

Übungen zur Quantenphysik – Lösungen Serie 13

1. Zum mathematischen Verständnis separierbarer Lösungen

- (a) Beim Lösen der Schrödinger-Gleichung (resp. allg. bei der Lösung einer partiellen Differentialgleichung) ist die Variablenseparation

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \varphi(t)$$

ein sinnvoller Lösungsansatz. Die Idee ist, die von den beiden Variablen x und t abhängige Funktion $\Psi(x, t)$ in ein Produkt aus einer nur vom Ort x abhängigen Funktion $\psi(x)$ und einer nur von der Zeit t abhängigen Funktion $\varphi(t)$ zu zerlegen.

Im Falle eines nur vom Ort abhängigen Potentials $V(x)$ gelingt diese Variablenseparation. Aus der Schrödinger-Gleichung folgt dann eine gewöhnliche Differentialgleichung für $\varphi(t)$ und die sogenannte zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für $\psi(x)$. Die so erhaltenen Lösungen der Form $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$ werden **separierbare Lösungen** genannt.

- (b) Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ hängt vom Ort x und von der Zeit t ab, also von zwei Variablen. Eine Ableitung kann sich nur auf x oder t , also nur auf einen Teil der Variablen beziehen. Daher sprechen wir von einer **partiellen Ableitung** und zur Kennzeichnung schreiben wir dafür $\frac{\partial}{\partial x}$ resp. $\frac{\partial}{\partial t}$.

Im Gegensatz dazu hängen die beiden Funktionen $\psi(x)$ und $\varphi(t)$ nur noch je von einer Variable ab. Daher ist beim Ableiten von vornherein klar, nach welcher Variable denn differenziert wird und wir verwenden die gewöhnliche Notation $\frac{d}{dx}$ resp. $\frac{d}{dt}$.

Die Schrödinger-Gleichung ist eine **partielle Differentialgleichung** für die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$. Das bedeutet, diese Gleichung stellt eine Verbindung zwischen der Funktion und ihren verschiedenen partiellen Ableitungen von $\Psi(x, t)$ her.

Anders bei der Zeitgleichung und der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, die **gewöhnliche Differentialgleichungen** für $\psi(x)$ resp. $\varphi(t)$ sind.

- (c) Ist das Potenzial $V(x)$ nur vom Ort abhängig, so ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung mittels Variablenseparation $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$ die folgende Gleichung:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V$$

In dieser Gleichung ist die linke Seite nur von der Zeit t , die rechte hingegen ausschließlich vom Ort x abhängig. Beide Variablen können aber völlig unabhängig voneinander verändert werden, denn die Wellenfunktion hat an jedem Ort x zu jedem beliebigen Zeitpunkt t einen bestimmten Wert. Es gibt keine Einschränkungen für x oder t . Dann kann diese Gleichung aber nur dann richtig sein, wenn beide Gleichungsseiten gleich ein- und derselben Konstante sind, die wir eben als **Separationskonstante** bezeichnen und die wir im Falle der Schrödinger-Gleichung mit dem Buchstaben E notieren.

- (d) Die Zeitgleichung ist die für eine Exponentialfunktion typische Differentialgleichung, in der die Ableitung der Funktion proportional zur Funktion selber ist. Es ist also zu erwarten, dass $\varphi(t) = A e^{-iEt/\hbar}$ die Differentialgleichung erfüllt:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{d}{dt} \left(A \cdot e^{-iEt/\hbar} \right) = -\frac{iE}{\hbar} \cdot e^{-iEt/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi$$

Nun ist $\varphi(t)$ ja nur ein Faktor der gesamten separierbaren Lösung $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$. Eine solche Lösung muss aber insgesamt normiert werden. D.h., es braucht nur eine Normierung für $\Psi(x, t)$ und nicht je eine für $\psi(x)$ und $\varphi(t)$. D.h., es ist an dieser Stelle nicht nötig sich um die Normierung von $\varphi(t)$ und damit um eine Festlegung von A zu bemühen.

Die Sache ist sogar noch besser, denn $|e^{-iEt/\hbar}| = 1$ für alle Zeiten t . D.h., wenn wir die Zeitfunktion durch $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ definieren, spielt sie bei der Normierung von $\Psi(x, t)$ gar keine Rolle. Die Normierung kann dann direkt mit dem ortsabhängigen Teil $\psi(x)$ vorgenommen werden.

2. Zum Verständnis stationärer Zustände

- (a) Die separierbaren Lösungen der Schrödinger-Gleichungen haben die Eigenschaft, dass die Erwartungswerte beliebiger Größen Q konstant bleiben, also stationär sind. Daher werden diese Lösungen auch als **stationäre Zustände** bezeichnet.

Diese Unveränderlichkeit der Erwartungswerte können wir leicht verifizieren:

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* e^{iEt/\hbar} \hat{Q} \left(\psi(x) e^{-iEt/\hbar} \right) dx \\ &= e^{iEt/\hbar} e^{-iEt/\hbar} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi(x) \, dx\end{aligned}$$

Dabei dürfen die zeitabhängigen Exponentialterme vor das Integral gezogen werden, weil erstens der Operator \hat{Q} keine Ableitung nach der Zeit enthält und zweitens über den Ort integriert wird. In beiden Fällen sind diese Exponentialterme nur multiplikative Konstanten.

- (b) Ein Teilchen befinde sich im stationären Zustand $\Psi_n(x, t)$. Was stimmt, was nicht? Weshalb?
- Dieser stationäre Zustand entspricht einer separierbaren Lösung der Schrödinger-Gleichung und weist eine ganz bestimmte Gesamtenergie E auf.
Stimmt! Stationär zu sein ist ja gerade das, was eine separierbare Lösung der Schrödinger-Gleichung auszeichnet. Die zugehörige Gesamtenergie entspricht der Separationskonstante.
 - Die Erwartungswerte aller physikalischen Größen sind zeitlich konstant.
Stimmt! Das gilt weil sich das Teilchen in einem reinen stationären Zustand befindet. Allgemein würden sich die verschiedenen Erwartungswerte mit der Zeit schon verändern.
 - Messe ich den Ort x des Teilchens, so ergibt sich ein ganz bestimmter Wert x_n , der durch den Erwartungswert $\langle x \rangle$ vorausgesagt wird.
Falsch! Den Ort eines Teilchens kennen wir nicht genau. Er bleibt bis zur Messung unbestimmt und es gibt aufgrund der Heisenberg'schen Unschärferelation stets eine Streuung.
 - Messe ich die Gesamtenergie E des Teilchens, so ergibt sich ein ganz bestimmter Wert E_n , der durch den Erwartungswert $\langle E \rangle$ vorausgesagt wird.
Stimmt! Der stationäre Zustand gibt seine Gesamtenergie ganz genau vor. Die Streuung beträgt 0. Jede Messung der Gesamtenergie muss genau diesen E -Wert ergeben.
 - Ist $\Psi(x, t)$ eine Linearkombination mehrerer stationärer Zustände, so sind alle aus $\Psi(x, t)$ berechneten Erwartungswerte zeitlich konstant.
Falsch! Das ist ja genau der Punkt: Befindet sich ein Teilchen in einem reinen stationären Zustand, so sind alle Erwartungswerte konstant. Bei einer Linearkombination mehrerer stationärer Zustände hingegen sind die Erwartungswerte zeitabhängig.

3. Allgemeines zu Linearkombinationen separierbarer Lösungen

- (a) Wir können die Linearkombination in die linke Seite der Schrödinger-Gleichung einsetzen und dann zeigen, dass aufgrund der Tatsache, dass $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$ die Schrödinger-Gleichung erfüllen, nun auch für $\Psi(x, t)$ die rechte Seite der Schrödinger-Gleichung entsteht. Dabei benutzen wir die Ableitungsregel für Funktionssummen ($[f + g]' = f' + g'$):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2)}{\partial t} = c_1 i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + c_2 i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \\ &= c_1 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + V \Psi_1 \right) - c_2 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + V \Psi_2 \right) \\ &= -c_1 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - c_2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + c_1 V \Psi_1 + c_2 V \Psi_2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2)}{\partial x^2} + V(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

- (b) Das Ortsintegral über das Betragsquadrat der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ muss 1 ergeben. Dank der Orthonormalität der $\Psi_n(x, t)$ kann dieses Integral gut vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{m \in \mathbb{N}} c_m^* \Psi_m^* \right) \left(\sum_{n \in \mathbb{N}} c_n \Psi_n \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^* + \dots)(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (c_1^* c_1 \Psi_1^* \Psi_1 + c_2^* c_2 \Psi_2^* \Psi_2 + \dots) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{n \in \mathbb{N}} c_n^* c_n \Psi_n^* \Psi_n \right) dx \end{aligned}$$

An dieser Stelle bemerken wir, dass das Integral über jeden einzelnen der unendlich vielen Terme der Form $c_m^* c_n \Psi_m^* \Psi_n$ den Wert 0 hat, wegen der Orthonormalität der $\Psi_n(x, t)$. Die c_m^* und c_n sind dabei nur multiplikative Konstanten. Genau deshalb vereinfacht sich das Integral von der zweiten zur dritten Zeile oben so drastisch.

Nun setzen wir fort, indem wir die Summe vor das Integral ziehen (Summenregel für Integrale). auch die $c_n^* c_n$ können als multiplikative Konstanten vor das Integral genommen werden:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_{n \in \mathbb{N}} \left(c_n^* c_n \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx}_{=1} \right) = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n^* c_n = \sum_{n \in \mathbb{N}} |c_n|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Somit haben wir eine Bedingung für die (komplexen) Koeffizienten c_n erhalten:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + \dots \stackrel{!}{=} 1$$

- (c) Wie wir nun erfahren haben, muss gelten:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

Da c_1 und c_2 positiv und reell sein sollen, können wir die Betragsstriche weglassen. Wir setzen $c = c_1 = c_2$, denn $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$ sollen gleich stark in der Linearkombination vertreten sein. Es folgt:

$$c^2 + c^2 = 2c^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad c^2 = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad c = c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

4. Die Linearkombination bewegt das Teilchen!

(a) Wir berechnen Schritt für Schritt ($c_1, c_2, \psi_1(x), \psi_2(x) \in \mathbb{R}$):

$$\begin{aligned}
 |\Psi(x, t)|^2 &= \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \left(c_1 \psi_1 e^{iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{iE_2 t/\hbar} \right) \left(c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \\
 &= c_1^2 \psi_1^2 e^{iE_1 t/\hbar} e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2^2 \psi_2^2 e^{iE_2 t/\hbar} e^{-iE_2 t/\hbar} \\
 &\quad + c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 e^{iE_1 t/\hbar} e^{-iE_2 t/\hbar} + c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 e^{iE_2 t/\hbar} e^{-iE_1 t/\hbar} \\
 &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \left(e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right) \\
 &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \left(e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right) \\
 &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + 2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right)
 \end{aligned}$$

Neben den konstanten Gliedern $c_1^2 \psi_1^2$ und $c_2^2 \psi_2^2$ gibt es in der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|^2$ auch einen Anteil $2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right)$, der in Abhängigkeit von der Zeit t sinusförmig hin und her schwingt. Dabei beträgt die Kreisfrequenz $\frac{E_2 - E_1}{\hbar}$.

(b) Mit den Angaben zum Grundzustand und zum ersten angeregten Zustand schreiben wir direkt für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Linearkombination ($c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$):

$$\begin{aligned}
 |\Psi(x, t)|^2 &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + 2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \\
 &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}\right)^2 \\
 &\quad + 2 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \cos\left(\frac{3\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{2} t\right) \\
 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{2m\omega}{\hbar} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} + \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cos\left(\frac{\hbar\omega}{\hbar} t\right) \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \cos(\omega t)\right)
 \end{aligned}$$

Das sieht recht kompliziert aus, auch wenn wir es mit einer ziemlich einfachen Linearkombination zu tun haben.

(c) Für die Eingabe in GeoGebra folgt man am besten den Hinweisen im Aufgabentext, denn es sind ja alle drei Wahrscheinlichkeitsdichten $|\Psi_1(x, t)|^2$, $|\Psi_2(x, t)|^2$ und $|\Psi(x, t)|^2$ einzutragen. D.h., wir setzen $m = \omega = \hbar = 1$ und definieren $A = \sqrt{\frac{1}{\pi}}$, um dann relativ simpel ψ_1 und ψ_2 einzugeben. Danach sind die Eingaben von ψ_1^2 , ψ_2^2 und

$$|\Psi(x, t)|^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 + \psi_1 \psi_2 \cos(t)$$

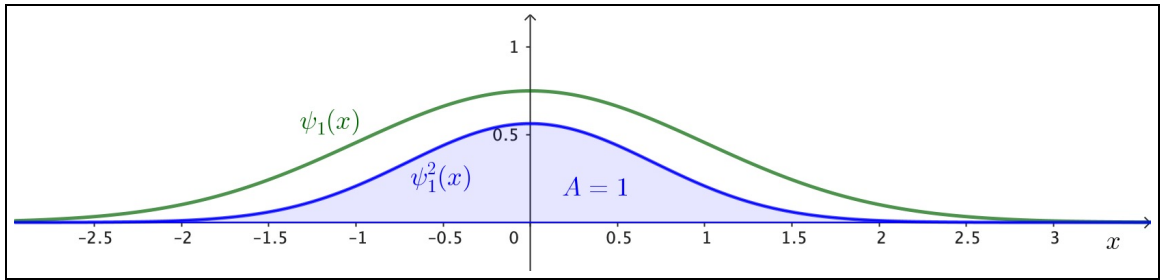
nicht mehr schwierig.

Auf der nächsten Seite sehen wir die grafischen Resultate. Auch die Betrachtung von $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ ist interessant, wir sehen eine gerade und eine ungerade Funktion und, die auch negative Werte annehmen dürfen.

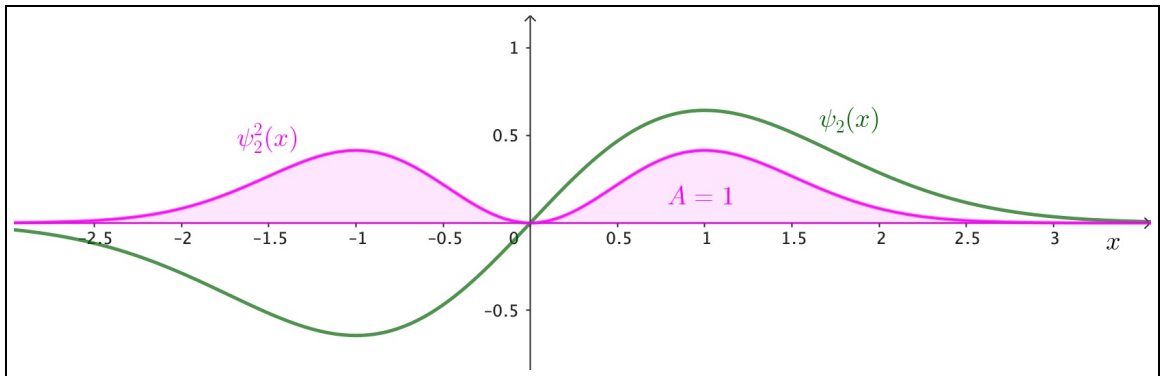
Besonders interessant sind dann aber $\psi_1^2(x)$, $\psi_2^2(x)$ und $|\Psi(x, t)|^2$. Deren Richtigkeit können wir zunächst überprüfen, indem wir z.B. von -100 bis 100 über jede dieser Wahrscheinlichkeitsdichten integrieren. Diese Integrale müssen alle den (minimalst gerundeten) Wert 1 aufweisen.

Lassen wir die Zeit laufen, so sehen wir die Verschiebung der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|$. Auch der quantenmechanische harmonische Oszillator kann also "schwingen".

Als Erstes sehen wir hier die örtliche Wellenfunktion $\psi_1(x)$ und ihr Quadrat $\psi_1^2(x)$, also die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte mit Gesamtfläche 1 unter dem Graphen:



Dasselbe sehen wir hier für die örtliche Wellenfunktion $\psi_2(x)$ und Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi_2^2(x)$. Auch hier beträgt die Gesamtfläche unter dem Graphen 1:



Und schließlich die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|^2$ der Linearkombination aus $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$ zu verschiedenen Zeitpunkten t . Die Gesamtwahrscheinlichkeit beträgt stets 1 1:

