestellt. Das Potenzial der Barriere hat die gleiche Höhe wie im Fall 1 der Potenzialstufen, der grafisch in Abbildung 4.4 dargestellt wurde. Daher liegt es an der geringen Breite der Barriere, dass die Wahrscheinlichkeit besteht, dass das Teilchen durchtunnelt.

4.1.4 Das kastenförmige Potenzialloch

Wenn sich ein Gauß'sches Wellenpaket auf ein kastenförmiges Potenzialloch zu bewegt, wird an der ersten Grenzfläche ein Teil reflektiert. Wie bei der negativen Potenzialstufe ist dieser Vorgang vergleichbar mit einem Photon, das auf ein Medium mit niedrigerem Brechungsindex trifft. Die räumliche Ausdehnung (naürlich nur in einer Dimension) des Mediums ist in diesem Fall sehr gering: $b = 10 \cdot \Delta x$. An der zweiten Grenzfläche, vom optisch dünneren zum optisch dichteren Medium wird ebenfalls ein Teil des Wellenpakets reflektiert. Insgesamt ist der zeitliche Verlauf in Abbildung 4.9 dargestellt. Wie auch in den anderen bereits angeführten Beispielen tritt hier Interferenz zwischen dem reflektierten und dem transmittierten Teil des Wellenpakets auf.

Werden mehrere dünne Medien in gleichen Abständen eingefügt, gibt es mehrere Grenzflächen und daher eine stärkere Reflexion. Das ist in Abbildung 4.10 zu sehen. Je schwächer die Transmission, desto schwächer ist die Interferenz ausgeprägt, die in der Mitte der Grafiken zu sehen ist.
Bei gleicher Dicke und gleicher Potenzialhöhe $V_0 = -80$ der negativen Potenziallöcher, hängt die Stärke der Reflexion auch vom Abstand dazwischen ab. Das Maximum scheint in dieser Zusammensetzung bei einem Abstand von $15 \cdot \Delta x$ zu sein. Das ist in Abbildung 4.11 zu sehen.

[2] Diese Information ist entnommen aus [6] Kapitel 21, Seite 141 unten.

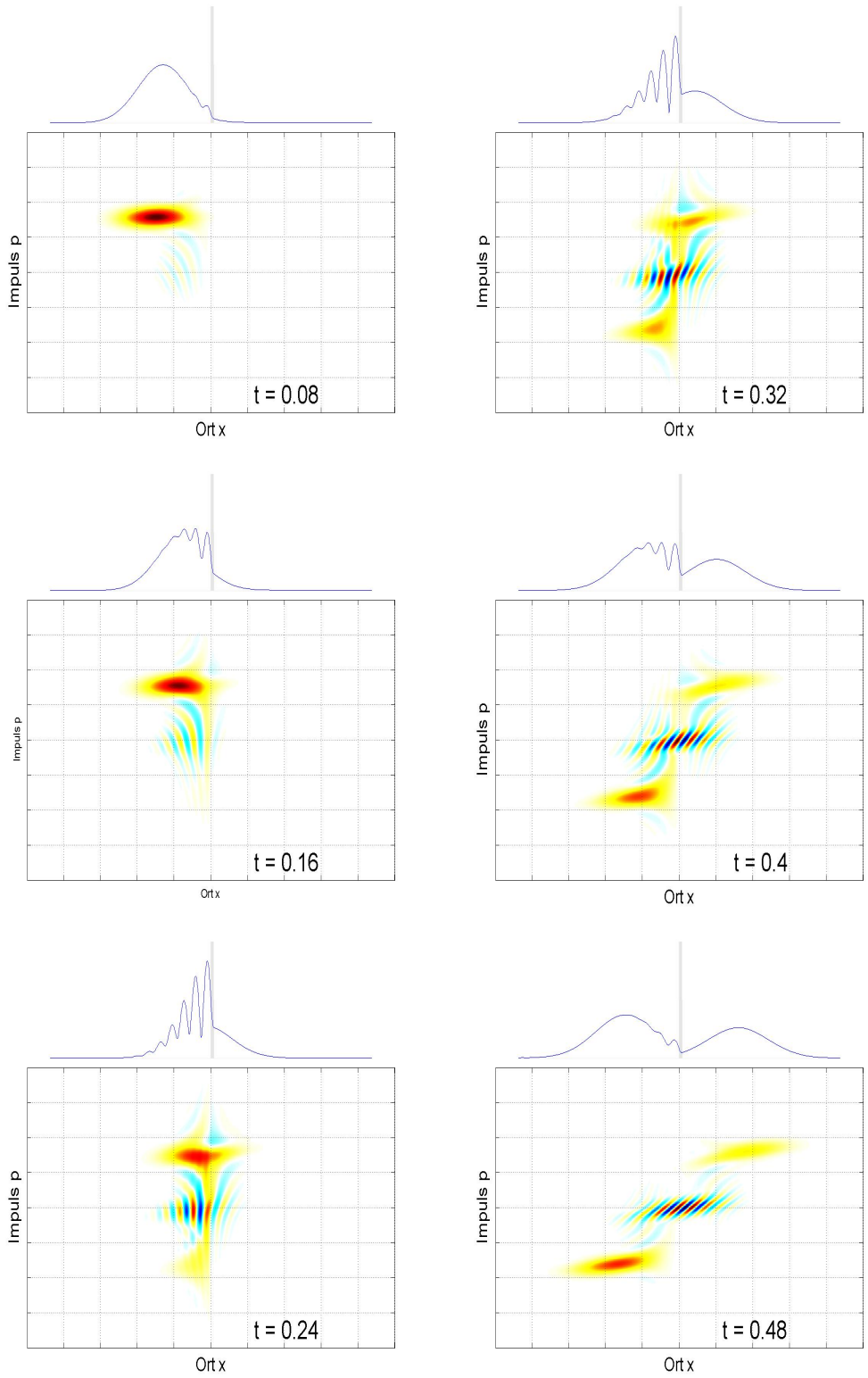


Abbildung 4.8: *Der Tunneleffekt: Ein Wellenpaket trifft auf eine dünne Potenzialbarriere und wird teils refletiert und teils transmittiert.*

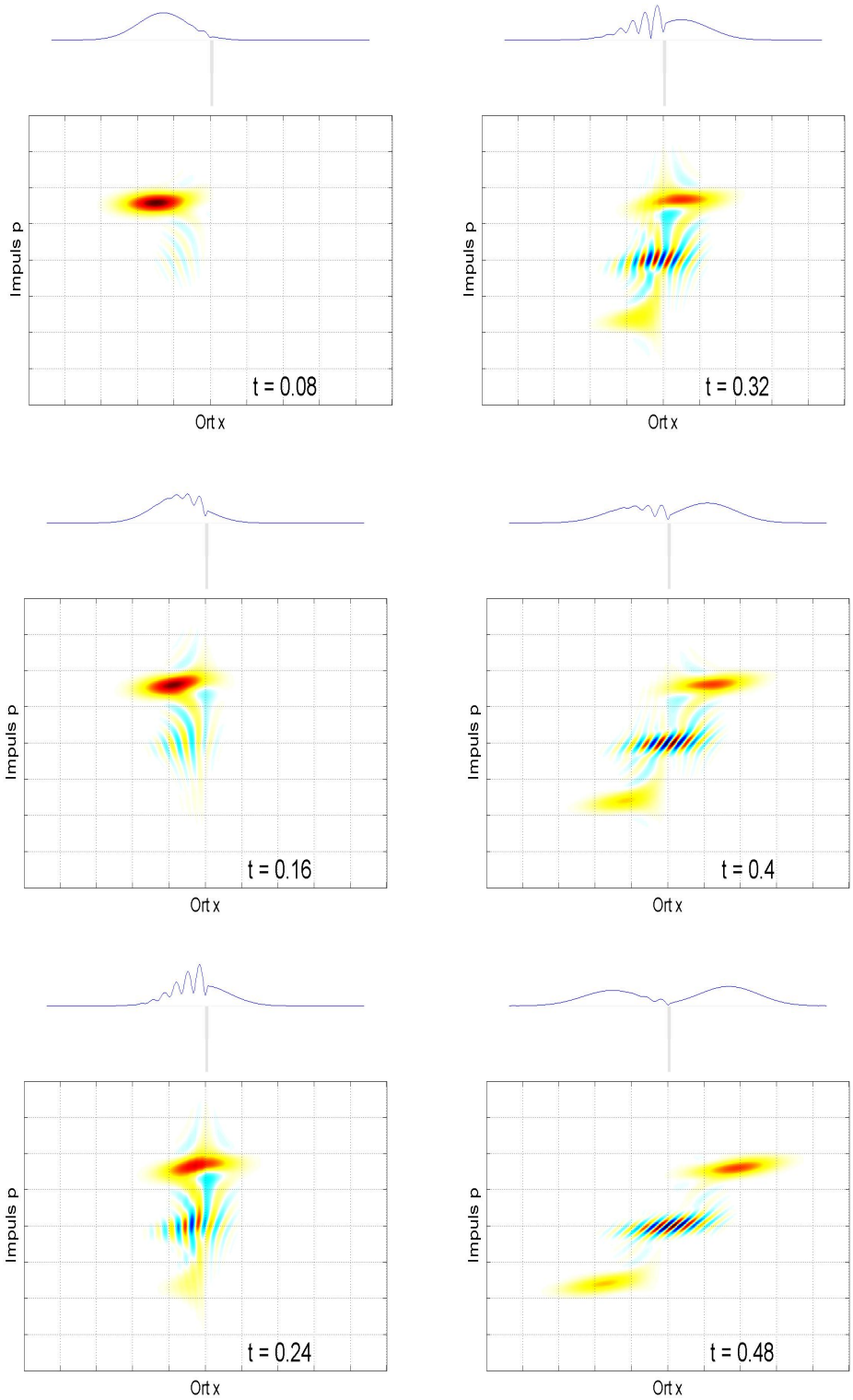


Abbildung 4.9: *Ein Wellenpaket trifft auf ein kastenförmiges Potenzialloch: Teils Reflexion, teils Trasmission.*

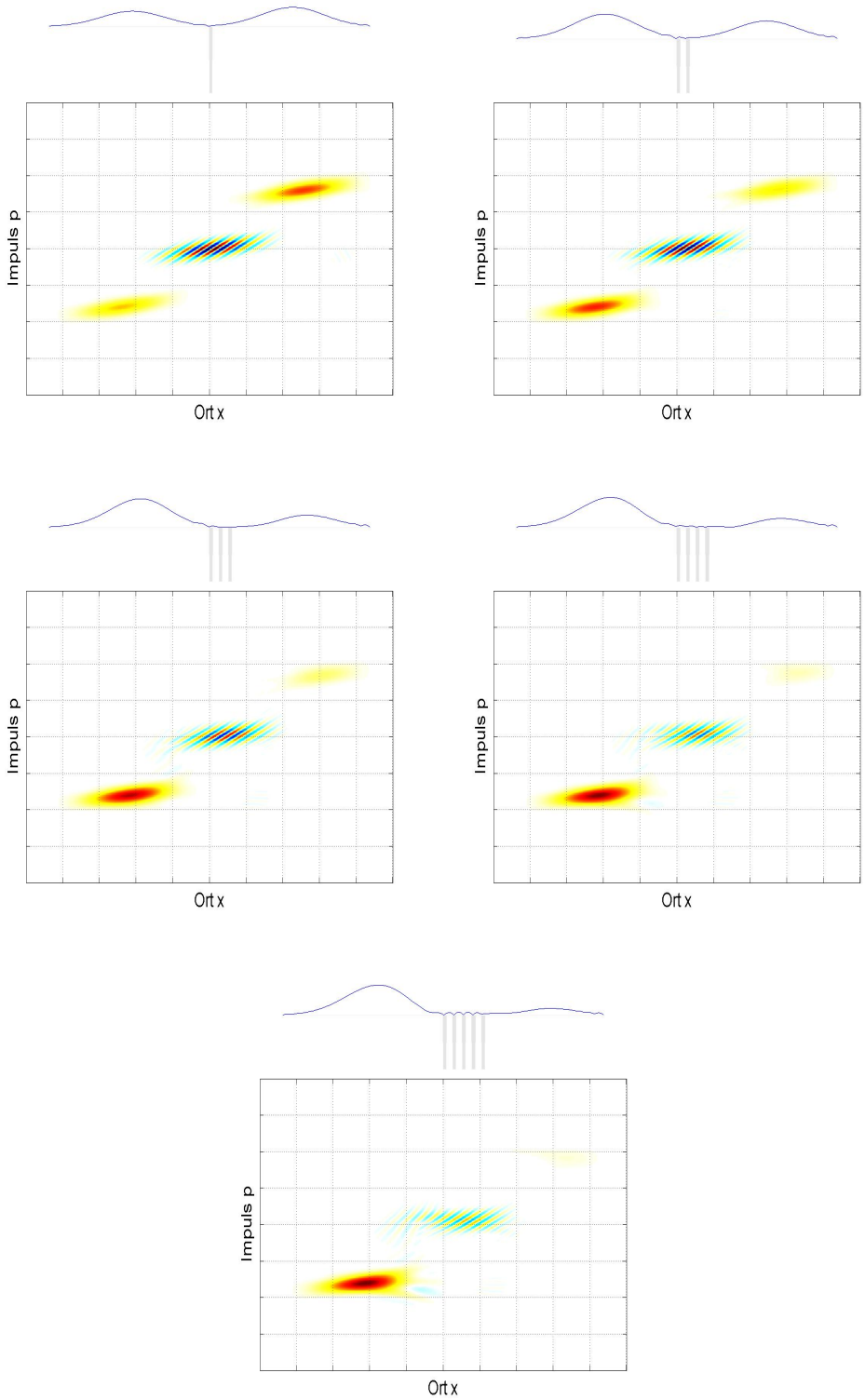


Abbildung 4.10: *Mehrere Potenziallöcher nebeneinander: Die Stärke der Reflexion hängt von der Anzahl der Glenzflächen ab. Die Ergebnisse wurden folgendermaßen berechnet: Ein Wellenpaket mit einem Potenzialloch bis fünf Potenziallöchern zum Zeitpunkt* $t = 0.56$*. Die Breite der Löcher ist* $10 \cdot \Delta x$ *und der Abstand dazwischen* $20 \cdot \Delta x$*.*

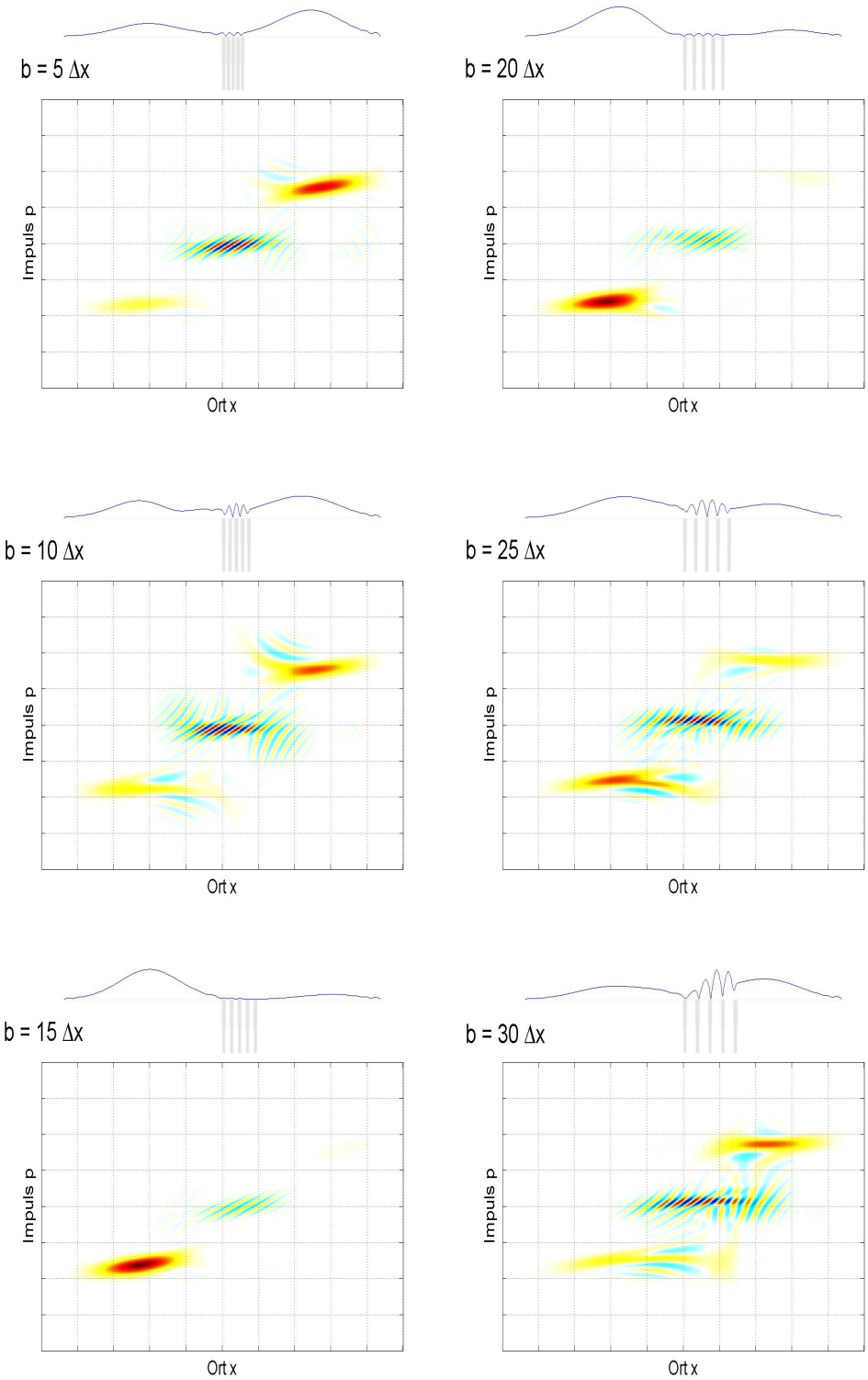


Abbildung 4.11: *Fünf Potenziallöcher: Der Abstand b zwischen den Löchern wurde variiert. Die Stärke der Reflexion hängt vom Abstand ab.*

Kapitel 5

Dekohärenz mit der Wignerfunktion

Betrachtet man die Dekohärenz, die bereits in Kapitel 2 beschrieben wurde, erkennt man, dass weder $\psi(x)$ noch die Fouriertransformierte $\phi(p)$ grafisch dargestellt werden können. Nur die Dichtematrix beschreibt das System. Daher kann die Wignerfunktion mittels Gleichung 3.2 ausgegeben werden, und eine grafische Darstellung ist möglich.
In Kapitel 2 ist ein quantenmechanisches Experiment beschrieben worden, in welchem über mehrere Messergebnisse mit der Vorraussetzung gemittelt wird, dass die Anfangsbedingungen möglichst gleich sind. Die exakt gleichen Anfangsbedingungen wird man nicht erzielen können. Es kann zum Beispiel vorkommen, dass die Energie eines Teilsystems aufgrund von Umwelteinflüssen fluktuiert, was sich in einer zusätzlichen Phase des Systems auswirkt. Abhängig von der Stärke der Schwankungen kann bei der Mittelung der Messergebnisse die Interferenz stark geschwächt werden bis völlig verloren gehen. Folgende Beispiele sollen das zeigen.

5.1 Dekohärenz bei zwei Wellenpaketen

Ausgehend von φ_0, definiert in Gleichung 3.3, erhält die rechte Wellenfunktion einen zusätzlichen Faktor $\exp(i\phi)$. Analytisch berechnet ergibt die Wignerfunktion bei $x_0 = 5$, $\sigma^2 = 1$ beispielsweise:

$$\begin{aligned} W(x,p,\phi) = \sqrt{\pi}\cdot\exp\left(-p^2-(x-5)^2\right) + \sqrt{\pi}\cdot\exp\left(-p^2-(x+5)^2\right) + \\ +\sqrt{\pi}\cdot\exp\left(-p^2-x^2\right)\cdot\cos(10p+\phi) \end{aligned} \tag{5.1}$$

Bei $\phi = 0$ erhält man die grafische Darstellung dieser Funktion, die in Abbildung 5.1 im ersten Bild zu sehen ist. Wählt man nun zum Beispiel $n = 6$ beliebige Zufallszahlen für ϕ zwischen $[0, 2\pi]$ und addiert die Resultate $W_{ges}(x,p) = \frac{1}{n}\cdot\sum_{l=1}^{n} W(x,p,\phi_l)$, erhält man das zweite Bild in Abbildung 5.1.

Die Interferenz ist kaum noch zu erkennen. Von welchen Parametern hängt es ab, wie wenig die Interferenz durch Messung erfassbar ist? In der Gleichung 5.1 ist der letzte Term ausschlaggebend: Es reichen bereits zwei Messungen der Form $W(x,p,\phi)$ und $W(x,p,\phi+\pi)$ um Dekohärenz zu erzeugen. Das heißt, es wird wahrscheinlich nicht vodergründig von der Anzahl der Messungen abhängen. Je breiter die Werte von ϕ im Intervall $[0, 2\pi]$ gestreut sind, desto weniger ist bei der Mittelung die Interferenz zu beobachten. Folgendes Beispiel wird das noch genauer zeigen.

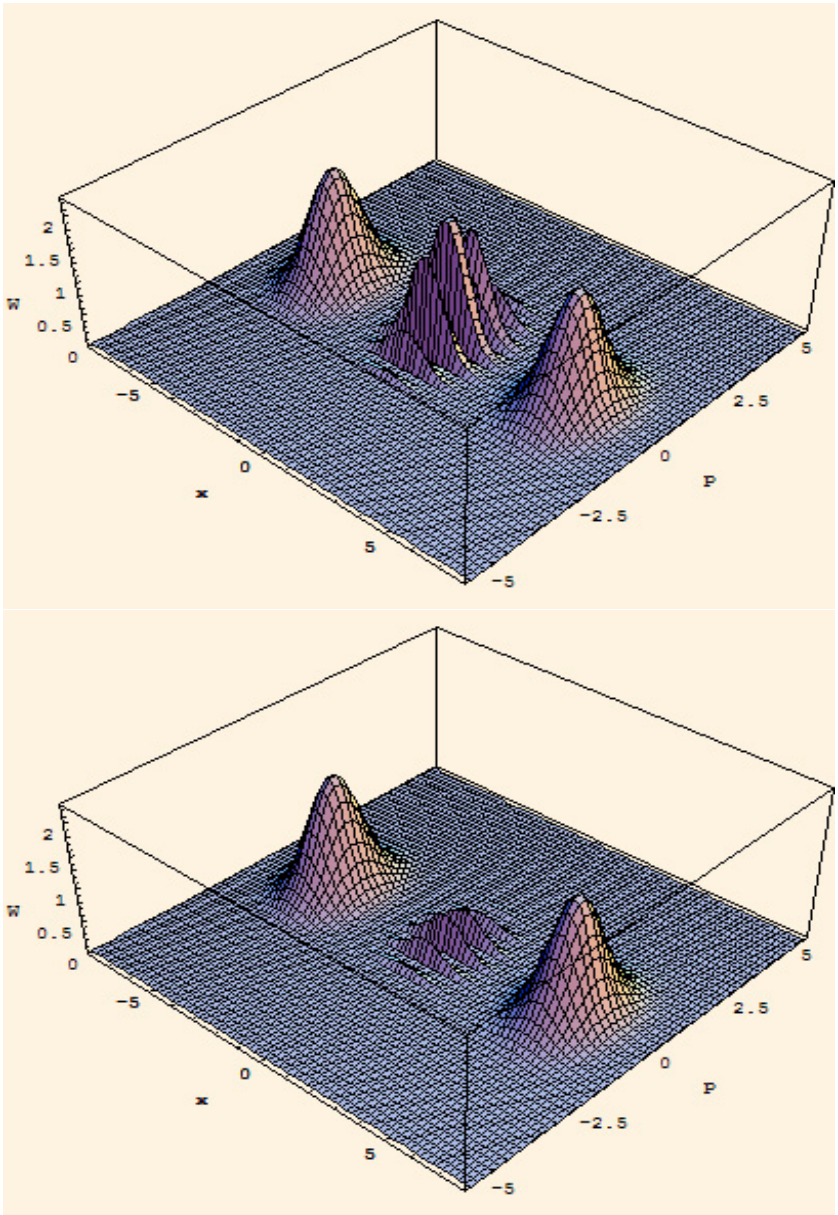


Abbildung 5.1: *Dekohärenz: Die Interfernz, die zwischen zwei Wellenpaketen im ersten Bild noch stark ausgeprägt ist, ist im zweiten Bild stark abgeschwächt. Die Wignerfunktionen von 6 Wellenpaketen mit 6 Zufallszahlen für die Phase ϕ wurden dabei addiert.*

5.2 Die numerische Methode

Man wählt die gleiche Anfangswellenfunktion nach Gleichung 3.3, die mit 400 Gitterpunkten numerisch dargestellt wird. Weiters werden n normalverteilte Zufallszahlen für ϕ ausgegeben. Der Mittelwert μ und die Standardabweichung σ der Normalverteilung $N(\mu, \sigma)$ werden folgendermaßen gewählt: $\mu = 0,\ \sigma = 0, \pi, \frac{\pi}{2}....$ Für jedes ϕ_l wird die Dichtematrix ρ_l berechnet, die das System beschreibt. Es folgt die Summierung über alle ρ_l (was der Mittelung der Messergebnisse entspricht), und schließlich die Berechnung von $W(x, p)$ mittels Gleichung 3.2. Dabei ist die Reihenfolge entscheidend. Würde man die Summe über alle ϕ_l bilden, so würde man eine quantenmechanische Überlagerung dieser Wellenfunktionen erhalten. Ein neues ψ entstünde, das folgende Form hat:

$$\psi(x) = \frac{1}{n} \cdot \left(n \cdot \exp\left(-\frac{(x + x_0)^2}{2 \cdot \sigma^2} \right) + \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2 \cdot \sigma^2} \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{n} \exp(i\phi_k) \right) \right)$$

Das würde bedeuten, dass sich ein abgeschlossenes quantenmechanisches System in all diesen Zuständen zugleich befindet. Ist ϕ und damit die Energie breit gestreut, fällt die rechte Seite der Wellenfunktion durch $\sum_{k=1}^{n} exp(i\phi_k) \longrightarrow 0$ weg. Dieses ψ hat aber nichts mit den verschiedenen, voneinander unabhängigen Experimenten und dem Ergebnis zu tun.
Bei $n = 1000$ normalverteilten Zufallszahlen $N\left(0; \sigma = 0,\ \frac{\pi}{4},\ \frac{\pi}{2},\ \pi,\ 2 \cdot \pi\right)$ für ϕ und 400 Gitterpunkten für x ergeben sich die Grafiken in Abbildung 5.2.

Rein optisch ist in Abbildung 5.2 gut zu erkennen, dass die Interferenz umso stärker abnimmt, je breiter die normalverteilten Zufallszahlen im Intervall $[0, 2\pi]$ gestreut sind. Um eine zusätzliche mathematische Auswertung möglich zu machen, habe ich für dieses Beispiel ein Maß für die Interferenz festgelegt. Die Interferenz tritt in der Mitte des Bildes um die Punkte $(x \approx 0, p)$ auf.

$$\|W(x = 0, p)\| = \sum_k |W(x = 0, p_k)|$$

Je kleiner dieser Wert wird, desto weniger ist die Interferenz zu messen. Mit 20 Werten wurden die Mittelwerte mit der dazugehörigen Standardabweichung gebildet, die in Tabelle 5.1 aufgelistet sind.

In dieser Grafik (Abbildung 5.3) ist sehr gut zu erkennen, wie klein der Wert $\|W(x = 0, p)\|$ mit Zufallszahlen für ϕ, die $N(0, \pi)$-verteilt sind, ist und sich bei wachsendem ϕ kaum ändert. Es ist anzunehmen, dass bei gleichen Anfangsbedingungen auch hier eine Abhängigkeit der Interferenz von $\cos(\phi + 10 \cdot p)$ (zumindest für die Anzahl Gitterpunkte $\rightarrow \infty$) wie bei der analytischen Lösung in Gleichung 5.1 gegeben ist. Betrachtet man die Stelle $p = 0$, so besteht die Abhängigkeit von $\cos(\phi)$. In Abbildung 5.4 soll dargestellt werden, dass bei breit gestreuten ϕ-Werten der Cosinus negative und positive Werte annimmt und die Summe dadurch klein wird. Sind die Werte von ϕ $N\left(0, \frac{\pi}{4}\right)$-verteilt, ist $\cos(\phi)$ vorwiegend positiv und der Wert der Summe wird groß.

Für $p \geq 0$ verschiebt sich die in Abbildung 5.4 gezeigte Funktion $\cos(x)$ nach rechts. Diese Verschiebung ändert aber nichts daran, dass die Breite der Normalverteilung der Phasen ϕ für die Stärke der Abschwächung der Interferenz ausschlaggebend ist.

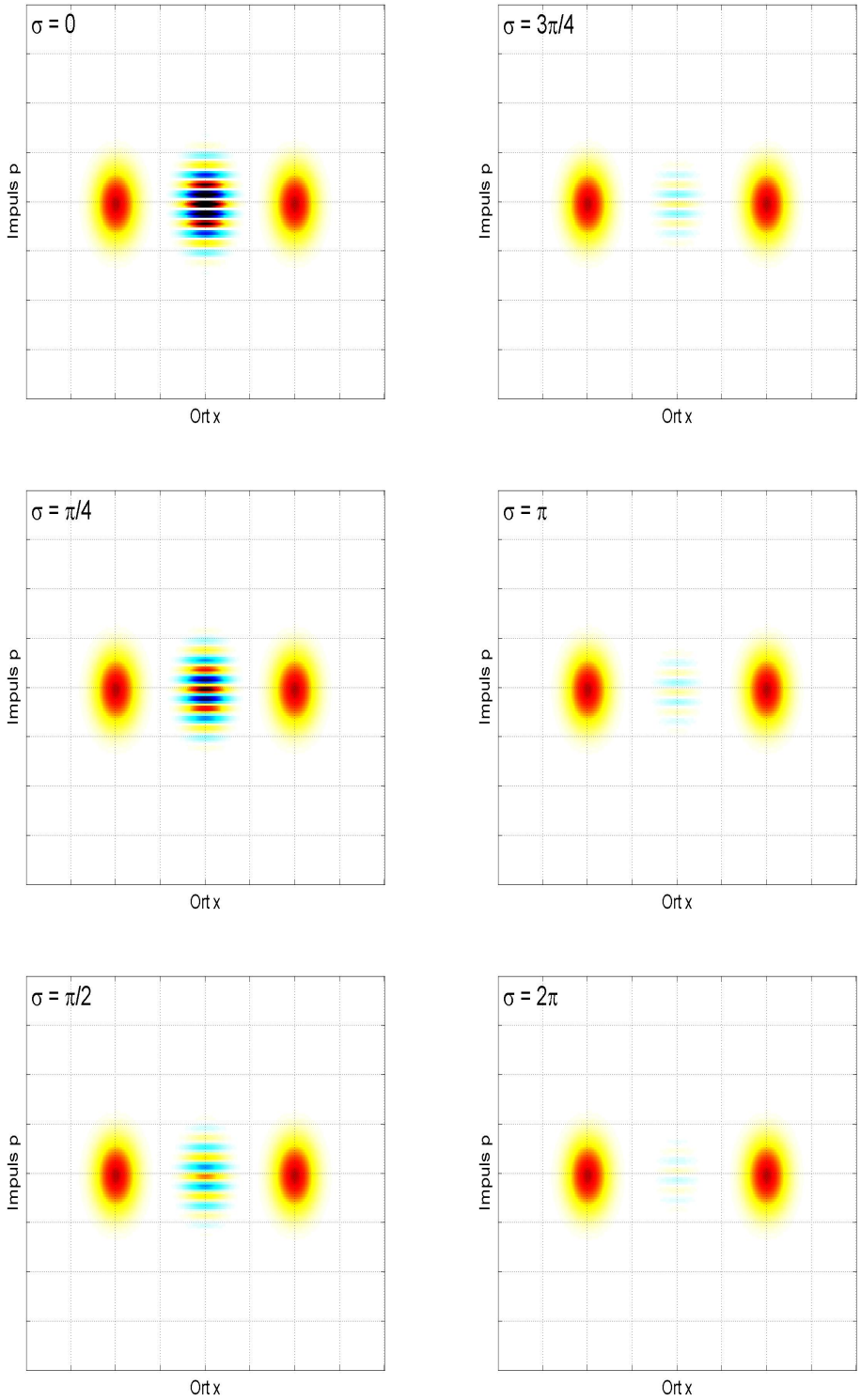


Abbildung 5.2: *Die Phasen für $n = 1000$ Wellenfunktionen sind $N(0, \sigma)$-verteilt. Die Dichtematrix wurde für jede Wellenfunktion berechnet. Die 1000 Ergebnisse wurden anschließend addiert. Dabei entsteht Dekohärenz, die von σ abhängt.*

Tabelle 5.1: *Werte von* $\|W\,(x=0,p)\|$

σ	Mittelwert	Standardabweichung
0	38.2317	–
$\frac{\pi}{5}$	31.4415	0.3120
$\frac{\pi}{4}$	28.1566	0.3997
$\frac{\pi}{3}$	22.1232	0.6694
$\frac{\pi}{2}$	11.1564	0.9276
$2\cdot\frac{\pi}{3}$	4.4751	0.9918
$3\cdot\frac{\pi}{4}$	2.6791	0.9274
π	1.3485	0.6283
$3\cdot\frac{\pi}{2}$	1.3570	0.6580
$2\cdot\pi$	1.0659	0.6373

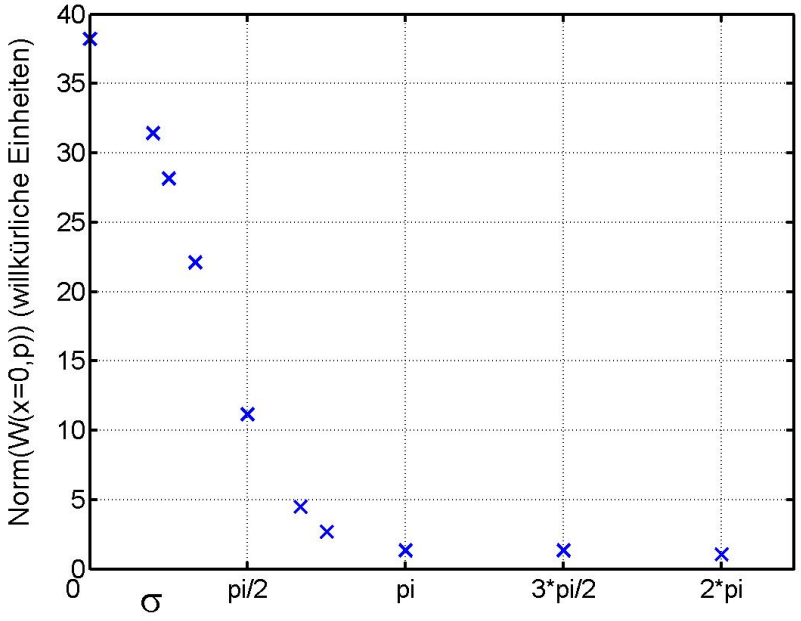


Abbildung 5.3: *Die grafische Darstellung der Werte in der Tabelle: Dekohärenz tritt ab* $\sigma \geq \pi$ *besonders stark auf. Die größte Änderung befindet sich zwischen* $\sigma = \frac{\pi}{4}$ *und* $\sigma = \frac{\pi}{2}$.

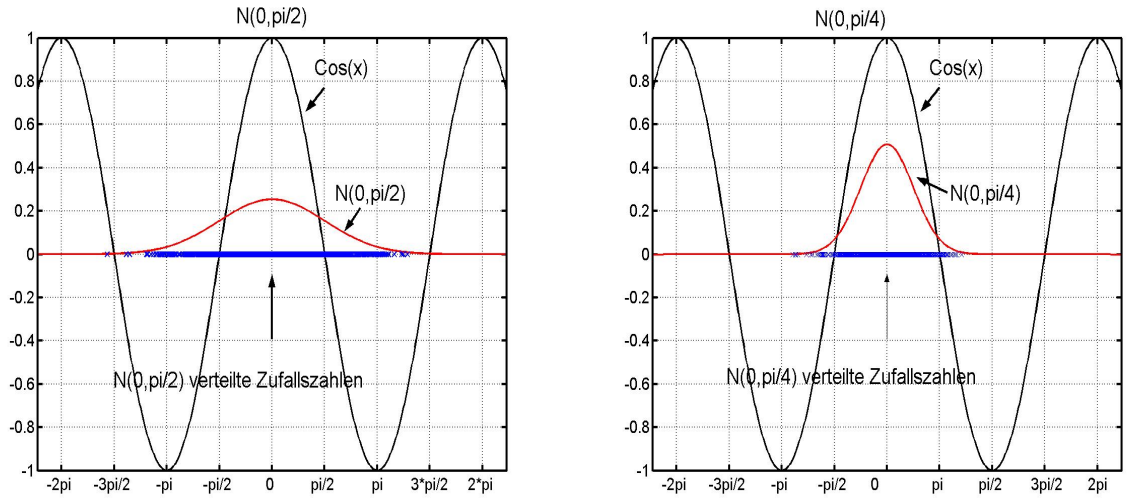


Abbildung 5.4: *In diesen Grafiken soll die Abhängigkeit der Stärke der Interferenz bei $p = 0$ von $\cos(\phi)$ gezeigt werden. Je breiter die blauen Werte für ϕ gestreut sind, desto schwächer ist die Interferenz zwischen den Wellenpaketen.*

5.3 Dekohärenz durch Kopplung zweier Oszillatoren

Ein quantenmechanisches Teilchen befinde sich in einem Überlagerungszustand im Oszillatorpotenzial. Es sei gekoppelt an ein Umgebungssystem. Dieses wird beschrieben durch einem Gauß'schen Wellenpaket, das sich ebenfalls in einem Oszillatorpotenzial bewegt. Die Situation ist vergleichbar mit dem klassischen gekoppelten Pendel, das in Kapitel 1.2 beschrieben wurde. Ein Bad von Oszillatoren wird häufig zur Simulation der Umgebung eines quantenmechanischen Teilchens benutzt. Die Wellenfunktion des betrachteten Teilchens ist Gleichung 3.3, zwei Wellenpakete, die interferieren.
Durch die Kopplung mit der Umgebung verschwindet im zeitlichen Verlauf die Interferenz, das heißt Dekohärenz tritt auf. Die zeitliche Entwicklung wird von der zweidimensionalen Schrödingergleichung beschrieben. ψ_1 hat die Ortskoordinate x und ψ_2 die Koordinate y. Die gesammte Wellenfunktion wird mit $\psi_g = \psi_2^{'} \otimes \psi_1$ dargestellt, wobei $\psi_2^{'}$ die konjugiert komplexe und transponierte Funktion von ψ_2 ist. Die zweidimensionale Schrödingergleichung (Gleichung 5.2) wird durch ein numerisches Verfahren, dass sich Time-Splitting nennt, approximiert.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,y,t) = H\, \psi(x,y,t) \tag{5.2}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x,y)$$

$$V(x,y) = \frac{1}{2} \left(x^2 + y^2 + k_{12} (x-y)^2 \right)$$

Die Anfangswellenfunktionen wurden folgendermaßen gewählt: $\psi_1(0)$, siehe Gleichung 3.3 für das betrachtete Teilchen, mit $x_0 = 4$ und $\psi_2(0)$ für die Umgebung, siehe Gleichung 2.2, mit $k_0 = 0$ und $y_0 = 0$. Bei einer Kopplung von $k_{12} = 0.5$ ergeben sich folgende Grafiken, Abbildung

5.5, für das Teilchen im Phasenraum mit der Wignerfunktion. Da das Gesamtsystem aus lauter harmonischen Oszillatoren besteht, ist die Bewegung des Teilchens mit der klassischen Bewegung des gekoppelten Pendels vergleichbar. Man betrachte dazu Abbildung 5.5 und Abbildung 1.4. Der Unterschied besteht darin, dass das klassische Teilchen im Phasenraum punktförmig dargestellt wird und das quantenmechanische Teilchen, das sich im Überlagerungszustand befindet, durch zwei interferierende Wellenpakete identifiziert wird. Die Bewegung ist in beiden Fällen ellipsenförmig.
Im quantenmechanischen Fall tritt außerdem Dekohärenz auf. Aufgrund der Kopplung des Teilchens mit der Umgebung verschwindet die Interferenz zwischen den beiden Wellenpaketen nach einigen Zeitschritten.

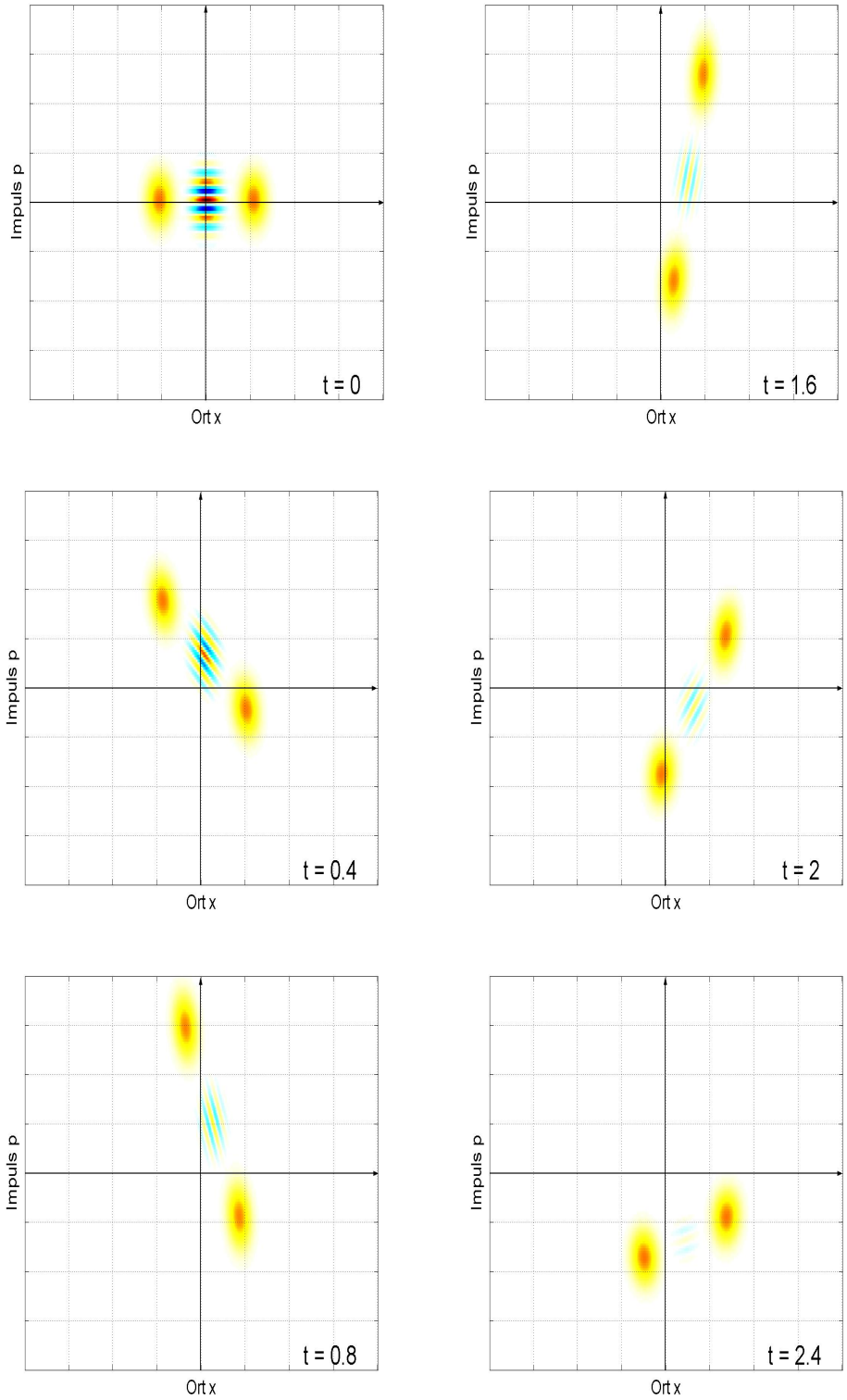


Abbildung 5.5: *Ein Teilchen, das sich im Überlagerungszustand in einem Oszillatorpotenzial befindet, ist an die Umgebung gekoppelt, die durch ein Gauß'sches Wellenpaket ebenfalls in einem Oszillatorpotenzial dargestellt wird. Das Teilchen ist mit Hilfe der Wignerfunktion im Phasenraum dargestellt. Dabei tritt Dekohärenz auf.*

Kapitel 6

Anwendung für den Schulunterricht

6.1 Der Lehrplan und Vorraussetzungen

Die Quantenmechanik im Lehrplan

Im AHS-Lehrplan für Physik der 11. und 12. Schulstufe sind Teile der Quantenmechanik vorgesehen. Es heißt wörtlich: "Der Schüler soll Licht als Überträger von Energie begreifen und über den Mechanismus der Absorption und Emission die Grundzüge der modernen Atomphysik (Spektren, Energieniveaus, Modell der Atomhülle, Heisenberg'sche Unschärferelation, Beugung und Interferenz von Quanten, statistische Deutung) verstehen." Auf die Quantenmechanik verwiesen wird durch folgende Beschreibung: "Der Schüler soll Verständnis für Paradigmenwechsel an Beispielen aus der Quantenphysik oder des Problemkreises Ordnung und Chaos entwickeln und Bezüge zum aktuellen Stand der Wissenschaft/Forschung herstellen können."
Es ist dem Lehrer/der Lehrerin überlassen, wie detailliert er/sie die genannten Bereiche unterrichtet. Da einem Lehrer/einer Lehrerin ein Buch zur Orientierung zur Verfügung steht, möchte ich mich an die Serie „Basiswissen, Physik compact" (siehe Literatur: [1], [2], [3]) halten. Um Teile der bisherigen Diplomarbeit im Unterricht anwenden zu können, sollten folgende Stoffgebiete zuvor mit den Schülern behandelt worden sein.

Vorraussetzungen

Einfache Bewegungen, der Begriff der Geschwindigkeit, der gleichförmigen Bewegung, sowie Zusammenhänge zwischen Ort, Zeit und Geschwindigkeit sollen den Schülern bekannt sein. Gut wäre es auch Ort-Zeit Diagramme und Geschwindigkeit-Zeit Diagramme mit den Schülern zu besprechen. Weiters soll den Schülern der Impuls eines Objektes ein Begriff sein. Der elastische und inelastische Stoß sollen bekannt sein, sowie die potenzielle Energie und der Begriff eines Potenzials. Diese Inhalte kommen im Schulbuch [1] in der 9. und 10. Schulstufe der AHS vor.
Wichtig ist das Stoffgebiet Wellen: Eindimensionale Wellen, Überlagerung von Wellen (konstruktive Interferenz, destruktive Interferenz, Schwebung, Interferenzmuster), das Wellenpaket. Auch dieser Stoff kommt im Schulbuch [1] in der 9. und 10. Schulstufe der AHS vor.

Stundeneinteilung

In der 8. Klasse der AHS (außer Realgymnasium) hat man im Jahr ungefähr 50 Stunden in Physik zur Verfügung. Im Schulbuch [3] sind neben der Einleitung vier große Bereiche angegeben. Eines dieser Kapitel heißt „Welle-Teilchen“. Die Quantenmechanik ist zusammen mit der Teilchenphysik inbegriffen. Selbst wenn man diesen Unterrichtsstoff eingehender durchnehmen möchte, hat man dafür maximal 15 Stunden zur Verfügung. Auf die Quantenmechanik entfallen daher vielleicht 8 bis 9 Unterrichtseinheiten zu ca. 40-45 Minuten reine Unterrichtszeit. Daher muss vorsichtig entschieden werden, was unterrichtet werden soll. Ich habe mich dafür entschieden, die Heisenberg'sche Unschärferelation anhand eines Wellenpakets mit Hilfe der Wignerfunktion darzustellen, was einer Unterrichtseinheit „Einführung in den Phasenraum“ bedarf. Die gequetschten Zustände eines Wellenpakets, auf die man bei der Messung zurück greifen kann, werden gezeigt. Der Tunneleffekt soll im Phasenraum auch Teil des Unterrichts sein. Vier Unterrichtseinheiten werden mit diesen Inhalten gestaltet. Die restlichen fünf Unterrichtseinheiten können verwendet werden für: die Messung, Materiewellen (Atommodell), Relativität und Quantenmechanik, Orbitale und Quantenübergänge.

6.2 Unterrichtsvorbereitung für den Lehrer/die Lehrerin

Die einleitende Unterrichtsstunde sei hier nur skizzenhaft angegeben, weil Teile aus der Diplomarbeit noch nicht angewendet werden können. Im Physikbuch [3] wird das Kapitel „Welle-Teilchen“ mit dem Doppelspaltexperiment begonnen.

Das Doppelspaltexperiment

Das Gedankenexperiment mit Bällen, Wellen und anschließend Elektronen kann aus dem Buch [3] entnommen werden.
Kommentar: Es sei nur dazu erwähnt, dass man am besten mit Hilfe des Overheadprojektors mit der Wellenwanne den Doppelspaltversuch durchführen könnte. Eine andere Möglichkeit wäre es, Java Applets des Doppelspaltexperiments den Schülern mit einem Labtop und Beamer zu zeigen, falls vorhanden. Beispiele dafür sind im Kapitel „Material“ angegeben. Weiters gibt es für den Doppelspaltversuch mit Elektronen ein Video, das empfehlenswert ist, siehe Kapitel Material.
Als Vorraussetzung für die Anwendung der Darstellung mit Hilfe der Wignerfunktion im Unterricht wird die konkrete Unterrichtsvorbereitung von nun an angegeben. Der Stoff ist nicht in dieser Form im Buch [3] enthalten:
Wie könnte ein Elektron jetzt beschrieben werden, wenn es offensichtlich neben Teilcheneigenschaften auch Welleneigenschaften besitzt? Es gibt eine besonders elegante Lösung dafür: Das Elektron wird durch ein Wellenpaket beschrieben, das mit ψ bezeichnet wird. (Hier sollte man die Abbildung des Realteils eines Wellenpakets zeigen, siehe Abbildung 2.1.) Das Wellenpaket hat eine örtliche Begrenzung, was den Teilchencharakter des Elektrons beschreibt. Es ist zusammengesetzt aus vielen verschiedenen Wellen unterschiedlicher Frequenzen, die überlagert

sind. Damit ist der Wellencharakter des Elektrons gegeben.
Max Born fand eine weitere Interpretation des Wellenpakets ψ: $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron am Ort x zu finden. (Hier sollte man die Darstellung $|\psi|^2$ des Wellenpakets zeigen. Auch die Normierungsbedingung kann angeben werden.)

Der Phasenraum in der klassischen Physik

(Wiederholung der vorhergehenden Unterrichtseinheit (10 min): das Doppelspaltexperiment, Wellen-Teilchen-Eigenschaften, das Wellenpaket und $|\psi(x)|^2$.) Um eine weitere Besonderheit der Quantenphysik zeigen zu können, brauchen wir einige Vorraussetzungen anhand von **Beispielen der klassischen Physik** (5 min):

- Wir nehmen an, zu einem bestimmten Zeitpunkt t fahre ein Fiat-Fahrer mit konstanter Geschwindigkeit $v = 100$ km/h auf der Autobahn. Er ist 50 km von der Autobahnauffahrt entfernt. Wie könnte man diese Information in dem folgenden Diagramm darstellen? Wo befindet sich der Autofahrer nach einer Stunde? Wo befindet sich der Fiat-Fahrer nach $1\frac{1}{2}$ h? Der Ort x nach einer vergangenenen Zeit t wird berechnet mit: $x = x_0 + v \cdot t$.

- Weiters nehmen wir an, ein Toyota-Fahrer befinde sich zum Zeitpunkt t auf der Überholspur genau neben dem Fiat-Fahrer mit einer konstanten Geschwindigkeit von 130 km/h. Wie kann man diesen Autofahrer in das Diagramm einzeichnen? Was passiert nach einer Stunde? (Die Lösung befindet sich in Abbildung 6.1.)

Löst zu zweit die Aufgaben des Arbeitsblatts.(15 min) Jedes Beispiel wird anschließend von Schülern präsentiert. (5 min oder mehr.) Ein weiteres optionales Beispiel wäre:

- **Das Federpendel**. Wir nehmen an, dass sich das Pendel im Ruhezustand am Nullpunkt befinde. Wir lenken das Pendel um x_{max} cm aus (Start). Dann wird das Pendel losgelassen und durch die Feder beschleunigt. Die maximale Geschwindigkeit wird im Nullpunkt erreicht. Im Phasenraum ist das der Punkt 1. Ist das Pendel am höchsten Punkt angelangt, bleibt es kurz stehen (Punkt 2 im Phasenraum). Es kehrt um und wird von der Schwerkraft erneut beschleunigt. Wir nehmen an, dass das Pendel harmonisch und ungedämpft schwingt. Insgesamt ergibt die Bewegung im Phasenraum eine Kreisbahn, wie es in Abbildung 1.2 zu sehen ist.

Allgemein: Diese vorbereitenden Aufgaben führen zum Phasenraum. Der Impuls wird gegen den Ort aufgetragen, der Impuls eines klassischen Objektes ist $p = m \cdot v$. Wir setzten die Masse m der Einfachheit halber gleich eins. Ein beliebiges klassisches Objekt kann als Punkt im Phasenraum zu einem bestimmten Zeitpunkt dargestellt werden.(5 min)

Der Phasenraum in der Quantenmechanik

(Wiederholung beider vorhergehender Stunden (10 min))
Ein Elektron ist im Gegensatz zu einem klassischen Teilchen nicht als Punkt im Phasenraum darstellbar. Es ist identifizierbar mit einem Wellenpaket ψ. (Es bietet sich an, an der Tafel den Phasenraum aufzuzeichnen.) $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron am Ort x zu

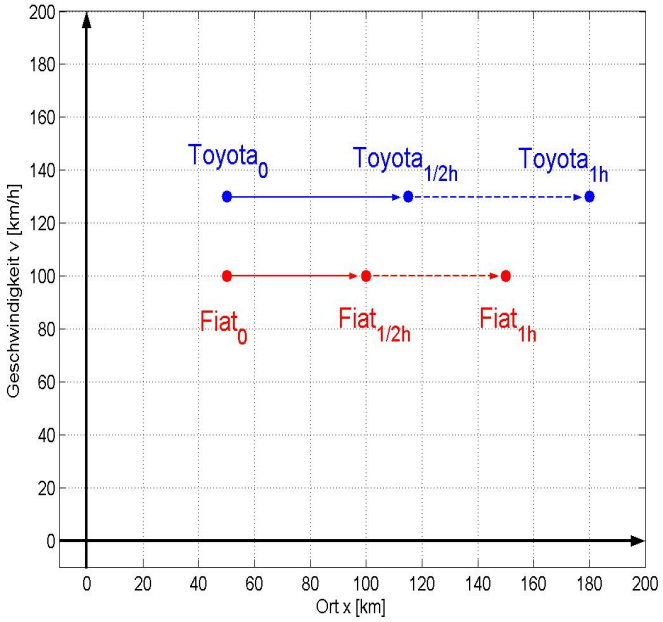


Abbildung 6.1: *Einführung in den Phasenraum: Zwei Autofahrer befinden sich auf der Autobahn. Der Toyota überholt den Fiat. Details stehen im Text.*

finden. Wir haben daher eine Ungenauigkeit von Δx. Auch der Impuls des Elektrons ist nicht genau bestimmbar, die Unschärfe ist Δp. Die Beziehung zwischen Δx und Δp ist durch die **Heisenberg'sche Unschärferelation** gegeben, siehe Basiswissen 4 Seite 40.
Es ist sogar möglich, genau zu berechnen, wie ein Wellenpaket im Phasenraum aussieht und zwar mit Hilfe der Wignerfunktion. Die Heisenberg'sche Unschärferelation ist anhand eines Wellenpakets mit Hilfe der Wignerfunktion, die farbkodiert ist, in Abbildung 6.2 dargestellt.
Wird der Ort des Elektrons eingeschränkt, das heißt wird Δx klein, so könnte das Wellenpaket, das dieses Elektron beschreibt, aussehen wie in Abbildung 3.3, [die Grafik rechts oben]. Das nennt man einen in x gequetschten Zustand. Es gibt den in p gequetschten Zustand natürlich auch, siehe Abbildung 3.3, die Grafik links unten. In diesen Beispielen ist die Wignerfunktion farblich dargestellt. Es gibt auch eine andere Darstellungsform, siehe Abbildung 3.1. Ist noch Zeit, können an dieser Stelle die Heisenberg'sche Unschärferelation bezüglich der Energie und anschließend „die Messung“ besprochen werden.

Der Tunneleffekt

Der Tunneleffekt ist im Buch [3] auf Seite 48 als Erweiterung angegeben. Ich würde ihn aber in den regulären Stoff nach der Messung und dem Kapitel Materiewellen einbeziehen. [Wiederholung der vorhergehenden Stunden, mit Wiederholung des Begriffes Potenzial (10 min).]
Wir haben bereits den Fall betrachtet, was passiert, wenn ein Gummiball an einer Wand reflektiert wird. (Die Schüler nachsehen lassen, wie die Darstellung im Phasenraum ausgesehen hat.) Jetzt haben wir ein quantenmechanisches Teilchen, dass sich auf eine Potenzialbarriere zu

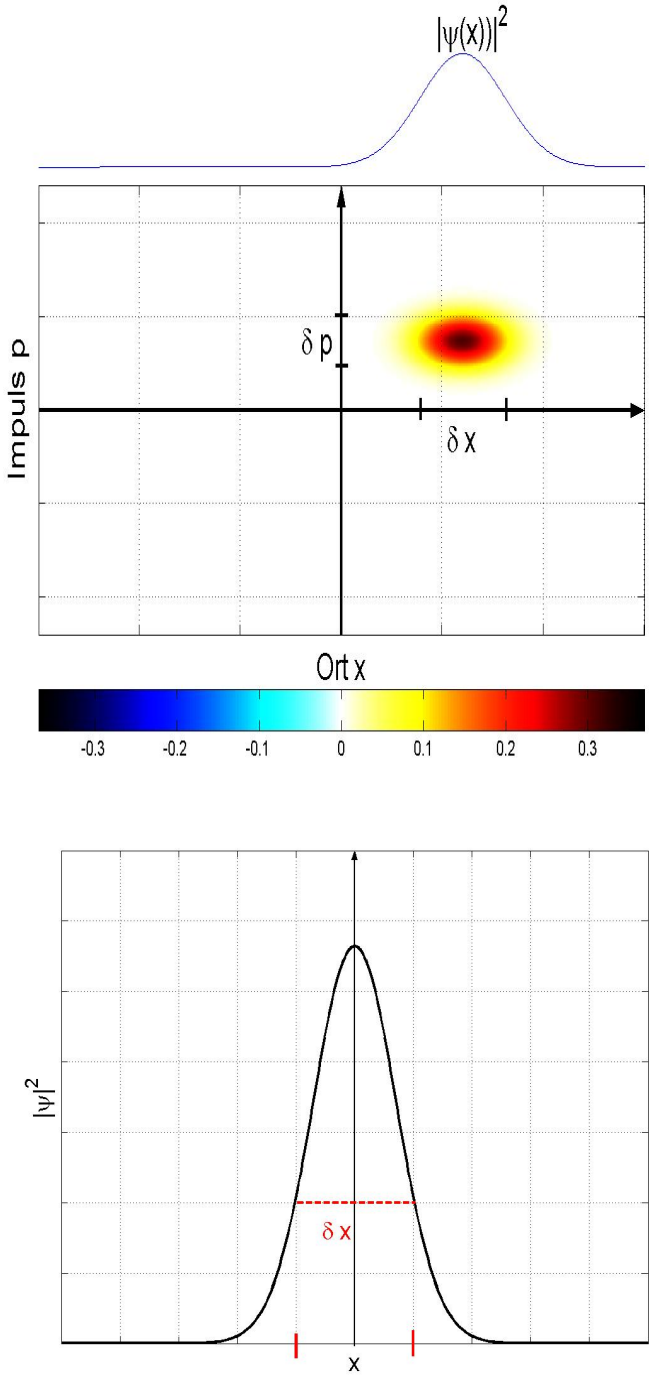


Abbildung 6.2: *Darstellung der Heisenbergschen Unschärferelation mit Hilfe der Wignerfunktion oberen Bild. Im unteren Bild wird* $|\psi(x)|^2$ *dargestellt mit der Breite* $\sigma = \delta x$.

bewegt. Ist diese Potenialstufe sehr hoch, so reicht die Energie des Teilchens nicht aus um die Stufe zu überwinden. Wie beim klassischen Teilchen, wird das quantenmechanische reflektiert. Aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus und der Heisenbergschen Unschärferelation sieht der Vorgang ein bißchen anders aus, siehe Abbildung 4.4. (Die Erklärung der Grafiken kann aus dem Kapitel 4.1.1 übernommen werden.) Im zweiten, dritten und vierten Bild treten blaue und gelbe Linien nebeneinander auf. Das ist die Interferenz, die dadurch entsteht, dass ein Teil des Wellenpakets bereits einen andern Impuls hat. Diese Teile kann man wie unterschiedliche Wellen betrachten, die überlagert werden. Dabei entsteht ein Interferenzmuster, das im Phasenraum so aussieht. Wenn wir das quantenmechanische Teilchen auf eine gleich hohe aber sehr dünne Barriere schicken, passiert Folgendes: siehe Abbildung 4.8. (Die Erklärung kann ebenfalls übernommen werden aus dem Kapitel 4.1.3 „Der Tunneleffekt“.)

Erweiterung: Dispersion

Man könnte diese Erweiterung für eine Diskussion einer weiteren Eigenschaft eines Wellenpakets benutzen. Die Dispersion ist von mir nicht in den regulären Unterrichtsstoff aufgenommen, da es meiner Meinung nach wichtigere Grundlagen der Quantenmechanik für die Schüler zu erfahren gibt. In den universitären Einführungsbüchern über die Quantenmechanik ist sie deswegen enthalten, weil die zeitliche Entwicklung des freien Teilchens analytisch lösbar ist. Diese Rechnung sollte jedoch, meiner Meinung nach nicht in der Schule gemacht werden, weil der mathematische Hintergrund fehlt.
Die ´“klassische Dispersion“ soll mit dem Beispiel **Marathon** im Phasenraum dargestellt werden.
Kurz nach dem Start läuft eine Gruppe von 200 Personen vorne weg. Jeder Läufer hat bereits seine konstante Laufgeschwindigkeit erreicht. Manche laufen schneller, manche lassen sich etwas Zeit. Wie kann diese Situation im Phasenraum dargestellt werden? Und vor allem, was passiert in den nächsten Minuten mit dieser Gruppe? Die Durchschnittsgeschwindigkeit beträgt 250 m/min. (Die Straße ist breit genug, dass sich die Läufer nicht gegenseitig behindern bzw. beliebig viele nebeneinander laufen können.)
Die Grafiken werden gleich erzeugt wie die der klassischen Dispersion in Abbildung 1.6. Daher sind die Grafiken hier nicht angegeben. Man wählt 200 *Punkte, die in* x $N\,(50, 15)$*-verteilt und in* v $N\,(250, 15)$*-verteilt sind.* x *wird von* 0 *bis* 700 *dargestellt und* p *von* -10 *bis* 500.
Ich denke, es ist sinnvoll zuerst zu besprechen, was nach einigen Minuten mit der Läufergruppe passiert und anschließend die Grafiken zu zeigen. Die Gruppe von Läufern wird auseinander „fließen“. Die Läufer mit einer größeren Geschwindigkeit legen in der gleichen Zeit einen größeren Weg zurück und sind daher vorne.
In der Quantenmechanik passiert etwas ähnliches. Man betrachtet ein freies quantenmechanisches Teilchen, das durch ein Wellenpaket dargestellt wird. Die zeitliche Entwicklung des Wellenpakets, die mit der Schrödingergleichung berechnet wird, kann durch die Wignerfunktion dargestellt werden, siehe Abbildung 4.1. Da das Wellenpaket aus vielen verschiedenen Wellen unterschiedlicher Frequenzen besteht, die sich unterschiedlich schnell ausbreiten, wird das Wellenpaket auseinander gezogen.

6.2.1 Material

Java Applets zum Doppelspaltexperiment mit Wellen

- `http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/index.php?topic=20`
  (NTNUJAVA Virtual Physics Laboratory Java Simulaions): Zwei kugelförmige Wellen breiten sich aus. Ich finde dieses Applet sehr empfehlenswert, weil es über den gesamten Bildschirm laufen kann. Die Wellenlänge und der Abstand der Spalten sind beliebig veränderbar.

- `http://www.ngsir.netfirms.com/englishhtm/Interference2.htm`
  (von Lear Physics using Java): Eine ähnliche Darstellung wie oben, Minima und Maxima sind besser zu erkennen, dafür ist das Applet sehr klein. Die Wellenlänge und der Abstand der Spalten sind vorgegeben veränderbar.

- `http://www.schulphysik.de/java/physlet/applets/optik2.html`
  (RipplePhysletApplet by Wolfgang Christian,Giancoli, Javascript modifiziert von Schulphysik, 11, Feb. 2002): Die Darstellung ist wie beim vorherigen Applet auch eher klein. Man kann aber zwischen der Amplitudendarstellung und Intensitätsdarstellung wechseln und die Erreger getrennt betrachten. Die Wellenlänge ist beliebig und drei mögliche Abstände der Spalten sind auswählbar.

- `http://www.hmi.de/bereiche/info/dualismus/exp.java.html`
  (Hahn-Meitner-Institut Lehr- und Informationsmaterial): Die Kugelwellen werden nicht dargestellt, sondern nur einzelne Wellen die an einem Punkt überlagert werden und eine Intensitätsverteilung ergeben. Der Abstand zum Schirm, der Abstand der Spalte, die Frequenz und eine Phasenbeziehung sind beliebig veränderbar.

- `http://perg.phys.ksu.edu/vqmorig/programs/java/makewave/olddouble/Slit.html`

Film zum Doppelspaltexperiment mit Elektronen:
`http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/movie.cfm`:
Ich finde den Film sehr empfehlenswert, weil er den Schülern ein tatsächlich stattgefundenes Experiment vor Augen führt.

Arbeitsblatt: Einführung in den Phasenraum

1. *Drei Autofahrer*: Von einer Autobahn Raststation aus befindet sich ein Lastwagen 40 km entfernt mit konstanten 80 km/h auf der Autobahn. Ein VW-Käfer, der bereits 80 km nach der Raststation zurück gelegt hat, befindet sich mit 100 km/h auf der Autobahn. Ein Mercedes, der mit 130 km/h unterwegs ist, ist schon 100 km von dieser Raststation entfernt. (Alle fahren in die gleiche Richtung.)

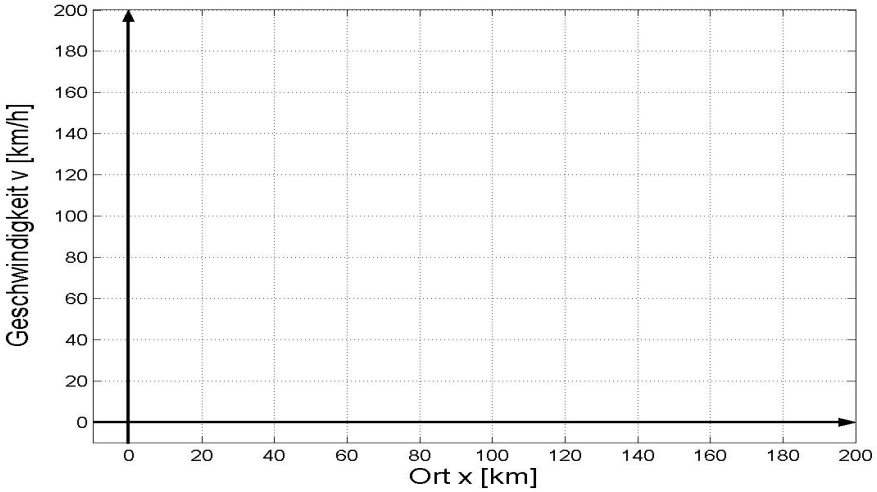
   - Stellt die gegebenen Informationen im v-x-Diagramm dar!
   - Wo befinden sich die drei Fahrzeuge nach einer halben Stunde, wenn alle drei konstant weiter fahren?
   - Wie sind die drei Fahrzeuge in dem Diagramm eine halbe Stunde vor dem Ausgangszeitpunkt einzutragen?

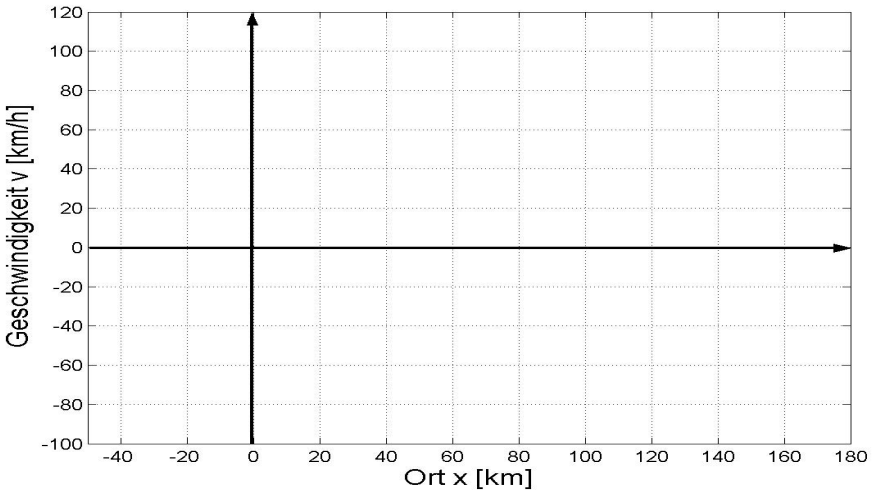
2. *Gegenfahrbahn:* Herr Maier befindet sich 50 km von Graz entfernt auf der Autobahn in Richtung Wien mit 100 km/h. Zum gleichen Zeitpunkt ist Rosi paralell zu ihm auf der Gegenfahrbahn mit 90 km/h unterwegs in Richtung Graz.

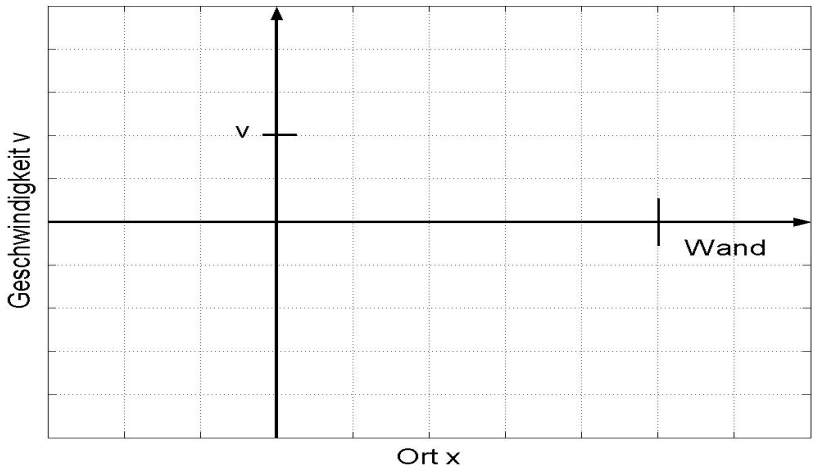
   - Wie kann man Herrn Maier und Rosi in das Diagramm eintragen?
   - Was passiert nach einer halben Stunde?
   - Was passiert nach einer Stunde?

3. *Gedankenexperiment, Gummiball:* Ein Gummiball wird mit voller Wucht gegen die Wand geworfen. Der Ball verläßt die Hand mit der Geschwindigkeit v.

   - Besprecht (leise), was danach passiert?
   - Wie ist dieser Vorgang im Phasenraum darstellbar? (Die Ausdehnung und Verformung des Balles darf vernachlässigt werden.)


Geschwindigkeit v [km/h]
200
180
160
140
120
100
80
60
40
20
0
0 20 40 60 80 100 120 140 160 180 200
Ort x [km]


Geschwindigkeit v [km/h]
120
100
80
60
40
20
0
-20
-40
-60
-80
-100
-40 -20 0 20 40 60 80 100 120 140 160 180
Ort x [km]


Geschwindigkeit v
v
Wand
Ort x

Anhang A

Numerische Methoden

A.1 Das Crank-Nicolson Verfahren

Die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion ψ wird mit der Schrödingergleichung berechnet. Da es sich dabei um eine partielle Differentialgleichung 2. Art handelt ist in vielen Fällen nur eine numerische Lösung möglich. Das Crank-Nicolson Verfahren wurde dafür von mir verwendet. Das Anfangswertproblem lautet:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right)=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\left(x,t\right)+V\left(x\right)\psi\left(x,t\right)$$

mit der Anfangsbedingung:

$$\psi\left(x,t_0\right)=\psi_0\left(x\right)$$

Dargestellt wird die Wellenfunktion auf einem Intervall $[x_1, x_n]$ für zum Beispiel $x_1 = -8$ und $x_n = 8$. Bei einer bestimmten Anzahl von Gitterpunkten $(n-2)$ zwischen x_0 und x_n ergibt sich eine Schrittweite von $h = \frac{x_n - x_1}{n-1}$.
Auch die Zeit wird diskretisiert mit einer Schrittlänge von Δt. Die Anzahl m der Zeitschritte ist beliebig wählbar. Es wird folgende Indizierung eingeführt:

$$\psi\left(x_k,t_j\right)=\psi_k^j\,,\qquad V\left(x_k\right)=V_k,\qquad k=1,\ldots n;\ j=1,\ldots m$$

Weiters werden die Ableitungen durch Finite Differenzen approximiert:

$$\left.\frac{\partial}{\partial t}\psi\right|_{(x_k,t_j)}\approx\frac{\psi_k^{j+1}-\psi_k^j}{\Delta t},$$

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\right|_{(x_k,t_j)}\approx\frac{\psi_{k+1}^j-2\psi_k^j+\psi_{k-1}^j}{h^2}$$

In der Schrödingergleichung werden die Ableitungen durch die oben angegebenen Finiten Differenzen ersetzt:

$$\frac{i}{\Delta t}\left(\psi_k^{j+1}-\psi_k^j\right)=-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2h^2}\left(\psi_{k+1}^{j+1}-2\psi_k^{j+1}+\psi_{k-1}^{j+1}\right)+\frac{1}{2h^2}\left(\psi_{k+1}^j-2\psi_k^j+\psi_{k-1}^j\right)\right]+$$

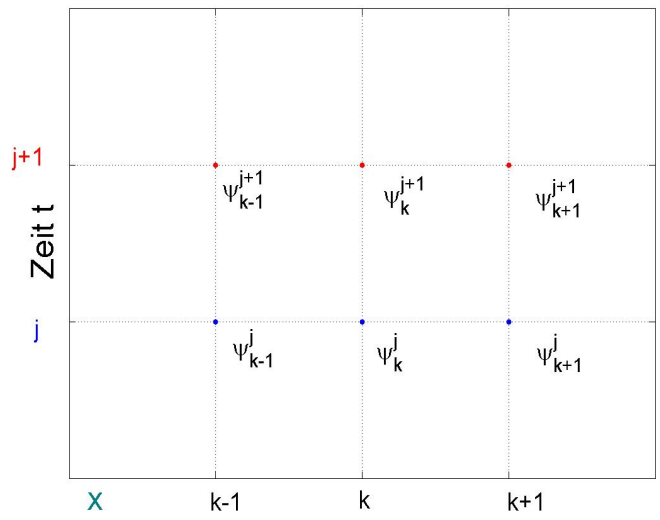


Abbildung A.1: *Ein Ausschnitt des Gitters das erzeugt wird um numerisch vorgehen zu können. Die Punkte, die für die finiten Differenzen und das Crank-Nicolson Verfahren verwendet werden sind eingezeichnet.*

$$+\frac{1}{2}V_k\left(\psi_k^{j+1}+\psi_k^j\right)$$

In Abbildung A.1 wird ein Ausschnitt des erstellten Gitters gezeigt. Die Punkte, die für die finiten Differenzen und das Crank-Nicolson Verfahren verwendet werden, sind eingezeichnet.

Danach werden die Ausdrücke mit ψ^j auf eine Seite der Gleichung und jene mit ψ^{j+1} auf die andere Seite der Gleichung gebracht. Es ergibt sich:

$$\psi_k^{j+1}+\frac{1}{2}\cdot i\Delta t\cdot\left[-\frac{1}{2h^2}\left(\psi_{k+1}^{j+1}-2\psi_k^{j+1}+\psi_{k-1}^{j+1}\right)+V_k\psi_k^{j+1}\right]=$$

$$=\psi_k^j-\frac{1}{2}\cdot i\Delta t\cdot\left[-\frac{1}{2h^2}\left(\psi_{k+1}^{j}-2\psi_k^{j}+\psi_{k-1}^{j}\right)+V_k\psi_k^{j}\right]$$

Das gilt für $j=1\ldots,m$ und für $k=2\ldots,n-1$. Die Randbedingungen sollen periodisch angenommen werden:

$$\psi_1^j=\psi_n^j \qquad j=1,\ldots,m$$

Die in der eckigen Klammer angegebenen Ausdrücke können in Matrixform geschrieben wer-

den. (Die periodischen Randbedingungen sind bereits eingefügt.)

$$\frac{1}{2h^2}\cdot\begin{pmatrix} 2+2h^2V_1 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & -1 \\ -1 & 2+2h^2V_2 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2+2h^2V_3 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & -1 & 2+2h^2V_4 & -1 & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2+2h^2V_n \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} \psi_1^{j/j+1} \\ \psi_2^{j/j+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_n^{j/j+1} \end{pmatrix}$$

Mit dieser Matrix, die Ham genannt werden soll, kann ψ^{j+1} berechnet werden mit ψ^j. I ist die Einheitsmatrix und ψ^{j+1} genauso wie ψ^j ein Spaltenvektor der Länge n, wie oben angegeben.

$$\psi^0 = \begin{pmatrix} \psi(1,0) \\ \psi(2,0) \\ \vdots \\ \psi(n,0) \end{pmatrix}$$

$$\psi^{j+1} = (I + 0.5\cdot i\Delta t\cdot Ham)^{-1}(I - 0.5\cdot i\Delta t\cdot Ham)\cdot\psi^j \qquad j = 1,\ldots,m$$

Damit ist die Beschreibung des Crank-Nicolson Verfahrens, mit dem die Schrödingergleichung approximiert wird, abgeschlossen.[1] Es folgt eine kurze Zusammenfassung, wie die Wignerfunktion einer Wellenfunktion ψ berechnet wird.

A.2 Berechnen der Wignerfunktion

Die Wignerfunktion einer Wellenfunktion ψ wird mit Hilfe der Dichtematrix (siehe Gleichung 2.4) berechnet. Im diskreten Fall handelt es sich dabei tatsächlich um eine Matrix. Es wird die Schwerpunktskoordinate R und die Relativkoordinate r festgelegt:

$$R = \frac{x' + x}{2} \qquad r = x - x'$$

Dadurch ergibt sich eine Matrix σ:

$$\sigma(R,r) = \rho\left(R + \frac{r}{2}, R - \frac{r}{2}\right)$$

Dabei werden noch freie Plätze der neuen Matrix mit 0 aufgefüllt. Weiters folgt die Fouriertranformation von σ bezüglich der Realtivkoordinate r und man erhält die Wignerfunktion von ψ:

$$W(R,p) = \int \sigma(R,r)\, e^{-ipr/\hbar} dr$$

Die Informationen zu diesem Kapitel sind entnommen aus [4] Kapitel 3 Seite 3.

[1] Das Verfahren wurde großteils übernommen aus [8] Appendix A Seite 257-259.

Literaturverzeichnis

[1] Albert, Jaros; Nussbaumer, Alfred; Nussbaumer, Peter; Kunze, Hansjörg. *Basiswissen 1 plus 2, Physik-compact*. öbvhpt VerlagsgmbH und Co.KG, Wien, 1 edition, 2001.

[2] Albert, Jaros; Nussbaumer, Alfred; Nussbaumer, Peter; Kunze, Hansjörg. *Basiswissen 3, Physik-compact*. öbvhpt, VerlagsgmbH und Co.KG, Wien, 1 edition, 2002.

[3] Albert, Jaros; Nussbaumer, Alfred; Nussbaumer, Peter; Kunze, Hansjörg. *Basiswissen 4, Physik-compact*. öbvhpt, VerlagsgmbH und Co.KG, Wien, 1 edition, 2002.

[4] Ali Mohammad Nassimi. Quantum Mechanics in Phase Space. Technical report, Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, ON, M5S 3H6, Canada, June 1, 2007.

[5] D. Giulini; E. Joos; C. Kiefer; J. Kupsch; I.-O. Stamatescu; H.,D.,Zeh. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1996.

[6] Fließbach, Torsten. *Quantenmechanik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 3 edition, 2000.

[7] Fließbach, Torsten. *Mechanik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 4 edition, 2003.

[8] Thaller, Bernd. *Visual Quantum Mechanics*. Springer-Verlag New York, Berlin, Heidelberg, 2000. Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena.