

Der eindimensionale Potenzialtopf und der Tunneleffekt in der Schule

Horst Hübel

Vortrag auf der Seminarlehrertagung Physik Dillingen 2008

I Lehrplanübersicht zum bayerischen Lehrplan für die 12. Jahrgangsstufe

Der bayerische Lehrplan ist erfreulicherweise im Zusammenhang mit der Schrödinger-Gleichung sehr zurückhaltend und verlangt kein allzu intensives Eindringen in das Thema.

Zitate:

Analog zu den Newton'schen Gesetzen, die als Axiome der klassischen Mechanik betrachtet werden können, liefert die Schrödinger-Gleichung, die nur in ihrer zeitunabhängigen, eindimensionalen Form betrachtet wird, den Schlüssel zur Lösung quantenmechanischer Probleme.

Bei der graphischen Darstellung von Lösungen der Schrödinger-Gleichung für weitere einfache quantenmechanische Systeme können die Schüler Computerprogramme verwenden.

Elektron im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden, stehende Wellen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, diskrete Energiewerte

(1) Hinweis auf die zeitunabhängige, eindimensionale Schrödinger-Gleichung als **quantenphysikalische Grundgleichung**

(2) *Interpretation* der graphischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung für den **endlich hohen** Potentialtopf, Hinweis auf den Tunneleffekt

(1) ist m.E. nicht so zu interpretieren, dass die SG direkt alle Lösungen liefern würde. Man kann allerdings alle Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung aus Lösungen der zeitunabhängigen SG aufbauen („Vollständigkeit“ der zSG). Diese sind dann i.A. komplexwertig und zeigen wegen ihrer Zeitabhängigkeit u.U. völlig andere Eigenschaften als die Lösungen der zeitunabhängigen SG (zuSG).

II Zur Physik der SG:

II.1 Was ist das – eingeschränkte – Ziel einer Untersuchung durch die „zeitunabhängigen SG“?

Dessen sollte sich der Lehrer m.E. bewusst sein, damit er seine Schüler nicht zum Wundern über Fakten bringt, die er selbst bei der Fragestellung hineingesteckt hat.

Also, wir wollen davon ausgehen, dass das Lösungssystem der zeitabhängigen SG vollständig ist, d.h. dass sie für alle quantenmechanischen Fragestellungen des zuständigen Problemkreises Lösungen liefert. Sie lautet dann für die Wellenfunktion $\psi(x,t)$:

$$i \hbar \psi^\bullet = H \psi(x,t),$$

wobei H der Energieoperator (Hamiltonoperator) ist. Diese Gleichung ist mit der Anfangsbedingung und den Randbedingungen zu lösen.

Zur zeitunabhängigen SG (zuSG) kommt man nun durch folgende – in gewisser Weise **willkürliche - Entscheidung**:

Wir wollen aus der Vielzahl der möglichen Lösungen nur diejenigen studieren,

- die zu **Teilchenzuständen** gehören, also zu Zuständen mit einer bestimmten Teilchenzahl, sagen wir mit der Teilchenzahl 1 (Einteilchen-Zustände); das ließe sich leicht für andere bestimmte Teilchenzahlen erweitern; Zustände mit unbestimmter Teilchenzahl im evtl. Zuständigkeitsbereich der SG spielen experimentell erst seit wenigen Jahrzehnten eine Rolle.
- bei denen eine wiederholte Energiemessungen (am jeweils gleich präparierten System) immer den **gleichen Energiewert E** liefern.

In der Sprache der Quantenmechanik heißt das also, dass ausschließlich **stationäre Zustände** ψ gesucht werden, die zu einem Eigenwert E des Energieoperators für bestimmte Teilchenzahlen führen. Diese **Gesamtenergie E ist dann Eigenschaft des Systems** in solchen Zuständen.

Diese Messvorgänge werden in der Quantenmechanik so ausgedrückt:

$$H \psi = E \psi$$

wobei eben E einer der vielen Eigenwerte von H ist. Also, wenn eine (ideale) Energiemessung durchgeführt wird ($H \psi$), dann wird der Zustand ψ nicht verändert und es ergibt sich ein eindeutiger Messwert E (rechte Seite: $E \psi$). Nur solche Zustände ψ werden gesucht! E ist die **Gesamtenergie**, die in solchen Zuständen **bestimmt** ist.

Es gibt andere Zustände ψ ($\psi = \sum c_i \psi_i$), für die die Energiemessung eine Linearkombination von Energieeigenzuständen mit unterschiedlichen Energien liefert. Solche Zustände sollen ausgeschlossen sein:

$$H \psi = \sum E_i c_i \psi_i$$

Das gilt dann, wenn $\psi = \sum c_i \psi_i$, wenn also ψ eine Linearkombination von Energieeigenzuständen ist. In solchen Zuständen ist die **Gesamtenergie E nicht Eigenschaft des Systems** (die Gesamtenergie ist unbestimmt): Jede Messung an gleich präparierten Systemen liefert i.A. einen anderen der unterschiedlichen Werte E_i .

II.2 Das Ziel (zuSG) bestimmt die Eigenschaften der Lösung

Die **Beschränkung auf stationäre Zustände** hat sofort eine wichtige physikalische Konsequenz:

Kinetische Energie und potenzielle Energie sind in solchen stationären Zuständen unbestimmt.

Weil E und E_{kin} etc. nicht gleichzeitig messbar sind, gibt es eine Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation für E und E_{kin} bzw. E und E_{pot} bzw. E_{kin} und E_{pot} . E und eine der anderen Energien können nicht gleichzeitig Eigenschaften des Systems sein!

Wenn Sie von der Gesamtenergie E sprechen – die in den gesuchten Zuständen bestimmt ist – hat es keinen Sinn von kinetischer Energie oder potentieller Energie zu sprechen!

Natürlich kann auch in solchen Systemen die kinetische Energie oder die potenzielle Energie gemessen werden. Wurde das System vor einer solchen Messung immer wieder in denselben stationären Zustand mit der Gesamtenergie E präpariert, dann werden wiederholte Messungen streuende Werte für E_{kin} und E_{pot} liefern: Indiz dafür, dass diese Energien vor der Messung **nicht Eigenschaften des Systems** waren (Prof. Wiesner würde das wohl so ausdrücken: E_{kin} und E_{pot} sind

nur dynamische Eigenschaften des Systems).

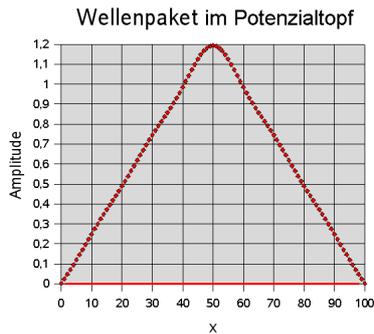


Abb. 1 Auch das ist eine Wellenfunktion für einen Zustand im eindimensionalen Potenzialkasten. Es handelt sich aber nicht um einen stationären Zustand. Im nächsten Augenblick wird die Wellenfunktion auch komplexwertig werden. Messungen der Gesamtenergie E würden streuende Messwerte liefern.

Andererseits: Jede solche Energie ist nach ihrer Messung sicher Eigenschaft des Systems, aber dann ist das System i.A. nicht mehr in einem stationären Zustand und die Gesamtenergie E hat keinen physikalischen Sinn mehr.

Diese Kenntnis scheint mir wesentlich für ein Verständnis dessen zu sein, was man tut, wenn man die zeitunabhängige SG löst:

Es geht ausschließlich um stationäre Lösungen; alle aus der klassischen Physik übernommenen Vorstellungen wie von der Bewegung des Teilchens (im Zusammenhang mit E_{kin}) oder seinem Aufenthalt an einem bestimmten Ort (im Zusammenhang mit E_{pot}) sind in solchen Zuständen reine Fantasie und nicht Gegenstand der Physik.

Andererseits: Es geht bei solchen Zuständen um die Konkurrenz zweier „klassisch denkbarer Möglichkeiten, zwischen denen nicht unterschieden wird“:

- Bewegung eines (klassischen) Teilchens nach rechts und
- Bewegung eines (klassischen) Teilchens nach links.

Die Folge muss Interferenz sein, die sich in variierenden Wahrscheinlichkeiten äußern muss (Interferenz ist, wie es Küblbeck und Müller formulierten, die Folge einer Konkurrenz nicht unterschiedener klassisch denkbarer Möglichkeiten). Hier geht es also wieder einmal nicht um die Interferenz von „etwas“, sondern um die „Interferenz von Möglichkeiten“. Wie die erfolgt, lehrt u.a. die Mathematik der SG.

II.3 Jetzt zur Mathematik der zeitunabhängigen SG (zuSG):

Wegen der Messvorschrift $H \psi = E \psi$ lautet die SG also für solche stationären Zustände $i \hbar \dot{\psi} = E \psi$ und sie wird erfüllt vom Lösungsansatz $\psi = \psi_0(x) e^{iEt/\hbar}$, durch den die Zeitabhängigkeit absepariert wird. Dann gilt also auch

$$H \psi_0(x) = E \psi_0(x)$$

Das ist die zeitunabhängige SG (zuSG) für den Ortsanteil $\psi_0(x)$ der Wellenfunktion, und nur sie soll im Unterricht behandelt werden. Als Lehrer müssen wir mit dazu denken, ohne es zu sagen, dass sie eben nur für die ausgewählten stationären Zustände gilt. Nur diese $\psi_0(x)$ können (müssen es aber nicht) reell sein; Die Wellenfunktion $\psi(x,t) = \psi_0(x) e^{iEt/\hbar}$ selbst wird, außer evtl. für bestimmte Zeitpunkte immer komplexwertig sein. Indiz dafür, dass es sich nicht um eine messbare ('reale') Größe handelt, sondern um eine Rechengröße, deren ausschließliche Aufgabe darin besteht:

- experimentell überprüfbare Wahrscheinlichkeitsaussagen über den zukünftigen Ausgang von Messungen zu machen.

Wie Zeilinger sagte: „Diese Wellen existieren nur in den Köpfen der Physiker.“ Ich möchte hinzufügen: „und es ist physikalisch sinnlos von einer Ausbreitung solcher Wellen im uns umgebenden Raum, dem so genannten Anschauungsraum, zu sprechen.“

II.4 Wellen im Konfigurationsraum

Die Lösungen der zeitabhängigen SG (zSG) sind Wellen (nicht aber die der zeitunabhängigen zuSG), eben die Wellenfunktionen, aber das sind keine Wellen im Anschauungsraum, sondern in

einem abstrakten **Konfigurationsraum**. Im Falle **eines** Teilchens könnte das ein dreidimensionaler Impulsraum sein, oder auch ein dreidimensionaler Ortsraum. Die Ortskoordinate x ist dabei keine Koordinate des Teilchens (weder eines lokalisierten noch eines angeblich „verschmierten“ Teilchens), sondern ausschließlich die Koordinate des Orts, an dem eine Messung an dem Teilchen vorgenommen werden soll, für den $\psi(x)$ dann eine Wahrscheinlichkeitsaussage für den Ausgang der Messung liefern soll. Oder, bei Wellen im Impulsraum: Die Impulskoordinate p ist dabei nicht eine Impuls-Koordinate des Teilchens, sondern ausschließlich die Impulskoordinate, die an dem Teilchen gemessen werden soll, für die $\psi(p)$ dann eine Wahrscheinlichkeitsaussage für den Ausgang der Messung liefern soll.

Im Falle von zwei Teilchen beschreibt ψ eine Welle in einem 6-dimensionalen Raum (der Konfigurationsraum für diese Welle ist dann ebenso wie die SG 6-dimensional), also $\psi(x_1, x_2)$ mit den Koordinaten von x_1 und x_2 für die Orte, an denen Messungen an den Teilchen 1 und 2 vorgenommen werden sollen.

So wäre - zumindest hypothetisch - auch für den Schüler erkennbar: Das ist sicher kein anschaulicher Raum, in dem sich diese Wellen ausbreiten sollen.

II.5 Bei stationären Zuständen gibt es keine Bewegung im Anschauungsraum

Löst man also die zeitunabhängige SG für den Fall eines eindimensionalen unendlich hohen Potenzialkastens, darf man **nicht spekulieren**, dass hier irgendetwas hin und her laufen könnte: weder ein Teilchen, noch eine Welle. Eine Bewegung kann hier nicht Gegenstand der Physik sein; weder potenzielle noch kinetische Energie haben einen Sinn für solche Zustände. Und diese Wellen gibt es, wie gesagt, „nur in den Köpfen der Physiker“.

Eine ganz andere Frage ist, wie sich die *Mathematik der Lösung* (nicht ihre Physik) evtl. veranschaulichen lässt. In diesem Zusammenhang sprechen dann manche - sogar mit einem gewissen Recht - von „stehenden Wellen“.

III Was davon könnte im Unterricht gebracht werden?

Generell bitte: möglichst wenig!

III.1 Bitte versuchen Sie nicht, die SG im Unterricht herzuleiten!

Ein Vorschlag, die zuSG in der Schule herzuleiten, geht von ebenen (deBroglie-)Wellen aus. $\psi(x, t) = A \cdot e^{i(px - Et)/\hbar}$, also Eigenzuständen des Impulsoperators (in der Schule würde dann statt der Exponentialfunktion ein Sinus angesetzt werden).

Wendet man $p^2/2m$ darauf an, reproduziert sich $\psi(x)$:

$$\psi'(x) = ip/\hbar \psi(x) \quad \text{und} \quad \psi''(x) = -p^2/\hbar^2 \psi(x) \quad \text{und mit}$$

$$E \psi(x) = p^2/2m \psi(x)$$

Die Ortsableitung ist bis auf Faktoren identifiziert als Impulsoperator und die **zweite Ortsableitung** (angewandt auf ψ : $\psi''(x)$) bis auf einen Faktor als **Operator der kinetischen Energie**. Deswegen gilt also auch

$$E \psi(x) = p^2/2m \psi(x) = -\hbar^2/2m \psi''(x) \quad \text{oder} \quad \psi''(x) = -2m/\hbar^2 E \psi(x)$$

Im Falle eines freien Teilchens wäre das die kinetische Energie, aber auch die Gesamtenergie. Dann wird – **fälschlicherweise** – gesagt: Wenn man ein Teilchen in einem Potenzial hat, unterscheidet sich die kinetische Energie von der Gesamtenergie E um die potenzielle Energie $V(x)$, also

$$\psi''(x) = -K [E - V(x)] \psi(x) \quad K = 2m/\hbar^2$$

Das ist in der Tat die Form der zuSG.

Für konstantes $V(x)$ mit $E > V$ ist das von der Struktur der Schwingungsgleichung („Schwingung“ im Ort). Man kann in Spezialfällen erwarten, dass die Gleichung ähnlich gelöst wird wie diese, und sollte Sinusse und Cosinusse liefern. Für konstantes $V(x)$ mit $E < V$ kann man entsprechend exponentielles Verhalten erwarten. (Wellen kann sie wegen der fehlenden Zeitabhängigkeit nicht liefern.)

III.2 Diese „Herleitung“ ist nicht sinnvoll, weil sie der Physik widerspricht

Obwohl formal die „Herleitung“ zum richtigen Ergebnis führt, verzerrt sie doch m.E. die physikalische Wirklichkeit: Für die gesuchten stationären Zustände gibt es eine Gesamtenergie E , aber weder potenzielle noch kinetische Energie. Das $V(x)$ in der zuSG ist keineswegs die potenzielle Energie, sondern nur eine **formale Potenzialfunktion**, die die gleiche mathematische Gestalt hat wie die potenzielle Energie beim entsprechenden klassischen Problem für ein klassisches Teilchen am Ort x (in der QM spricht man vom multiplikativen Operator der potenziellen Energie).

Würden Sie es schaffen, den Schülern klarzumachen,

- dass $V(x)$ zwar aussieht wie die klassische potenzielle Energie, aber keinesfalls eine solche ist, weil die Teilchen im Potenzialkasten in einem stationären Zustand zwar eine Gesamtenergie E haben, aber auf keinen Fall eine potenzielle Energie?
- dass es zwar in solchen Zuständen keine kinetische Energie gibt, dass Sie aber dennoch eine solche mittels des scheinbar gültigen Energieerhaltungssatzes $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ ($E_{\text{kin}} = E - E_{\text{pot}}$) in Rechnung gesetzt haben? Oder würden die Schüler nicht doch weiterhin annehmen, dass potenzielle und kinetische Energie hier doch irgendwie eine Rolle spielen und dann damit – falsch – argumentieren?

Wenn schon, dann plädiere ich dafür, die zuSG kommentarlos anzuschreiben und mitzuteilen,

- dass $V(x)$ die Potenzial**funktion** ist, die die gleiche Form hat wie die potenzielle Energie eines **klassischen Teilchens** am Ort x ,
- dass jedoch für dieses Problem E_{kin} und E_{pot} sinnlose Begriffe sind.

III.3 Wie sieht eine korrekte physikalische Lösung aus?

Die zuSG muss mit den Randbedingungen gelöst werden. Die zuSG hat beliebig viele Lösungen. Die meisten davon sind unphysikalische Lösungen, nur abzählbar unendlich viele Lösungen sind physikalische Lösungen. An physikalische Lösungen müssen folgende Forderungen gestellt werden:

1. $\psi(x,t)$ muss **quadratintegrabel** sein, d.h. $|\psi(x,t)|^2$ muss über den betrachteten Raumbereich (den Potenzialkasten) integriert werden können und endliches Ergebnis liefern. $\psi(x,t)$ muss also normiert werden können. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Potenzialkasten zu finden, muss schließlich 1 sein. Obwohl es wichtige Fälle gibt, wo $\psi(x,t)$ sogar schwach divergiert (und dennoch quadratintegrabel ist) hätte ich nichts dagegen, wenn diese Forderung für die Schule vereinfacht würde zur Forderung, dass $\psi(x,t)$ **überall endlich** sein sollte.

Für Probleme mit endlicher Potenzialfunktion müssen weitere Forderungen (Randbedingungen) gestellt werden:

2. $\psi(x,t)$ muss überall stetig und diff'bar sein.
3. $\psi'(x,t)$ muss überall stetig und endlich sein.

Diese Zusatzforderungen ergeben sich aus der Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstroms. Sie werden beim Potenzialkasten mit unendlichen Wänden ersetzt durch

2. $\psi(x) = 0$ an den Wänden, d.h., kein Teilchen kann an den Rändern des Potenzialkastens gefunden werden.

$\psi''(x)$ ist dann durch die zuSG und den Potenzialverlauf bestimmt und könnte unstetig sein.

Physikalische Lösungen sind also solche Lösungen der zuSG,

- die überall endlich (quadratintegabel) sind und
- die Randbedingungen erfüllen.

Beides zusammen lässt sich – merkwürdigerweise – nur für bestimmte Werte E , eben die Eigenwerte der zuSG bzw. die Eigenwerte des Energieoperators erreichen. Das ist der einzige (formale) Grund für die Existenz diskreter Energien, nicht etwa irgendwelcher Besonderheiten des Potenzials wie bei angeblichen klassischen Analogien zur Existenz diskreter Energien. Zugrunde liegt eines der durch Erfahrung gestützten Axiome der Quantenphysik, dass nämlich als Messwerte nur die Eigenwerte der jeweiligen Observable (hier des Energieoperators) auftreten können.

III.4 Die Mathematik dieser Gleichung und ihrer Lösungen zu verstehen ist relativ einfach.

Hier helfen

- Lösungsansätze, die in schulischen Fällen leicht überprüfbar sind,
- PC-Programme, in die nur mehr Testwerte für E eingegeben werden müssen, und die dann eine physikalische Lösung liefern (wenn E einem Eigenwert von H entspricht) oder eine unphysikalische, wenn der Testwert für E keinem Eigenwert entspricht. Dann werden auch die Randbedingungen nicht erfüllt.

Ich erinnere mich allerdings noch, welche Schwierigkeiten wir Studenten damals in der Quantenmechanik-Vorlesung hatten, zu akzeptieren, dass die übrigen Lösungen der SG so gar keine Bedeutung haben sollten, obwohl die Mathematik sie doch auch liefert. (Sie erfüllen nicht die Randbedingungen oder sind nicht quadratintegabel.) Schüler haben diese Schwierigkeiten offenbar nicht oder sie können leicht überwunden werden.

III.5 Lösungsverfahren für die Schule:

Konkret für das Beispiel „1 Teilchen im eindimensionalen Potenzialkasten mit unendlich hohen Wänden“. Die Potenzialfunktion $V(x)$ ist hier im Inneren überall 0. Weil sie am Rand des Kastens über alle Grenzen wächst, kann dort sicher kein Teilchen gefunden werden. $\psi(x=0) = \psi(x=2d) = 0$.

Die zuSG lautet hier

$$\psi''(x,t) = -K E \psi(x,t) \quad \text{für} \quad 0 < x < 2d, \quad (**)$$

wenn $2d$ die Breite des Potenzialkastens ist. Die zuSG hat hier also identische Form wie für ein freies Teilchen, aber sie muss für andere Randbedingungen erfüllt werden, und das bringt die wesentlichen Abweichungen zur Lösung für freie Teilchen. (Identische Gleichungen können offenbar – anders als der Lehrplan behauptet - ganz verschiedene Lösungen haben). Von jetzt ab wird nur noch mathematisch argumentiert.

III.5.1 Methode 1a:

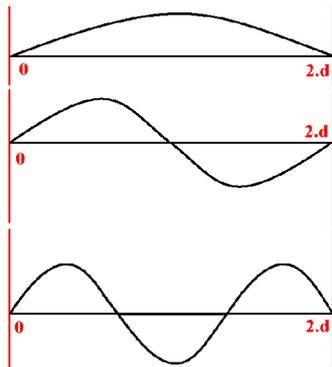


Abb. 2 Mögliche Lösungen der Wellenfunktionen für stationäre Zustände lassen sich erraten

Polynomfunktionen. Tatsächlich hat die zuSG in diesem Fall die Form einer Schwingungs-DGL mit den bekannten Lösungen. Aber diese Kenntnis braucht man gar nicht zu verwenden. Fraglich sind vor allem die zugehörigen Energieeigenwerte E .

Es liegen die **Lösungsansätze** nahe, die die Zahl der Nullstellen richtig beschreiben (Polynomansätze bieten sich auch an). Probieren wir:

$$\psi(x) = A \sin(k \cdot x)$$

Dann folgt $\psi'(x) = k \cdot A \cdot \cos(k \cdot x)$ und

$$\psi''(x) = -k^2 A \cdot \sin(k \cdot x) = -k^2 \cdot \psi(x) \quad *$$

Der Vergleich mit der zuSG ****** liefert $k^2 = 2m/\hbar^2 E$ und der **Ansatz ist bestätigt** (ein Schritt, mit dem ich als Student meine Schwierigkeiten hatte. Ich konnte nicht recht glauben, dass man für eine komplexe Gleichung, wie die zuSG, durch einen Ansatz mehr als eine spezielle Lösung erhalten kann. Die Theorie der linearen DGL mit konstanten Koeffizienten lehrte aber genau das).

E bzw. k sind nach wie vor unbekannt. Jetzt hilft aber die Ortsabhängigkeit weiter. Die erste Nullstelle des \sin ist bei $k \cdot 2d = \pi$, allgemein ist die letzte Nullstelle bei $k \cdot 2d = n \cdot \pi$ ($n \in \mathbb{N}$). Also kennt man für die verschiedenen Zustände k und damit E :

$$k = n \cdot \pi / 2d \quad (n \in \mathbb{N}) \quad \text{und}$$

$$E = \hbar^2 / 2m k^2 = \hbar^2 / 2m (n \cdot \pi / 2d)^2 = \hbar^2 \pi^2 / 8d^2 m n^2 = \hbar^2 / (32d^2 m) n^2 \quad (n \in \mathbb{N})$$

Selbstverständlich wissen Sie, wie die Lösungen jetzt diskutiert werden müssen:

$E_n = E_1 n^2$ ($n \in \mathbb{N}$) und Sie würden das quadratische Wachstum der Energie und die Existenz einer Grundzustandsenergie E_1 erarbeiten. Die Abweichung der Grundzustandsenergie von 0 wird durch die Heisenbergsche Unbestimmtheits-Relation begründet.

III.5.2 Methode 1b (Einpassung halber Wellenlängen):

Es wird meistens ein alternativer Lösungsweg vorgeschlagen, indem eine **deBroglie-Wellenlänge** ins Spiel gebracht wird. Es wird gesagt, dass die Lösungen im wesentlichen freie Teilchen beschreiben sollen, für deren Impuls gilt $p = h/\lambda$.

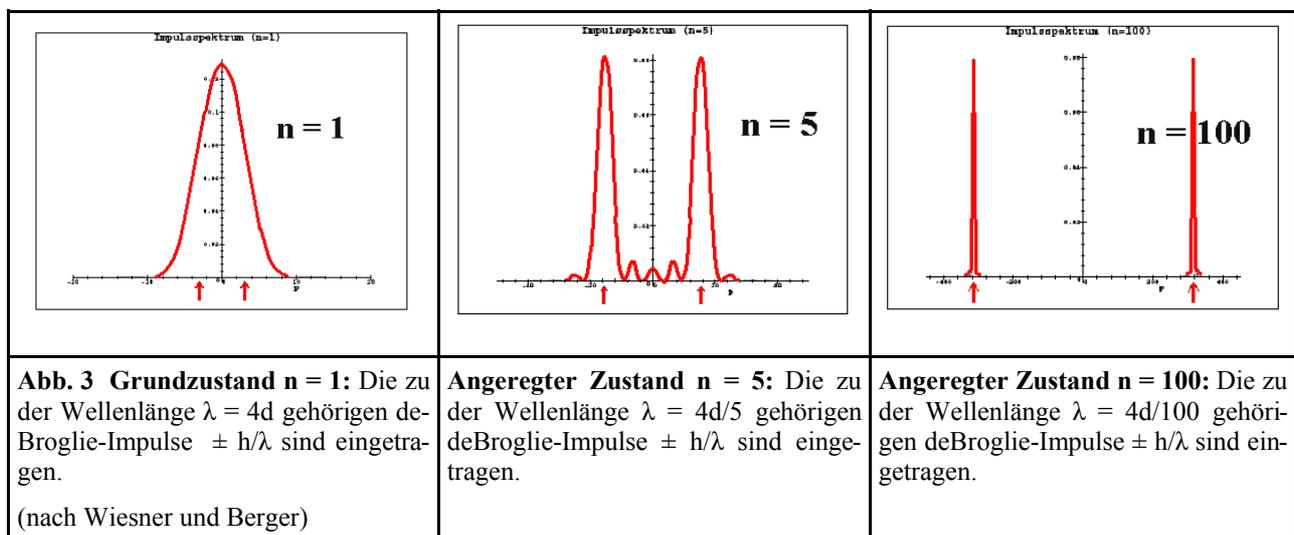
λ erhalte man durch Einpassen von halben Wellenlängen in die Länge des Kastenpotenzials, also $\lambda/2 = 2d/n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) Damit hat man dann sofort Impuls und die Energie:

$p = h/4d n$ und $E = p^2/2m = \hbar^2/32d^2 m n^2$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) wie oben. Das erscheint sehr suggestiv und einfach.

Es wird auch noch diskutiert, dass die Abweichung von freien Teilchen ja nicht so schlimm sei, da ja auch die Teilchen mit dem Impuls $-p$ der angeblich reflektierten Teilchen, zur gleichen Energie führen.

Eine solche Diskussion entbehrt jeder Grundlage, da es in solchen Zuständen **keine bewegten Teilchen** mit einem bestimmten Impuls gibt. Genauso wenig wie es in solchen Zuständen eine kinetische Energie als Eigenschaft des Systems gibt, genauso wenig gibt es eine Bewegung oder einen Impuls(-Betrag) als Eigenschaft des Systems in solchen Zuständen (E und p sind nicht gleichzeitig messbar).

Man kann allerdings das **Impulsspektrum** für die gefundenen Zustände **berechnen**. Dazu ist durch Fouriertransformation die Wellenfunktion in den Impulsraum ($\psi(p)$) umzurechnen. Sie können in beliebigen Tabellen der FT nachschauen und finden dort für endlich viele Sinusse einen sehr komplizierten Ausdruck für die Impulsabhängigkeit der Transformaten $\psi(p)$, der ein breites Impulsspektrum mit – in der Regel - Schwerpunkten bei den vermuteten deBroglie-Wellenlängen – h/λ und $+h/\lambda$ verrät. Ich zeige Ihnen die Rechnungen von Prof. Wiesner und Mitarbeitern (Abb. 3).



Das heißt, die Argumentation kann so eigentlich nicht korrekt sein. Ich glaube, man kann allerdings verstehen, warum sie trotzdem zum richtigen Ergebnis führt: Die Lösung für den einzelnen Potenzialtopf im Ortsraum muss identisch sein mit der **Lösung eines anderen Problems**, nämlich, wenn man beliebig viele identische Potenzialtöpfe nebeneinander setzt (Kronig-Penning-Modell).

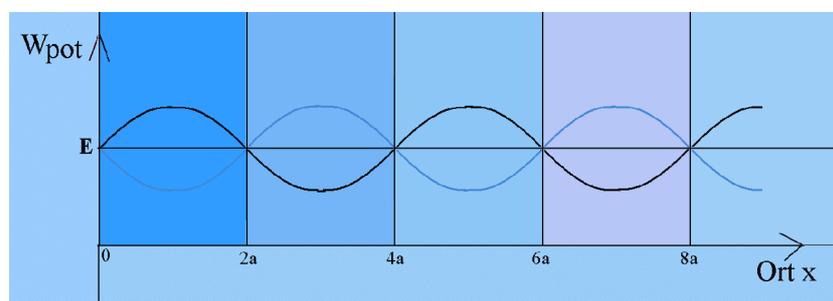


Abb. 4 Fortgesetzte unabhängige Potentialkästen ohne Einfluss auf das Verhalten der Wellenfunktion in einem von ihnen (sie sollten auch nach links fortgesetzt werden).

Wegen der unendlich hohen Wände können sie sich nicht gegenseitig beeinflussen. Es gilt jetzt für sie die Translationsinvarianz im Raum bzgl. $2a$ und deswegen muss es diskrete Impulse geben (Symmetrien wie die Translationsinvarianz führen immer zu Erhaltungsgrößen, wie hier dem Impuls: Noether-Theorem.). Die FT liefert für dieses Problem mit unbegrenzt vielen Sinussen dann auch tatsächlich ein diskretes Impulsspektrum mit den Impulsen $-h/\lambda$ und $+h/\lambda$ (was nicht auf das originale Problem übertragen werden kann), und macht den Lösungsansatz korrekt. So kann man

begründen, weshalb die Methode „Einpassen von halben Wellenlängen“ doch trotz aller Bedenken zum richtigen Ergebnis führt. Da man diese Begründung in der Schule in der Regel vermeiden muss, würde ich trotzdem die Methode 1a bevorzugen.

Diskussion der Lösung:

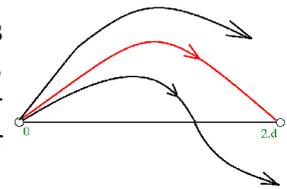
In einem Schulbuch der 70-er Jahre ist einmal von einem namhaften Verfasser die Frage aufgeworfen worden, wie denn die Teilchen, die sich ja nie an den Nullstellen von ψ „aufhalten“ dürfen, über die Nullstellen hinwegkommen, wenn sie im Kasten hin- und herlaufen.

Wie würden Sie diese Frage beantworten, wenn ein Referendar oder Schüler Sie danach fragen würde?

Nun, wo sich ein Teilchen „aufhält“, wenn sein Ort nicht gemessen wird, ist eine Frage aus dem Reich der Spekulationen. Die Physik kann dazu nichts sagen. Deswegen würde ich auch den Begriff der „Aufenthaltswahrscheinlichkeit“ vermeiden, weil ich ja damit den Schülern suggerieren würde, dass das Teilchen sich schon irgendwo aufhält, nur weiß ich nicht wo, oder gar, dass sich das Teilchen an verschiedenen Orten gleichzeitig mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten aufhält. Man spricht von „Nachweiswahrscheinlichkeit“; nur zu einer solchen kann die Physik Aussagen machen.

Zur Frage:

- Sie ist falsch gestellt. Denn die Wahrscheinlichkeit für den Nachweis eines Teilchens an einem bestimmten Ort ist immer 0. Umgekehrt gibt es kein endliches Ortsintervall Δx , in dem das Betragsquadrat der Wellenfunktion ganz verschwindet. Der Kern der Antwort ist aber Folgender:
- Das Teilchen „kommt nicht“ über die Nullstellen hinweg. Es hat keinen Ort (wenn er nicht gemessen ist). Es bewegt sich in solchen Zuständen nicht hin- und her. Das einzige, was die Physik sagen kann, das aber mit extremer Sicherheit, ist, dass es mit der und der Wahrscheinlichkeit in einem gewissen Intervall Δx um eine Stelle x herum nachgewiesen werden kann, wenn man eine solche Ortsmessung tatsächlich vornehmen würde.



III.5.3 Methode 2: Tabellenkalkulation

Die zuSG (eine gewöhnliche DGL) wird numerisch mit **Tabellenkalkulation** durch „**Schießen**“ gelöst. Man schießt also wieder auf die Ähnlichkeit mit der Gleichung einer harmonischen Schwingung.

Für E ($E - V$: „Federkonstante“) wird ein Testwert gewählt. Von einem Rand $x = 0$ ausgehend wird ein beliebiger Ansatz für $\psi'(0)$ gemacht, sozusagen für den Abschusswinkel.

$\psi(0) = 0$ - und mit der zuSG: $\psi''(0) = 0$ - liegt ohnehin fest. Mittels

$$\psi'(\Delta x) = \psi'(0) + \psi''(0) \cdot \Delta x \quad \text{und}$$

$$\psi(\Delta x) = \psi(0) + \psi'(0) \cdot \Delta x$$

erhalten Sie die entsprechenden Werte für das nächste Intervall. Allgemein kommt man mit

$$\psi'(x+\Delta x) = \psi'(x) + \psi''(x) \cdot \Delta x \quad \text{und}$$

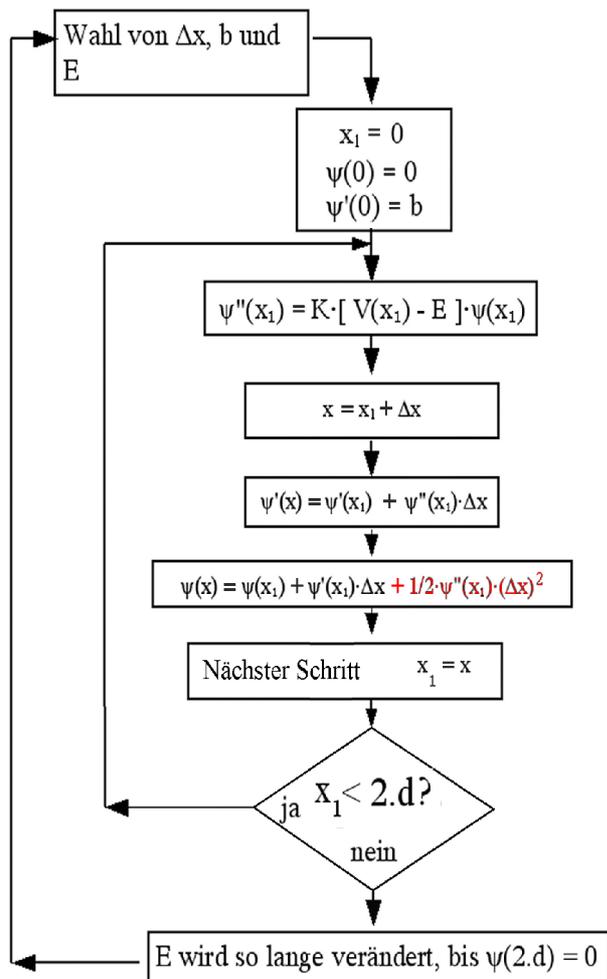


Abb. 6 Flussdiagramm zur Lösung der zuSG für einen eindimensionalen Potenzialkasten mittels Tabellenkalkulation

zum Zweck der Physik zu hoch. Wenn aber die Schüler den Umgang mit der Tabellenkalkulation bereits kennen, ergeben sich neue physikalische Erkenntnisse:

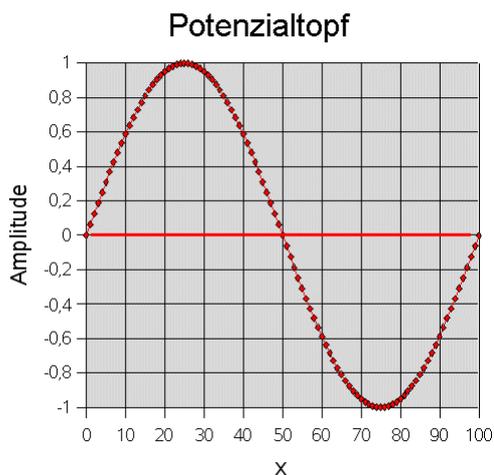


Abb. 7 Per Tabellenkalkulation berechnete Wellenfunktion

$$\psi(x+\Delta x) = \psi(x) + \psi'(x) \cdot \Delta x$$

zur nächsten Ortskoordinate. Wie bei der Methode der kleinen Schritte wird das Verfahren etwas genauer, wenn man den quadratischen Term (rot) noch mitnimmt, wie im Flussdiagramm (Abb. 6): eine Konvergenzbeschleunigung, die etwa dem Halbschrittverfahren entspricht.

Schließlich wird $x = 2 \cdot d$ erreicht. Jetzt entscheidet es sich, ob der richtige Wert für E gewählt wurde. Wenn ja, ist $\psi(2d) = 0$. Andernfalls muss E verändert werden. Das wird wiederholt bis $\psi(2d) = 0$. Der „Abschusswinkel“ $\psi'(0)$ spielt für E keinerlei Rolle. Durch Normierung wird er ohnehin korrigiert. Für das Problem des Potenzialkastens mit unendlichen Wänden lohnt sich der Aufwand nicht. Das Verfahren kann aber leicht für andere Potenzialformen erweitert werden incl. für die Radialanteile des Wasserstoffatoms oder Beispiele zum Tunneleffekt.

IV.5.4 Eine Bemerkung zur Tabellenkalkulation

Wenn man hier eine Tabellenkalkulation erst einführen würde, scheint mir der Aufwand

a) **Es handelt sich um ein Eigenwertproblem.** Der Kernpunkt ist nicht die Überlagerung von gegenläufigen Wellen zu stehenden Wellen. Das ist ein häufiger, wenn auch nicht unbedingt notwendiger Mechanismus. Bei den zwei Eigenschwingungen zweier Massen käme auch niemand auf die Idee, sie durch stehende Wellen zu erklären.

b) Die Tabellenkalkulation zeigt (wie andere Lösungsverfahren auch), wie ψ über die Länge des Potenzialkastens entsteht, **ohne** dass dafür irgendwelche „**Mechanismen**“ bemüht werden (wie etwa die Überlagerung gegenläufiger Wellen zu stehenden). Es wird klarer, dass kein Zusammenhang zwischen Wellen und einer vermeintlichen Teilchenbewegung benutzt wird. („Interferenz von Möglichkeiten“ und nicht von „etwas“)

III.5.7 Methode 3: Einsatz fertiger PC-Programme

Ich möchte Küblbecks „**Schrödingers Schlange**“ und ein ähnliches Programm von Bader erwähnen

(SCHRTOPF). Dabei wird – im Prinzip ähnlich wie bei der Tabellenkalkulation ein Testwert für E so angepasst, dass die Wellenfunktion überall endlich bleibt. Weil dies nicht numerisch, sondern

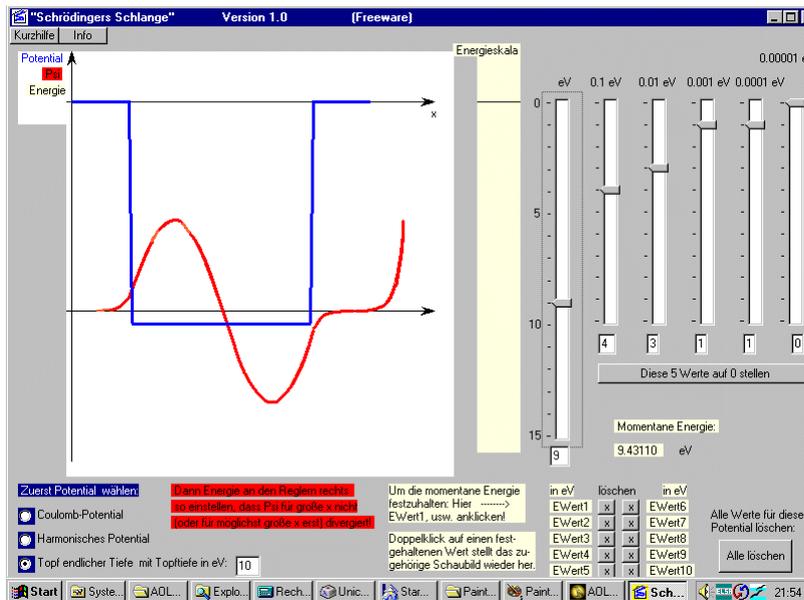


Abb. 8 Noch nicht ganz gelungene Anpassung des Energieeigenwert. Gemeint ist hier wohl eine Energie $E = -9,43110 \text{ eV}$

mit Schieberegler geschieht, dürfte die Hemmschwelle für Schüler gering sein.

Ich zeige eine noch nicht ganz fertige Anpassung für einen endlich tiefen Potenzialtopf. Die Energie wird gegenüber dem Topfboden nur geringfügig angehoben (1. angeregter Zustand).

Auch mit einer Tabellenkalkulation lassen sich für den endlich tiefen Potenzialtopf Energieeigenwerte finden, wenn die Suche auch etwas langwierig sein kann. Man geht dann vom Zentrum einer symmetrisch gelegenen Potentialschwelle aus. Die Symmetrie muss sich dann auch in den Wellenfunktionen

widerspiegeln.

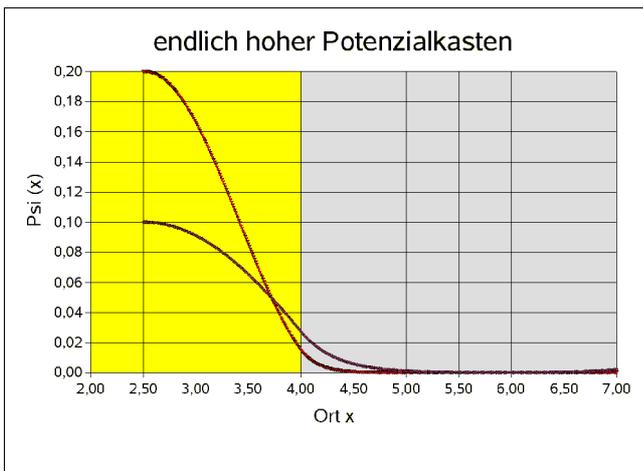


Abb. 9 Ergebnis einer Tabellenkalkulation: $V = 10$ außerhalb von $1 < x < 4$, $E = 0,75287$. Zwischen $x = 1$ und $x = 2,5$ müssten die Kurven symmetrisch fortgesetzt werden. Man startet mit vorgegebenen Werten für ψ und $\psi' = 0$ im Zentrum bei $x = 2,5$

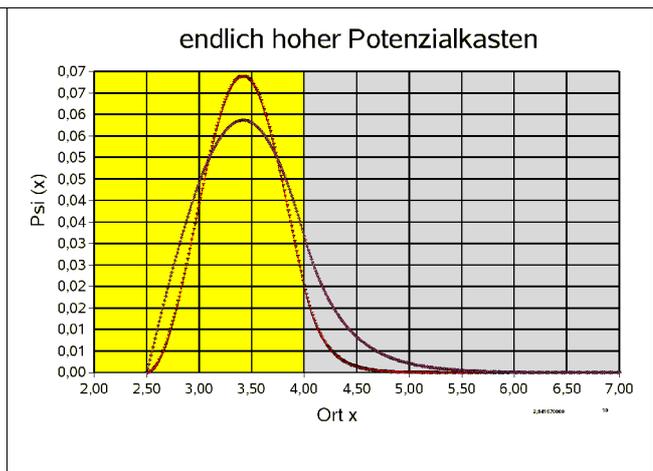


Abb. 10 Ergebnis einer Tabellenkalkulation: $V = 10$ außerhalb von $1 < x < 4$, $E = 2,94157$. Zwischen $x = 1$ und $x = 2,5$ müssten die Kurven symmetrisch fortgesetzt werden. Man startet mit vorgegebenen Werten für $\psi = 0$ und ψ' im Zentrum bei $x = 2,5$

IV.5.8 Diskussion

Die Schüler lernen auf jeden Fall etwas über die grundsätzliche Lösung von Eigenwert-Gleichungen mit ihren Randbedingungen. Sie machen sich bewusst, wie scharf die Energieeigenwerte sein müssen, um physikalische Lösungen der SG zu liefern. Bereits geringfügig vom gefundenen E-Wert abweichende Energien können nicht zu physikalischen Lösungen führen.

- Die Physik lässt keine anderen Werte für E zu.
- Anders als bei klassischen Analoga zu diskreten Energiestufen (Eigenschwingungen stellen

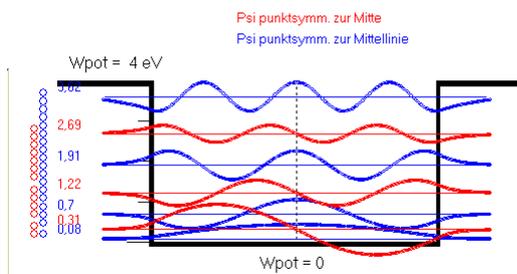


Abb. 11 Bildschirmausschnitt von Baders Programm SCHRTOFF.EXE. Hier werden die Lösungen automatisch gesucht. W_{pot} ist auch hier die Potenzialfunktion, nicht die potenzielle Energie.

m.E. die engste Analogie dar) gibt es hier nur „alles oder nichts“: Entweder eine der erlaubten Energien oder gar keine.

- **Klassische Eigenschwingungen** zeichnen auch bestimmte Eigenfrequenzen aus, aber das System kann auch in benachbarten Frequenzen schwingen, wenn auch nur mit kleiner Amplitude.
- Die diskreten Energien haben nichts mit besonderen Formen der **Potenzialkurve** zu tun, die etwa mehrere Minima aufweisen würde. Eine solche würde in der klassischen Physik zu **mehreren stabilen Lagen** führen. Abweichende Positionen sind dann immer noch möglich, aber eben nicht stabil. Vielmehr sind die dis-

kreten Energien eine Folge der speziellen Fragestellung (stationäre Zustände) und der Randbedingungen. Dahinter steckt das Messpostulat der Quantenphysik, dass nämlich nur Eigenwerte einer Messgröße (einer Observablen) als Messwerte für sie auftreten können.

- Uns Lehrer wundert die Schärfe der Eigenwerte wohl nicht mehr. Für einen Schüler müsste sie „starker Tobak“ sein. Für ihn muss es geradezu ein Wunder sein, dass in der SG, die für ihn mehr oder weniger vom Himmel gefallen ist, nicht nur diese erlaubten E-Werte enthalten sind, sondern auch noch die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten aller möglichen Messwerte, und das – im Falle der Energieeigenwerte – auf eine solche „mysteriöse“ Weise! (Und außerdem noch viele andere Lösungen, die offenbar keinerlei Bedeutung haben). Man kann ihn nur trösten: Bisher wurden noch keine (erklärbaren) Abweichungen zwischen den physikalischen Lösungen der SG und Beobachtungen gefunden. Die Erfahrung lehrt auch, dass die übrigen nur mathematischen Lösungen (die z.B. die Randbedingungen nicht erfüllen) keinerlei Bedeutung für die Physik haben.

III.5.8 Eigenwerte in der Realität?

In Realität sind die Energiewerte in der Regel natürlich nicht so scharf, weil ja jedes System an die Umwelt angekoppelt ist, meist an das Strahlungsfeld. Man muss dann sagen, dass die SG nur eine Näherung darstellt, die diese Ankopplung vernachlässigt. In nullter Näherung kann die Ankopplung an die Umgebung durch die HUR berücksichtigt werden: Wenn es Mechanismen gibt, die eine Verkürzung der Lebensdauer eines Energieniveaus auf die Zeit Δt bewirken (indem z.B. ein angeregtes System zur Energieabgabe veranlasst wird), dann müssen Energiemessungen streuende Werte liefern in einem Bereich ΔE um den Mittelwert $\langle E \rangle$, wobei $\Delta E \propto 1/\Delta t$. Wieder muss man eigentlich staunen, dass die Quantenmechanik für einen so komplizierten Vorgang doch wieder durch ein so pauschales und allgemein gültiges Instrument wie die HUR die Realität richtig beschreiben kann. In der Hohlraum-Quantenelektrodynamik (CQED) werden Fälle betrachtet, wo ein angeregtes Atom nur schwer seine Energie verlieren kann, weil der Hohlraum wegen seiner Abmessungen das Photon nicht aufnehmen kann. Dann ist der angeregte Zustand sehr langlebig (Fälle bis 30 s sind bekannt) und die zugehörige Energie sehr scharf („Uhrenübergang“ mit extrem geringer Frequenzunschärfe).

III.5.9 Ausblick: H-Atom

Im Fall der Lösung der Radialgleichung für das H-Atom (für die Pseudowellenfunktion $\varphi = r \cdot \psi(r)$) bietet sich auch dieses Verfahren (Einsatz fertiger Programme) neben einer Tabellenkalkulation an. In der verwendeten Tabelle braucht nur noch die geänderte Potenzialfunktion eingesetzt werden. Der Rest geschieht automatisch und liefert z.B. die Graphik der Abb. 12. Schwierig scheint mit hier zu sein, dass nur die Radialgleichung für den transformierten Radialanteil der („Pseudo-“) Wellen-

funktion $\phi = \Psi \cdot r$ einfach ist (nach der Transformation des 3-dimensionalen Problems in ein 1-dimensionales. M.E. überschreitet man den Rahmen eines sinnvollen Unterrichts, wenn man diese Transformation der DGL im Unterricht vollziehen würde.)

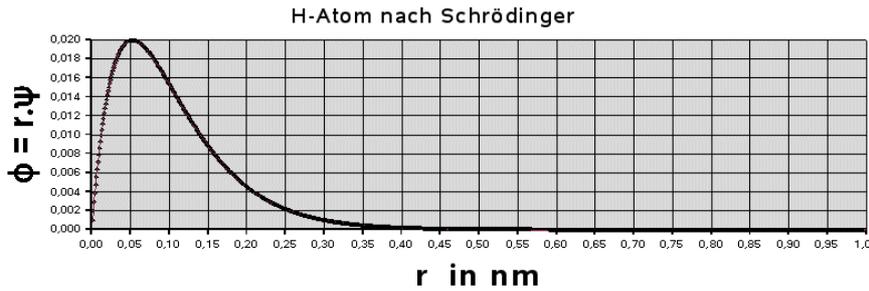


Abb. 12 Lösung der Radialgleichung für das H-Atom im Grundzustand durch eine Tabellenkalkulation ermittelt. $\Psi = \phi/r$ genügt einer Exponentialfunktion.

Wenn man ein fertiges Programm wie „Schrödingers Schlange“ verwendet, könnte man diese Schwierigkeit

leichter unter den Teppich kehren. Ich plädiere aber doch lieber dafür, diese Untersuchung im Schulunterricht ganz wegzulassen und bestenfalls die fertigen Wellenfunktion des Programms **SCHROED.EXE** der Uni Würzburg diskutieren zu lassen, ein Programm, das ja die vielfältigsten Darstellungsweisen der räumlichen Wellenfunktionen bietet (Abb. 13, 14).

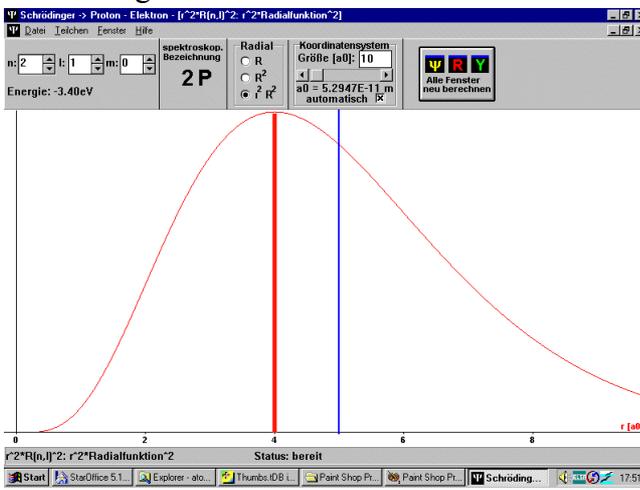


Abb. 13 Radialanteil der Pseudowellenfunktion für den 2p-Zustand beim H-Atom. Das ist einer der Zustände, bei dem der Bohrsche Radius (rote Linie) noch irgendeine Bedeutung hat. Beide Abbildungen nach Bildschirmfotos von **SCHROED.EXE** der Uni Würzburg.

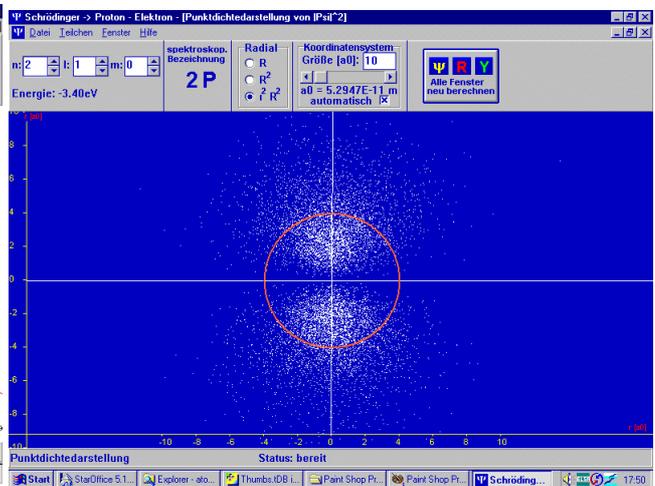
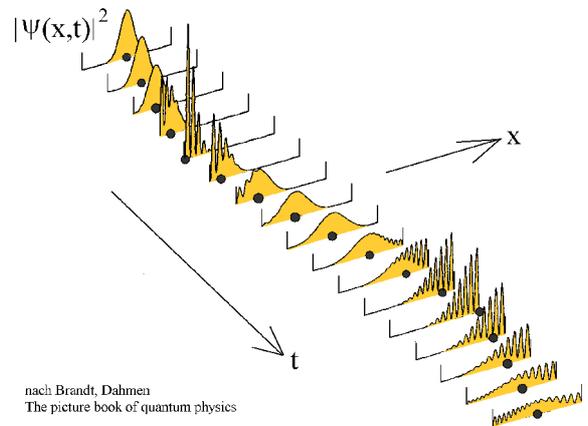


Abb. 14 Entsprechende Punktedichte für den 2p-Zustand beim H-Atom für Nachweisorte. Der Bohrsche Radius ist hier eingetragen.

III.5.10 Hin- und herlaufende Teilchen?

Es gibt natürlich auch Zustände, die eher einem **hin und herlaufenden Teilchen** entsprechen. Eine vollständige Entsprechung ist ja nicht möglich, weil ein Quantenteilchen eben nicht gleichzeitig E und E_{kin} haben kann, weil die Welle **nicht** das Teilchen beschreibt, sondern ausschließlich Wahrscheinlichkeiten für den Ausgang von Messungen an ihm. Für solche Zustände braucht man die zeitabhängige SG.

1. Nach der zeitabhängigen SG erhält man sie durch Überlagerung von stationären Zuständen mittels der Exponentialfaktoren $e^{iE/\hbar}$. Sie sind dann i.A. komplexwertig. Nur ihr Betragsquadrat lässt sich als reelle Zahl darstellen. Das Ergebnis einer Rechnung von Brandt und Dahmen zeigt Abb. 15 (Ein Programm von Bader zeigt Entsprechendes):



nach Brandt, Dahmen
The picture book of quantum physics

Abb. 15 Wellenpakete für ein hin- und herpendelndes Teilchen im Potenzialkasten. Man erkennt das Zerfließen.

Grob erkennt man sehr wohl ein Hin- und Herpendeln, aber die Verteilung wird immer breiter, sie läuft auseinander.

2. In der **klassischen** Schrödinger-Theorie (1926) hatte man ein solches zunächst halbwegs lokalisiertes Wellenpaket als Repräsentant eines Teilchens angesehen („**verschmiertes Teilchen**“, $|\psi|^2$ als „Teilchendichte“ oder „Ladungsdichte“ einer angeblichen „**Ladungswolke**“). Aber: Was zunächst wie ein halbwegs lokalisiertes Wellenpaket aussah, bleibt nicht lokalisiert und verliert damit seine Eignung zur **Beschreibung** von Teilchen:

Wellen (Wellenfunktionen) taugen nicht zur **Beschreibung** von Teilchen, sondern nur zur Vorhersage von Wahrscheinlichkeiten für Messergebnisse an Teilchen.

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion gibt **keine Teilchendichte** („Ladungsdichte“, „Elektronendichte“) wieder, sondern ausschließlich die Nachweiswahrscheinlichkeit in einem Intervall der Breite Δx : $|\psi(x)|^2 \Delta x$.

Diese Erscheinung war einer der Gründe, weshalb die Vermutung der überholten klassischen Schrödinger-Theorie - „**Teilchen = Wellenpaket**“ - aufgegeben werden musste:

Ein Teilchen (z.B. ein Elektron) wird seit Etablierung der Quantenmechanik in den 30-er Jahren unter keinen Umständen mehr als Welle oder Wellenpaket angesehen.

Gegen diese Fehlinterpretation sprach auch die Tatsache, dass man zwischen den Teilen der vermeintlichen „Ladungswolke“ **keinerlei elektrostatische Wechselwirkung** zu beobachten war. Dass es solche „Ladungswolken“ (im wörtlichen Sinn) im Anschauungsraum nicht gegeben kann, sieht man auch daran, dass für zwei Teilchen das Wellenpaket schon in einem 6-dimensionalen Raum operieren würde.

Ein Quantenteilchen ist aber natürlich auch kein klassisches Teilchen.

Das Wellenpaket beschreibt nicht das Teilchen, sondern nur Wahrscheinlichkeiten für Messwerte an den Teilchen.

In einem früheren Lehrplan hieß es „Das Elektron im Atom als stehende Welle“. Eine solche Formulierung ist seit den 30-er Jahren des letzten Jahrhunderts nicht mehr im Einklang mit der Quantenphysik.

IV Methodisches

Ich habe einige Schüleraktiverenden Methoden bereitgestellt, mit denen Schüler die relevanten Inhalte weitgehend selbstständig erarbeiten können. Ich möchte hier nur erwähnen:

IV.1 Experten-Team-Verfahren

Jedes Team besteht aus 2 Schülern, die sich mit getrennten, aber aufeinander abgestimmten Texten jeweils einen Schritt der Argumentation erarbeiten und sich so zu „Experten“ machen. Anschließend instruiert jeder der „Experten“ seinen Partner über die neuen Erkenntnisse.

Beispiel:

1 Die Partner informieren sich über Grundlagen des Problems: vom Farbstoff-Molekül zum klassischen Potenzialkasten

1A **Partner A wird zum Experten:** Klassisches Modell lang gestreckter Molekülketten

1B **Partner B wird zum Experten:** Was sagt die Quantenphysik zu klassischen Modellen?

(komplementäre Messgrößen wie E und p, E und E_{kin} ; 2 klassisch denkbare Möglichkeiten, zwischen denen nicht unterschieden wird: also Interferenz)

1A/B **Die Experten informieren sich gegenseitig**

2A Partner A wird zum Experten: Wir suchen "stationäre Zustände", d.h. Eigenzustände der Energie bzw. Zustände mit bestimmter Energie!

2B Partner B wird zum Experten: E und x , E und p_x nicht gleichzeitig existent/messbar: Es hat in solchen Zuständen keinen Sinn, von einer Bewegung des Teilchens zu sprechen.

2A/B Die Experten informieren sich gegenseitig

3 SL: Stark geführte Erarbeitung der Energiestufen durch Einpassen von halben Wellenlängen

4A Partner A wird zum Experten: Wie kommt es zur Ausbildung stehender Wellen – Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation (HUR) halbklassisch plausibel gemacht

4B Partner B wird zum Experten: Was bedeutet es, dass eine von 0 verschiedene Minimalenergie (Grundzustandsenergie) vorhanden ist?

4A/B Die Experten informieren sich gegenseitig

IV.2 Lernen an Stationen

Zwei Partner A und B arbeiten zusammen. Z.B. **in Partnerarbeit** werden die Aufgaben gelöst, wobei Hilfekärtchen Anstöße geben können und Lösungskärtchen einen Vergleich bzw. eine Korrektur ermöglichen.

Station 1_1: Einpassen von Wellenfunktionen

Station 1_2: Interpretation von $|\psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte

Station 1_3: Von der Wahrscheinlichkeitsdichte zu Wahrscheinlichkeiten (Integral)

Station 1_4: Lösungsansätze für ψ

Station 1_5: Normierung

Station 1_6: Nachweis, dass die Lösungsansätze die zuSG lösen

Station 1_7: Bedingung für physikalische Lösungen, benutzt für „Schrödingers Schlange“ von Küblbeck

IV.3 Fragebogenmethode

Hier geht es um Interpretationsfragen. Da es schwierig ist, halbwegs logisch und korrekt eine schwierige Argumentation zu formulieren, werden die Schüler durch vorgegebenen Antworten unterstützt, die teils zutreffend, teils unzutreffend sind. Die Schüler müssen dann Stellung nehmen und die ihnen richtig erscheinende Antwort auswählen.

Beispiel: Fragebogen zum Problem: „**Wie kommt ein Teilchen in stationären Zuständen über den Knoten hinweg?**“

<i>These</i>	<i>Stellungnahme (Ja/Nein, Begründung)</i>
Im linearen Potenzialkasten kommt ein Teilchen nicht über den Knoten hinweg, weil es sich dort nie aufhalten darf.	Nein, denn 1. stationärer Zustand gewählt 2. kein physikalischer Sinn, von einer Bewegung oder einem Ort eines Teilchens zu sprechen 3. die Wahrscheinlichkeit, an einem bestimmten Ort das Teilchen zu finden, ist überall 0.
Die stationären Zustände entsprechen nicht hin- und herlaufenden Teilchen; sie enthalten keinerlei Informationen über eine Bewegung der Teilchen. Keine sinnvolle Frage!	Ja, das ist Kernpunkt!
Das geht so schnell, dass man das nicht feststellen kann.	heute gewaltig fortgeschrittene Messtechnik: Dennoch Nein! Siehe Kernpunkt.

<i>These</i>	<i>Stellungnahme (Ja/Nein, Begründung)</i>
Ein Teilchen in stationären Zuständen ist nicht lokalisiert; es ist mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zu beiden Seiten des Knotens zu finden.	Ja, aber nicht in dem Sinn, dass es zu beiden Seiten des Knotens „verschmiert“ ist oder sich dort gleichzeitig in Teilen aufhält.
Ein Teilchen hat in solchen Zuständen mit fester Energie keinen (bestimmten) Ort. Dieser entsteht erst durch eine Ortsmessung. Wo das geschieht, ist eine Frage der Statistik gemäß dem Betragsquadrat der Welle.	Ja, das ist der Kernpunkt!

IV.5 Lernen durch Lehren (Kurzreferate)

Hier werden aufeinander abgestimmte Texte vorgelegt (jeweils 1 Seite), die als Grundlage eines Kurzreferates (ca. 10 min) gewählt werden können. Hier sind alle nötigen Informationen, angepasst an das Schülerniveau, jeweils zusammengestellt. Falls die Schüler es gelernt haben, dass auch Referate ihrer Kurskollegen ernstgenommen werden müssen, entsteht so ein umfassendes Bild des Themas. Folgende Referatthemen werden vorgeschlagen:

- Absorption und Emission bei bestimmten lang gestreckten Farbstoff-Molekülen (anwendungsorientierte Hinführung zum Modell des Potenzialkastens)
- Klassische Betrachtung des linearen Potenzialkastens
- Grundsätzliche quantenphysikalische Aussagen zum linearen Potenzialkasten (z.B. dass E und E_{kin} nicht gleichzeitig Eigenschaften des Systems sein können, dass es bei stationären Zuständen keine Bewegung gibt)
- Energiezustände des linearen PK
- Wellenfunktionen beim LPK
- Wellenfunktionen beim LPK – Normierung
- Simulationen zum unendlich hohen bzw. endlich hohen PK (basierend auf „Schrödingers Schlange“ von Küblbeck)
- Strahlende Übergänge beim LPK (Auswahlregeln und auch Folgen des Pauli-Prinzips bei Mehrteilchenzuständen)
- Wir machen Quanteneffekte beim LPK plausibel (klassisches Modell stehender Wellen, Grundzustandsenergie von der HUR gefordert, Plausibelmachen der HUR am LPK)

V Zum Tunnel-Effekt

V.1 „Tunneln“ als Folge einer falschen Überlegung:

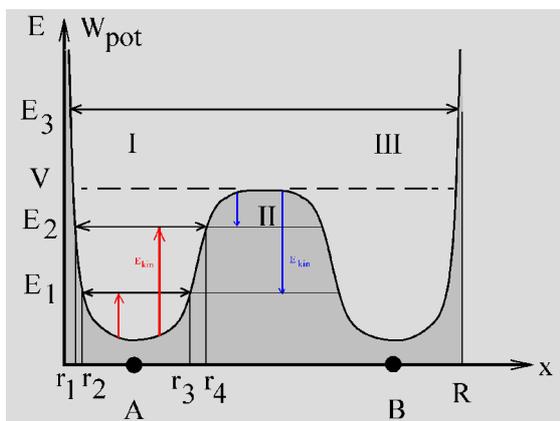


Abb. 16 Doppelpotenzialmodell. Ein klassisches Teilchen mit Energien wie E_1 und E_2 ($< V$) kann nicht von einer Mulde in die andere gelangen. Es müsste durch den Wall „hindurchtunneln“.

Betrachten wir das an einem Beispiel mit einem Doppelpotenzialtopf-Modell, der ein Modell für ein zweiatomiges Molekül sein könnte. Die beiden Potenzialtöpfe sind durch einen Potenzialwall der Höhe V getrennt (Abb. 16, 17): Die Brisanz der Problematik ergab sich aus einer **falschen Überlegung**.

1. Nach klassischer Argumentation kann ein Teilchen mit einer Energie $E < V$, wie E_1 und E_2 , aus der Mulde A nicht in den Potenzialwall II und erst recht nicht in die Mulde B gelangen, weil es im Bereich II – wegen $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ – negative kinetische Energie haben müsste. Wenn ein *klassisches* Teilchen von A nach B gelangen sollte, müsste es durch den Potenzialwall „hindurchtunneln“ wie durch einen Kanal.

Das ist quantenmechanisch eine **unzulässige Argumentation**. Die zuSG liefert hier stationäre Zustände mit bestimmter Gesamtenergie E . Dann sind E_{kin} und E_{pot} keine Eigenschaften des Systems. Auch alle anderen Zustände lassen sich aus stationä-

ren Zuständen aufbauen. Es gibt also keine Zustände, die zugleich E , E_{kin} und E_{pot} als Eigenschaften haben.

Es kann also keine Rede davon sein, dass im Bereich II negative kinetische Energie vorliegen müsste. **Es gibt dort weder potenzielle noch kinetische Energie.** Das einzige Argument, das das Eindringen von klassischen Teilchen in den Potenzialwall ausschließt, ist quantenmechanisch nicht anwendbar!

Damit gibt es nichts mehr, was das „Tunneln durch den Potenzialwall“ verbieten könnte. Weiter muss man feststellen, dass sich das Teilchen keineswegs „durch den Potenzialwall bewegt“. Das Einzige, was physikalisch ausgesagt werden kann, ist, dass das Teilchen auch in diesem Fall in allen drei Bereichen I, II, III *gefunden* werden kann.

2. Man kann das Problem noch genauer untersuchen. Auch im Bereich II könnte man ja die kinetische Energie messen. Wegen $E = p^2/2m$ läuft das auf eine Messung des Impulses p (seines Betrags) hinaus.

Beschränken wir uns zunächst auf den Potenzialwall (Bereich II). Die kinetische Energie dort soll durch eine Messung festgestellt werden. Wir wollen mit Hilfe der HUR*) hier abschätzen, in welchem Bereich Werte bei Messungen von E_{kin} zu erwarten sind, nachdem wir das Teilchen im Potenzialwall lokalisiert haben. Dann ist der Ort offenbar nur noch un-be-stimmt innerhalb eines Bereichs Δx . Nach der HUR in der üblichen Form $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ ergibt sich daraus eine Impuls-un-be-stimmtheit $\Delta p_x \geq \hbar / \Delta x$. Sie führt, grob abgeschätzt, zu einer Un-be-stimmtheit der kinetischen Energie im Bereich II:

$$\Delta E_{\text{kin}} = \Delta p_x^2 / 2m \geq \hbar^2 / (\Delta x^2 \cdot 2m).$$

Das heißt: Wenn ein Teilchen im Bereich II festgestellt wurde, dann ist erstens seine potenzielle Energie nur einigermaßen be-stimmt, nehmen wir, an sie sei größenordnungsmäßig V . Zweitens ist seine kinetische Energie un-be-stimmt innerhalb der Unschärfe ΔE_{kin} . Es wird durchaus Messwerte für E_{kin} geben, die V und die Gesamtenergie sogar in einigen Fällen überschreiten. Welches Argument wollte dann noch verbieten, dass das Teilchen im Bereich II nachgewiesen wird? In diesem Fall verhindern nicht einmal klassische energetische Argumente, dass es dann auch im Bereich III nachgewiesen wird.

Hinweise:

- Wir untersuchen die Streuung der Messwerte für E genauer durch Ableitung aus $E_{\text{kin}} = p^2/2m$: $\Delta E_{\text{kin}} = p/m \Delta p = \sqrt{2E/m} \Delta p$. Bei einer Breite $\Delta x = a$ des Potenzialwalls streuen die Messwerte für p in einem Bereich $\Delta p \geq \hbar / \Delta x$. Daraus ergibt sich $\Delta E_{\text{kin}} \geq p/m \hbar / \Delta x$. Auch bei dieser verbesserten Näherung wächst die Streuung der Messwerte für E_{kin} mit abnehmender Breite des Potenzialwalls.
- Auch im Bereich I ist die kinetische Energie un-be-stimmt. Nach einer Ortsmessung mit der Orts-un-be-stimmtheit $\Delta x = r_1$ erhalten wir für die Energie-un-be-stimmtheit $\Delta E_{\text{kin}} \geq \hbar^2 / (r_1^2 \cdot 2m)$. Auch sie kann – bei genügend kleinem r_1 – die Höhe der Potenzialfunktion im Bereich II überschreiten und damit das klassische Argument hin-fällig machen.

V.2 Quantitatives zum Tunneleffekt?

In einfachen Fällen lassen sich die Wellenfunktionen für stationäre Zustände beim Tunneleffekt mit Tabellenkalkulation auch in der Schule behandeln (Methode „Schießen“). Für die Potenzialfunktion der Abb. 18 lässt sich mit der geringfügig geänderten Tabelle die Lösung und die Energie berechnen (Abb. 19, 20):

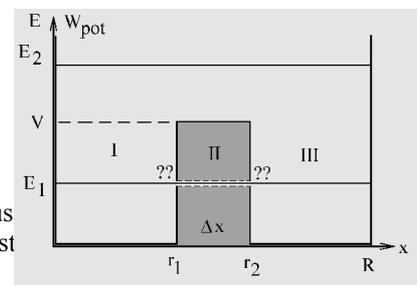


Abb. 17 Vereinfachtes Modell-Potenzial für ein zweiatomiges Molekül: ein falsches Bild für das „Tunneln“!

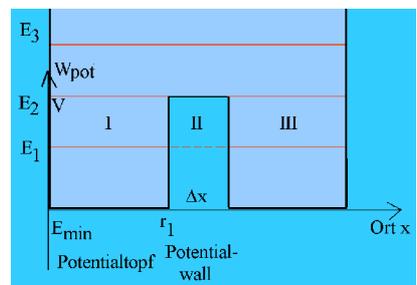


Abb. 18 Modell des Doppelpotenzialtopfes als Grundlage einer Tabellenkalkulation

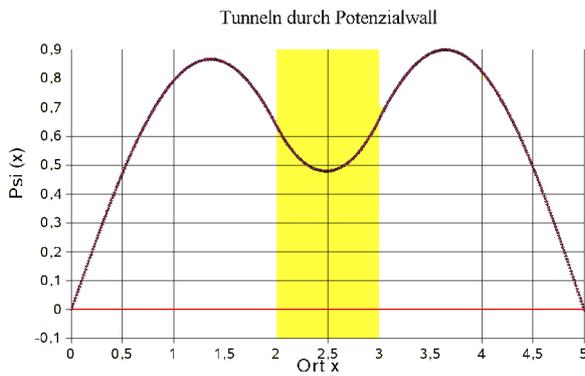


Abb. 19 Mit einem geeignet gewählten E ($E = 1,35 < V = 4$) trifft der Schuss den rechten Rand des Potenzialtopfes. Eine leichte Asymmetrie kommt von der beschränkten numerischen Genauigkeit des Algorithmus her oder vom noch nicht exakt gewähltem E .

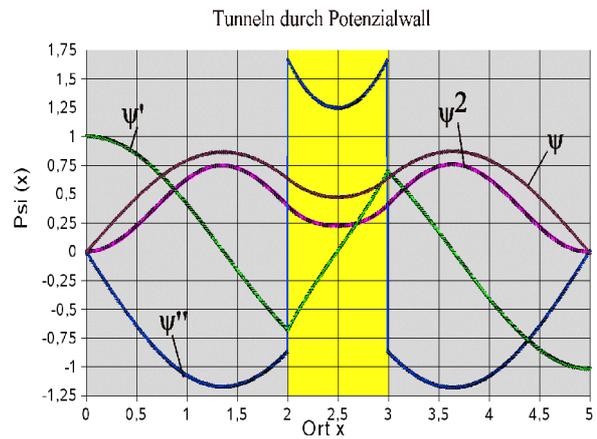


Abb. 20 Die purpurne Kurve für die Wahrscheinlichkeitsdichte zeigt, dass das Teilchen auch im Potenzialwall gefunden werden kann, obwohl die Gesamtenergie E kleiner als die Höhe der Potentialschwelle V ist. ($E = 1,35 < V = 4$)

V.3 Was sagt der Lehrplan?

Der bayerische Lehrplan schreibt im Zusammenhang mit dem endlich tiefen Potenzialtopf einen „Hinweis auf den Tunneleffekt“ vor. Ich kann mir nur denken, dass damit das exponentielle Eindringen in die Potenzialwand gemeint ist, was ich allerdings nicht unter der Bezeichnung Tunneleffekt kenne. Es gilt aber das gleiche wie dort:

In solchen Zuständen bestimmter Gesamtenergie haben kinetische und potenzielle Energie keinen physikalischen Sinn. Während klassisch ein Eindringen in die Potenzialwand wegen der dort nötigen negativen kinetischen Energie verboten ist (Abb. 21), gilt das Argument hier nicht.

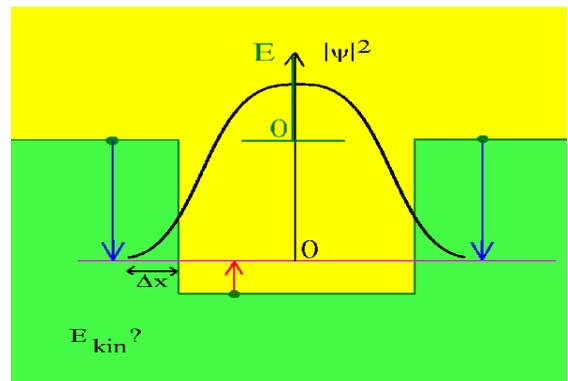


Abb. 21 Klassisch wäre in der Potenzialwand eines endlich tiefen Potenzialtopfes eine negative kinetische Energie erforderlich. Das gilt in der Quantenphysik nicht, weil ein Teilchen nicht gleichzeitig Gesamtenergie und kinetische Energie als Eigenschaften besitzen kann.

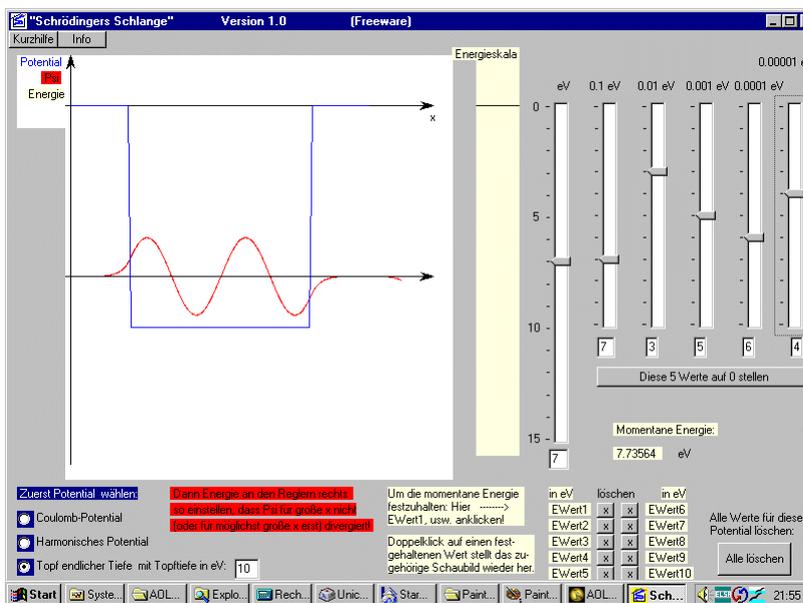


Abb. 22 „Exponentielles Eindringen“ in den Potenzialwall. Dargestellt ist der Ortsanteil der Wellenfunktion mit dem Programm „Schrödingers Schlange“ von Küblbeck.

Gleichwohl kann eine kinetische Energie in der Potenzialwand gemessen werden. Wenn wir annehmen, dass in einem Bereich der Breite Δx Teilchen nachgewiesen werden, ergibt sich eine Impuls-Unbestimmtheit $\Delta p \geq \hbar/\Delta x$, was zu einer Unbestimmtheit der kinetischen Energie führt, die die Höhe des Potenzialwalls weit überschreiten kann, besonders, wenn die Eindringtiefe Δx klein ist.

Es gibt hier keinen Grund, sich zu wundern, außer, wenn man fälschlicherweise annimmt, dass die Teilchen zugleich Gesamtenergie und kinetische Energie als Eigenschaften besitzen.

V Das Kreuz mit den Schrödinger-Gleichungen

Tatsächlich gibt es ja drei SG, die cum grano salis formal und mathematisch identisch sind, die mit ihren Lösungen aber völlig unterschiedlich zu interpretieren sind und zum Teil als nicht zutreffend erkannt wurden:

- Die **SG der klassischen Schrödinger-Theorie** (1926),
- die **SG der nichtrelativistischen Quantenfeldtheorie für das Schrödinger-Feld** (ca. 1930) und
- die **SG der Quantenmechanik** (ca. 1930).

Diese Mehrdeutigkeit ist ein Grund für viele Interpretationsschwierigkeiten und irreführenden Sprechweisen.

Die klassische Schrödinger-Theorie (Teilchen = Wellenpakete) ist seit Jahrzehnten überholt. Gegen sie sprachen schon sehr früh folgende Einwände:

- Wellenpakete können keine halbwegs lokalisierten Teilchen repräsentieren, weil Wellenpakete in der Regel auseinander fließen.
- Die Wellen breiten sich im hochdimensionalen Konfigurationsraum aus, der nur im Fall **eines** Teilchens dreidimensional ist wie der Anschauungsraum.
- Es wird keine Wechselwirkung zwischen Teilen der angeblichen „Ladungswolken“ beobachtet.

Die SG der nichtrelativistischen Quantenfeldtheorie für das Schrödingerfeld arbeitet im 3-dimensionalen Raum, der tatsächlich als Anschauungsraum angesehen werden könnte. Sie kann die Basis einer korrekten Quantentheorie für nichtrelativistische Teilchen sein. Aber die ψ 's sind **Operatoren** und es führt ein weiter Weg von ihnen zu den Wahrscheinlichkeiten, ein Weg, der die Schulmöglichkeiten weit überschreitet.

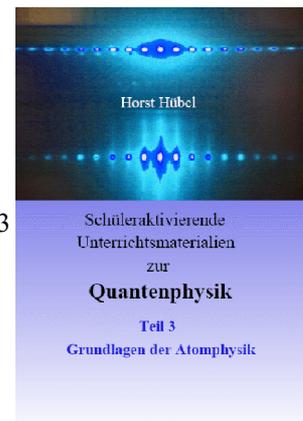
Bestenfalls die **SG der Quantenmechanik** kann - vereinfacht - Gegenstand der Schulphysik sein. Bei ihr beschreiben Wellenfunktionen nicht Teilchendichten oder Ladungswolken, sondern ausschließlich Wahrscheinlichkeiten für zukünftige Messergebnisse. (Und der Lehrer sollte im Gedächtnis behalten: Es handelt sich nicht um Wellen im Anschauungsraum, sondern nur in evtl. hochdimensionalen Konfigurationsräumen.)

VI Resümee

- Die Mathematik des eindimensionalen unendlichen Potenzialtopfes ist relativ einfach, die Physik dazu erfordert aber genauere Kenntnisse darüber, was man eigentlich dabei macht.
- Die „zeitunabhängige SG“ entsteht aus der SG durch Abseparieren des Zeitanteils, wenn ausschließlich stationäre Zustände mit einer bestimmter Gesamtenergie E gesucht werden. Sie stellt den Ortsanteil der Wellenfunktion dar.
- In Zuständen bestimmter Gesamtenergie haben E_{kin} und E_{pot} keinen physikalischen Sinn. Alle Argumentationen mit ihnen gehören ins Reich der Fantasie.
- Auch eine „Bewegung“ oder ein „Aufenthalt“ eines Teilchens an einem bestimmten Ort hat bei stationären Zuständen keinen physikalischen Sinn.
- Kein Argument verbietet den Nachweis eines Teilchens in einem Potenzialwall oder einer endlich hohen Potenzialwand.

- Für die Schule geeignete Lösungsmethoden sind verifizierte Ansätze, Tabellenkalkulation und bestimmte fertige PC-Programme, mit denen erlaubte E-Werte gesucht werden. Kriterium dafür sind Endlichkeit der Wellenfunktion (Quadratintegrabilität) und die Randbedingungen.
- Es werden eine Reihe von Unterrichtsmethoden empfohlen wie **Experten-Team-Verfahren**, **Lernen an Stationen**, Methode „**Sichere Leine**“, **Lernen durch Lehren** (Kurzreferate) und die **Fragebogenmethode** zu Interpretationsfragen. Zu all diesen Verfahren hat der Autor Unterrichtsmaterialien zur Verfügung gestellt:

Horst Hübel, Schüleraktivierende Unterrichtsmaterialien zur Quantenphysik Teil 3
Grundlagen der Atomphysik, BoD 2008, ISBN-13 978-3-8370-1321-4
- Bei aller relativen Einfachheit in der Schule möglicher Formalismen muss ein Staunen über die Mächtigkeit der SG mit/trotz ihrer Lösungsvielfalt verbleiben.



Diesen (ungefähren) Wortlaut des Vortrags, gehalten am 3.4.2008 auf der Seminarlehrertagung Physik an der Akademie für Lehrerfortbildung und Personalführung in Dillingen (und Vieles mehr) können Sie von meiner Homepage <http://www.forphys.de> herunterladen.