Übungen zur Quantenphysik – Lösungen Serie 12

1. *Freie Wahl des Nullniveaus: Klassische und Quantenmechanik im Vergleich*

   (a) Wir setzen die Wellenfunktion $\Psi_{\text{neu}}(x,t) = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi(x,t)$ in die modifizierte Schrödinger-Gleichung ein:
$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi_{\text{neu}}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{neu}}}{\partial x^2} + (V + V_0)\,\Psi_{\text{neu}}$$
In $\Psi_{\text{neu}} = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi$ sind beide Faktoren von der Zeit t, aber nur Ψ vom Ort x abhängig. Daraus folgt für die partiellen Ableitungen in dieser modifizierten Schrödinger-Gleichung:
$$\frac{\partial \Psi_{\text{neu}}}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}V_0}{\hbar}\, e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi + e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \left(-\frac{\mathrm{i}V_0}{\hbar}\,\Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)$$
$$\frac{\partial^2 \Psi_{\text{neu}}}{\partial x^2} = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$
Diese Ableitungen und $\Psi_{\text{neu}} = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi$ fügen wir in obige Gleichung ein:
$$\mathrm{i}\hbar \cdot e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \left(-\frac{\mathrm{i}V_0}{\hbar}\,\Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (V + V_0) \cdot e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi$$
Zunächst teilen wir diese Gleichung durch den Phasenfaktor $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$. Danach folgt weiter:
$$\Rightarrow \qquad \mathrm{i}\hbar \cdot \left(-\frac{\mathrm{i}V_0}{\hbar}\,\Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (V + V_0) \cdot \Psi \qquad |\,\text{ausmultiplizieren}$$
$$\Leftrightarrow \qquad V_0\,\Psi + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi + V_0\,\Psi \qquad |\,\text{ursprüngliche S.-Gl.}$$
$$\Rightarrow \qquad V_0\,\Psi = V_0\,\Psi \quad \checkmark$$
Dabei haben wir im letzten Schritt verwendet, dass Ψ Lösung der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung $\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$ ist.
Offensichtlich erfüllt $\Psi_{\text{neu}}(x,t)$ die mit V_0 modifizierte Schrödinger-Gleichung.

   (b) Der Wechsel des Nullniveaus der potentiellen Energie verändert also die Wellenfunktion, indem er ihr den Phasenfaktor $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ hinzufügt. Welche Konsequenzen ergeben sich daraus für die Erwartungswerte, die nun mit $\Psi_{\text{neu}}(x,t)$ anstelle von $\Psi(x,t)$ berechnet werden müssen?
Wir untersuchen:
$$\begin{aligned}\langle Q\rangle_{\text{neu}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\text{neu}}^* \widehat{Q}\,\Psi_{\text{neu}}\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi\right)^* \widehat{Q}\,\left(e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi\right) \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \Psi^* \cdot e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} \cdot \widehat{Q}\,\Psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \widehat{Q}\,\Psi\,\mathrm{d}x = \langle Q\rangle_{\text{bisher}}\end{aligned}$$
Dabei haben wir verwendet, dass der Operator $\widehat{Q}$ keine Ableitung nach der Zeit t enthält und somit der Phasenfaktor $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ als multiplikative Konstante vor den Operator genommen werden kann. Da $(e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar})^* = e^{\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$, kürzt sich der Phasenfaktor aus der Rechnung raus.
Damit haben wir nun aber gezeigt, dass so ein Phasenfaktor für die Berechnung des Erwartungswertes einer beliebigen Größe Q gar keine Rolle spielt.
Das bedeutet: Die Veränderung des Nullniveaus verändert in der Quantenmechanik zwar die Wellenfunktion – Hinzufügen eines Phasenfaktors $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ – aber diese Modifizierung hat keinen Einfluss auf die Erwartungswerte, die sich aus der Wellenfunktion ergeben. (Selbiges lässt sich übrigens auch für die konkreten Messwerte zeigen, die man bei der Messung der Größe Q im Zustand Ψ_{neu} erhalten könnte. Das erahnen wir an dieser Stelle, denn wenn der Mittelwert dieser Messwerte gleich bleibt, dann dürfte das eben daraus folgen, dass auch die Einzelwerte nach wie vor dieselben sind.)
Somit ist auch in der Quantenmechanik eine freie Wahl des Nullniveaus der potentiellen Energie gewährleistet.

2. *Spielereien rund um die Additionstheoreme und die Euler-Schreibweise für* $\sin x$ *und* $\cos x$

(a) Mit den Symmetrieeigenschaften $\cos(-\alpha) = \cos\alpha$ und $\sin(-\alpha) = -\sin\alpha$ folgt unmittelbar:

$$\sin(\alpha-\beta) = \sin\big(\alpha+(-\beta)\big) = \sin\alpha\cos(-\beta) + \cos\alpha\sin(-\beta) = \sin\alpha\cos\beta - \cos\alpha\sin\beta$$
$$\cos(\alpha-\beta) = \cos\big(\alpha+(-\beta)\big) = \cos\alpha\cos(-\beta) - \sin\alpha\sin(-\beta) = \cos\alpha\cos\beta + \sin\alpha\sin\beta$$

(b) Wir benutzen zuerst das Additionstheorem, dann die Doppelwinkelformel und zum Schluss dann den trigonometrischen Pythagoras, also dass $\cos^2 x = 1 - \sin^2$ ist:

$$\begin{aligned}\sin(3x) &= \sin(2x+x) = \sin(2x)\cos x + \cos(2x)\sin x\\ &= 2\sin x\cos x\cdot\cos x + \big(\cos^2 x - \sin^2 x\big)\cdot\sin x\\ &= 3\sin x\cos^2 x - \sin^3 x = 3\sin x\big(1-\sin^2 x\big) - \sin^3 x = 3\sin x - 4\sin^3 x\end{aligned}$$

Ganz analog gehen wir bei $\cos(3x)$ vor:

$$\begin{aligned}\cos(3x) &= \cos(2x+x) = \cos(2x)\cos x - \sin(2x)\sin x\\ &= (\cos^2 x - \sin^2 x)\cdot\cos x + 2\sin x\cos x\cdot\sin x\\ &= \cos^3 x - 3\sin^2 x\cos x = \cos^3 x - 3(1-\cos^2 x)\cos x = 4\cos^3 x - 3\cos x\end{aligned}$$

Von der Richtigkeit dieser Umformungen kann man sich in GeoGebra leicht überzeugen.

(c) Wir gehen fast genau gleich vor wie im gezeigten Beispiel:

$$\begin{aligned}\sin^2 x &= \left(\frac{e^{\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}}\right)^2 = \frac{e^{2\mathrm{i}x} - 2e^{\mathrm{i}x}e^{-\mathrm{i}x} + e^{-2\mathrm{i}x}}{-4} = \frac{e^{2\mathrm{i}x} - 2 + e^{-2\mathrm{i}x}}{-4}\\ &= \frac{2}{4} - \frac{1}{2}\,\frac{e^{2\mathrm{i}x}+e^{-2\mathrm{i}x}}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2x)\end{aligned}$$

(d) Wir wandeln in die Euler-Schreibweise um, multiplizieren geschickt aus, sortieren dann nach verschiedenen Potenzen von e und gruppieren neu, wobei wir das Ziel im Auge behalten:

$$\begin{aligned}\cos^2 x\sin x &= \left(\frac{e^{\mathrm{i}x}+e^{-\mathrm{i}x}}{2}\right)^2\cdot\frac{e^{\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}} = \frac{1}{8\mathrm{i}}\left(e^{\mathrm{i}x}+e^{-\mathrm{i}x}\right)\left(e^{\mathrm{i}x}+e^{-\mathrm{i}x}\right)\left(e^{\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}\right)\\ &= \frac{1}{8\mathrm{i}}\left(e^{\mathrm{i}x}+e^{-\mathrm{i}x}\right)\left(e^{2\mathrm{i}x}-e^{-2\mathrm{i}x}\right) = \frac{1}{8\mathrm{i}}\left(e^{3\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}+e^{\mathrm{i}x}-e^{-3\mathrm{i}x}\right)\\ &= \frac{1}{4}\left(\frac{e^{3\mathrm{i}x}-e^{-3\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}} + \frac{e^{\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}}\right) = \frac{1}{4}\big(\sin(3x)+\sin x\big)\end{aligned}$$

N.B.: Von der ersten zur zweiten Zeile haben wir die dritte binomische Formel verwendet.

(e) Zunächst multiplizieren wir $\cos^3 x$ in der Euler-Schreibweise aus. Dabei verwenden wir die dritte Zeile des Pascal'schen Dreiecks, resp. dass $(a+b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3$ ist:

$$\cos^3 x = \left(\frac{e^{\mathrm{i}x}+e^{-\mathrm{i}x}}{2}\right)^3 = \frac{1}{8}\left(e^{3\mathrm{i}x} + 3e^{\mathrm{i}x} + 3e^{-\mathrm{i}x} + e^{-3\mathrm{i}x}\right)$$

Das lässt sich leicht ableiten:

$$\big[\cos^3 x\big]' = \frac{1}{8}\left(3\mathrm{i}e^{3\mathrm{i}x} + 3\mathrm{i}e^{\mathrm{i}x} - 3\mathrm{i}e^{-\mathrm{i}x} - 3\mathrm{i}e^{-3\mathrm{i}x}\right)$$

Nun sortieren wir die Terme in der Klammer so, dass sich zwei Sinusfunktionen ergeben:

$$\begin{aligned}\big[\cos^3 x\big]' &= \frac{3\mathrm{i}}{8}\left(e^{3\mathrm{i}x}-e^{-3\mathrm{i}x}+e^{\mathrm{i}x}-e^{-\mathrm{i}x}\right) = \frac{3\mathrm{i}}{8}\left(2\mathrm{i}\sin(3x) + 2\mathrm{i}\sin x\right)\\ &= -\frac{3}{4}\big(\sin(3x)+\sin x\big) = -3\cos^2 x\sin x\end{aligned}$$

Beim letzten Schritt haben wir die Identität aus (d) benutzt: $\cos^2 x\sin x = \frac{1}{4}(\sin(3x)+\sin x)$.

(f) Zunächst die Variante mit den Additionstheoremen, die uns ungeheuer direkt zum Ziel führt und einmal mehr aufzeigt, wie nützlich diese Gleichungen sind:

$$\begin{aligned} f(x) &= A \cdot \sin\big(k(x-x_0)\big) \\ &= A \cdot \sin(kx - kx_0) = A \cdot \big(\sin(kx)\cos(kx_0) - \cos(kx)\sin(kx_0)\big) \\ &= \underbrace{A\cos(k_0)}_{=B} \cdot \sin(kx) \underbrace{-A\sin(k_0)}_{=C} \cdot \cos(kx) \end{aligned}$$

Die beiden Koeffizienten sind also durch $B = A\cos(k_0)$ und $C = -A\sin(k_0)$ gegeben.
Das wollen wir jetzt noch mit der Euler-Schreibweise zeigen – und dabei nochmals etwas Neues lernen. Zunächst notieren wir beide Schreibweisen in Euler-Schreibweise und stellen geschickt um:

$$\begin{aligned} f(x) = A \cdot \sin\big(k(x-x_0)\big) &= A \cdot \frac{e^{\mathrm{i}k(x-x_0)} - e^{-\mathrm{i}k(x-x_0)}}{2\mathrm{i}} \\ &= \frac{A}{2\mathrm{i}}\left(e^{\mathrm{i}kx}e^{-\mathrm{i}kx_0} - e^{-\mathrm{i}kx}e^{\mathrm{i}kx_0}\right) = \frac{Ae^{-\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}}\,e^{\mathrm{i}kx} - \frac{Ae^{\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}}\,e^{-\mathrm{i}kx} \end{aligned}$$

Wir erkennen an dieser Stelle, dass wir für den Raum aller Sinusfunktionen mit Mittelhöhe $y = 0$ und Periode T noch eine weitere Basis gefunden haben. Die beiden Funktionen $e^{\mathrm{i}kx}$ und $e^{-\mathrm{i}kx}$ spannen diesen Raum ebenfalls auf, allerdings sind das nun ja komplexe Funktionen. Dem entsprechend können auch die beiden Koeffizienten komplex sein. Werden die Koeffizienten so gewählt wie oben, so entsteht im Reellen eine Sinusfunktion – in die wir nun natürlich auch komplexe Zahlen einsetzen dürften.
Formulieren wir nun auch die Zielfunktion in dieser Basis:

$$\begin{aligned} f(x) = B \cdot \sin(kx) + C \cdot \cos(kx) &= B \cdot \frac{e^{\mathrm{i}kx} - e^{-\mathrm{i}kx}}{2\mathrm{i}} + C \cdot \frac{e^{\mathrm{i}kx} + e^{-\mathrm{i}kx}}{2} \\ &= \left(\frac{B}{2\mathrm{i}} + \frac{C}{2}\right)e^{\mathrm{i}kx} + \left(-\frac{B}{2\mathrm{i}} + \frac{C}{2}\right)e^{-\mathrm{i}kx} \end{aligned}$$

Auch hier haben wir entdeckt, dass die Funktion $f(x)$ eine Linearkombination der beiden Basisfunktionen $e^{\mathrm{i}kx}$ und $e^{-\mathrm{i}kx}$ ist. Wenn die beiden Funktionen übereinstimmen sollen, dann müssen die Koeffizienten gleich sein. Aus dieser Überlegung erhalten wir ein Gleichungssystem mit zwei Gleichungen für die beiden Koeffizienten B und C:

$$\left| \begin{array}{rcl} \frac{B}{2\mathrm{i}} + \frac{C}{2} &=& \frac{Ae^{-\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}} \\ -\frac{B}{2\mathrm{i}} + \frac{C}{2} &=& -\frac{Ae^{\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}} \end{array} \right| \begin{array}{l} ① \\ ② \end{array}$$

$$① + ② : \quad C = A \cdot \frac{e^{-\mathrm{i}kx_0} - e^{\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}} = -A \cdot \frac{e^{\mathrm{i}kx_0} - e^{-\mathrm{i}kx_0}}{2\mathrm{i}} = -A \cdot \sin(k_0 x)$$

$$\mathrm{i} \cdot ① - \mathrm{i} \cdot ② : \quad B = A \cdot \frac{e^{-\mathrm{i}kx_0} + e^{\mathrm{i}kx_0}}{2} = -A \cdot \frac{e^{\mathrm{i}kx_0} + e^{-\mathrm{i}kx_0}}{2} = A \cdot \cos(k_0 x)$$

Damit haben wir effektiv das gleiche Resultat erhalten wie oben mit den Additionstheoremen.

3. *Der Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators*

(a) Für die Normierung benötigen wir das Betragsquadrat der Wellenfunktion:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)-\mathrm{i}t]} \cdot A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]} = A^2\,e^{-2amx^2/\hbar}$$

Damit folgt für das Integral über die gesamte Ortsachse, das die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 ergeben muss:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \overset{\text{i.}}{=} 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \\ &\overset{\text{ii.}}{=} 2A^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2am}} \int_0^{\infty} e^{-s^2}\,\mathrm{d}s \overset{\text{iii.}}{=} 2A^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2am}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\ &= A^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}} \overset{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}}\end{aligned}$$

Überlegungen zu einzelnen Schritten

i. Achsensymmetrie des Integranden $e^{-2amx^2/\hbar}$.

ii. Lin. Subst.: $s = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}}\,x$, sodass $s^2 = \frac{2amx^2}{\hbar}$. Vor dem Integral entsteht der Faktor $\sqrt{\frac{\hbar}{2am}}$.

iii. Ausnutzung des Gauss'schen Integrals $\int_0^{\infty} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ und ihr Betragsquadrat $|\Psi(x,t)|^2$ lauten somit:

$$\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]} \qquad \text{und} \qquad |\Psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot e^{-2amx^2/\hbar}$$

Den Graphen von $|\Psi|^2$ kennen wir bereits. Es handelt sich um die **Gauss'sche Glockenkurve**.

(b) Für das Einsetzen von $\Psi(x,t)$ in die Schrödinger-Gleichung dient es der Übersichtlichkeit, die partiellen Ableitung bereits vorher zu erledigen. Da sich die unter (a) ermittelte Normierungskonstante A beim späteren Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ohnehin wegkürzen muss, brauchen wir sie nicht auszuschreiben:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right) = -\mathrm{i}a \cdot A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]} = -\mathrm{i}a\,\Psi$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{2amx}{\hbar} \cdot A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right) \\ &= -\frac{2Aam}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left(x\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right) \\ &= -\frac{2Aam}{\hbar}\left[e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]} + x \cdot \left(-\frac{2amx}{\hbar}\right) e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right] \\ &= \frac{2am}{\hbar}\left(\frac{2am}{\hbar}x^2 - 1\right) \cdot A\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(2a^2mx^2 - a\hbar\right)\Psi\end{aligned}$$

Mit diesen Ableitungen gehen wir in die Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} & & \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi & &|\,\text{Ableitungen einsetzen} \\ &\Rightarrow & \mathrm{i}\hbar \cdot (-\mathrm{i}a)\,\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{2m}{\hbar^2}\left(2a^2mx^2 - a\hbar\right)\Psi + V\Psi & &|\,\text{zusammenfassen und } : \Psi \\ &\Leftrightarrow & a\hbar &= a\hbar - 2a^2mx^2 + V & &|\,-a\hbar + 2a^2mx^2 \\ &\Leftrightarrow & 2a^2mx^2 &= V & & \end{aligned}$$

Damit haben wir ein quadratisch vom Ort x abhängiges Potenzial erhalten (keine Zeitabhängigkeit):

$$V(x) = 2ma^2x^2$$

Dies ist das Potenzial des harmonischen Oszillators, das in der klassischen Mechanik beispielsweise einem Federpendel zugrunde liegt. Mit $\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}$ kennen wir nun bereits eine Lösung der Schrödinger-Gleichung zu diesem Potenzial. Wie wir bald sehen werden, ist es nicht die einzige.

(c) Es folgen vier Erwartungswertberechnungen. Dabei lohnt es sich Symmetrien auszunutzen:

$$\begin{array}{rl} x & \text{ist ungerade resp. punktsymmetrisch} \\ x^2 & \text{ist gerade resp. achsensymmetrisch} \\ e^{-2amx^2/\hbar} & \text{ist gerade resp. achsensymmetrisch} \\ \Rightarrow \quad x\,e^{-2amx^2/\hbar} & \text{ist ungerade resp. punktsymmetrisch} \\ \Rightarrow \quad x^2\,e^{-2amx^2/\hbar} & \text{ist gerade resp. achsensymmetrisch} \end{array}$$

Die Integrale von $-\infty$ bis $+\infty$ über ungerade Funktionen ergeben sowieso Null. Das kommt hier zweimal vor. Die anderen beiden Erwartungswertberechnungen sind etwas langwieriger:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi|^2\,\mathrm{d}x = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x\,e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x = 0$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\Psi|^2\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}}\,e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \\ &= 2 \cdot \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot \int_0^{\infty} x^2\,e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \\ &= 2 \cdot \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2am}} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\hbar}{2am}\,s^2\,e^{-s^2}\,\mathrm{d}x \\ &= 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\hbar}{2am} \cdot \int_0^{\infty} s^2 e^{-s^2}\,\mathrm{d}s \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\hbar}{am} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{4} = \frac{\hbar}{4am} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \Psi\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{A^2\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a[(mx^2/\hbar)-\mathrm{i}t]} \cdot \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right)\mathrm{d}x \\ &= \frac{A^2\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a[(mx^2/\hbar)-\mathrm{i}t]} \cdot \left(-\frac{2am}{\hbar}\right) \cdot x\,e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\,\mathrm{d}x \\ &= -\frac{2A^2am}{\mathrm{i}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} x\,e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x = 0 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\langle p^2\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{A^2\hbar^2}{\mathrm{i}^2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a[(mx^2/\hbar)-\mathrm{i}t]} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\right) \mathrm{d}x \\
&= -A^2\hbar^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a[(mx^2/\hbar)-\mathrm{i}t]} \cdot \frac{2am}{\hbar}\left(\frac{2am}{\hbar}x^2-1\right)\cdot e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}\,\mathrm{d}x \\
&= -2A^2am\hbar \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2am}{\hbar}x^2-1\right)\cdot e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \\
&= -4A^2am\hbar \cdot \int_{0}^{\infty} \left(\frac{2am}{\hbar}x^2-1\right)\cdot e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x \\
&= -4am\hbar \cdot \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot \left(\frac{2am}{\hbar}\cdot\int_0^\infty x^2\, e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x - \int_0^\infty e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x\right) \\
&= -4am\hbar \cdot \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot \left(\frac{2am}{\hbar}\cdot\sqrt{\frac{\hbar}{2am}}\cdot\int_0^\infty \frac{\hbar}{2am}\cdot s^2\, e^{-s^2}\,\mathrm{d}s - \sqrt{\frac{\hbar}{2am}}\cdot\int_0^\infty e^{-s^2}\,\mathrm{d}s\right) \\
&= -4am\hbar \cdot \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2am}} \cdot \left(\int_0^\infty s^2\, e^{-s^2}\,\mathrm{d}s - \int_0^\infty e^{-s^2}\,\mathrm{d}s\right) \\
&= -\frac{4am\hbar}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4} - \frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) = 4am\hbar \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4}\right) = am\hbar
\end{aligned}
$$

(d) Mit den Resultaten aus (c) berechnen wir die Standardabweichungen von Ort und Impuls:

$$
\begin{aligned}
\sigma_x &= \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{4am} - 0} = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \\
\sigma_p &= \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{am\hbar - 0} = \sqrt{am\hbar}
\end{aligned}
$$

Daraus ergibt sich für das Produkt der beiden Standardabweichungen:

$$
\sigma_x\sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \cdot \sqrt{am\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}\cdot am\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4}} = \frac{\hbar}{2}
$$

Somit erfüllt die Wellenfunktion $\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}}\, e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}$ die **Heisenberg'sche Unschärferelation** $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ gerade noch.

(e) Wir nutzen aus, dass $\widehat{H}\,\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$ gerade der rechten Seite der Schrödinger-Gleichung entspricht:

$$
\widehat{H}\,\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi \overset{!}{=} \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar\cdot(-\mathrm{i}a\,\Psi) = a\hbar\,\Psi
$$

Damit folgt für den Erwartungswert der Gesamtenergie:

$$
\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\,\widehat{H}\,\Psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\,a\hbar\,\Psi\,\mathrm{d}x = a\hbar\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\,\Psi\,\mathrm{d}x = a\hbar
$$

Zu Beginn der Aufgabe wurde gesagt, dass $\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}}\, e^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}$ den Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beschreibt. Das bedeutet, es gibt offenbar auch angeregte Zustände eines solchen Oszillators. Der energetisch tiefste Zustand, also eben der Grundzustand, hat aber offensichtlich nicht die Gesamtenergie 0. Auch wenn wir einen solchen Oszillator so weit wie nur möglich abkühlen, enthält er Energie – er steht also quasi nie ganz still.

Da $\widehat{H}^2$ einfach für die doppelte Anwendung des Hamiltonoperators steht, finden wir sehr zügig:

$$\widehat{H}^2 = \widehat{H}\left(\widehat{H}\,\Psi\right) = \widehat{H}\,(a\hbar\;\Psi) = a\hbar\,\widehat{H}\,\Psi = a^2\hbar^2\;\Psi$$

$$\Rightarrow\quad \langle E^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\widehat{H}^2\,\Psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\,a^2\hbar^2\;\Psi\,\mathrm{d}x = a^2\hbar^2\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\,\Psi\,\mathrm{d}x = a^2\hbar^2$$

Somit folgt für die Standardabweichung der Energie:

$$\sigma_E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2} = \sqrt{a^2\hbar^2 - (a\hbar)^2} = 0$$

Es gibt also keine Streuung der Energiewerte! Befindet sich der quantenmechanische Oszillator in seinem Grundzustand, so wird eine Messung der Gesamtenergie stets den Wert $a\hbar$ liefern.

Es gibt also Zustände, die den Wert bestimmter Größen eindeutig festlegen! Das wollen wir hier abschließend mitnehmen.