Übungen zur Quantenphysik – Lösungen Serie 14

1. *Ein paar mathematische Ergänzungen zur Theorie des unendlich tiefen Potenzialtopfs*

   (a) Ich führe zuerst die Normierung in möglichst kleinen Einzelschritten durch und beantworte danach die Fragen dazu.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi_n(x,t)|^2\,\mathrm{d}x &= \int_0^a |\,\Psi_n(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = \int_0^a \Psi_n^*(x,t)\,\Psi_n(x,t)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_0^a \psi_n^*(x)\,e^{\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,\psi_n(x)\,e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,\mathrm{d}x = \int_0^a \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_0^a A_n\,\sin(k_n x)\cdot A_n\,\sin(k_n x)\,\mathrm{d}x \qquad \text{mit} \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{und} \quad n\in\mathbb{N} \\ &= A_n^2 \int_0^a \sin^2(k_n x)\,\mathrm{d}x = A_n^2 \int_0^a \sin^2\Big(\frac{\pi n}{a}\,x\Big)\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

   Ein solches Integral wird in dieser Übungsserie noch einige Male auftreten. Ich berechne es hier deshalb separat:

$$\begin{aligned}\int_0^a \sin^2\Big(\frac{n\pi}{a}\,x\Big)\,\mathrm{d}x &= \frac{a}{n\pi}\cdot\int_0^{n\pi}\sin^2 s\,\mathrm{d}s \\ &= \frac{a}{n\pi}\cdot\int_0^{n\pi}\Big(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos(2s)\Big)\,\mathrm{d}s \\ &= \frac{a}{2n\pi}\cdot\Big(\int_0^{n\pi}\mathrm{d}s - \int_0^{n\pi}\cos(2s)\,\mathrm{d}s\Big) \\ &= \frac{a}{2n\pi}\cdot\Big(s\,\Big|_0^{n\pi} - \frac{1}{2}\cdot\int_0^{2n\pi}\cos t\,\mathrm{d}t\Big) \\ &= \frac{a}{2n\pi}\cdot\Big(n\pi - 0 - \frac{1}{2}\cdot\sin t\,\Big|_0^{2n\pi}\Big) \\ &= \frac{a}{2n\pi}\cdot\Big(n\pi - \frac{1}{2}\big(\sin(2n\pi)-\sin 0\big)\Big) \\ &= \frac{a}{2n\pi}\cdot\Big(n\pi - \frac{1}{2}\,(0-0)\Big) = \frac{a}{2n\pi}\cdot n\pi = \frac{a}{2}\end{aligned}$$

   Dabei habe ich zweimal linear substituiert ($s = \frac{n\pi}{a}\,x$ und $t = 2s$), verwendet, dass $\sin^2\alpha = \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos(2\alpha)$ ist, und schließlich erkannt, dass $\sin(2n\pi) = 0$ ist für alle $n\in\mathbb{Z}$, denn $2n\pi$ ist das $2n$-fache von π und $\sin x$ nimmt bei allen ganzzahligen Vielfachen von π den Wert 0 an.
   Jetzt können wir die anfangs begonnene Rechnung fortsetzen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi_n(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = A_n^2\int_0^a \sin^2\Big(\frac{\pi n}{a}\,x\Big)\,\mathrm{d}x = A_n^2\cdot\frac{a}{2} \overset{!}{=} 1 \quad\Rightarrow\quad A_n^2 = \frac{2}{a} \quad\Rightarrow\quad A_n = \sqrt{\frac{a}{2}}$$

   Schließlich zu den drei zusätzlichen Fragen:

   i. **Frage:** *Weshalb integriert Griffiths nur von 0 bis a und nicht von $-\infty$ bis $+\infty$, wie das bei unseren bisherigen Normierungsrechnungen üblich war?*

      Antwort: Um sich außerhalb des unendlich tiefen Potenzialtopfs befinden zu können, müsste die Energie des Teilchens unendlich groß sein. Dies gilt auch in der Quantenmechanik. Da dies nicht möglich ist, kann das Teilchen nicht in die Außenbereiche eindringen und die Wellenfunktion muss dort somit den Wert 0 aufweisen. Das bedeutet aber sofort, dass das Integral über $|\,\Psi(x,t)|^2$ nur im Bereich von $x = 0$ bis $x = a$ einen Beitrag liefert. Wir brauchen somit nur über dieses Intervall zu integrieren.

ii. **Frage:** *Weshalb wird nur noch über das Betragsquadrat der örtlichen Wellenfunktion $\psi_n(x)$ integriert und nicht über dasjenige der eigentlichen Wellenfunktion $\Psi_n(x,t)$?*

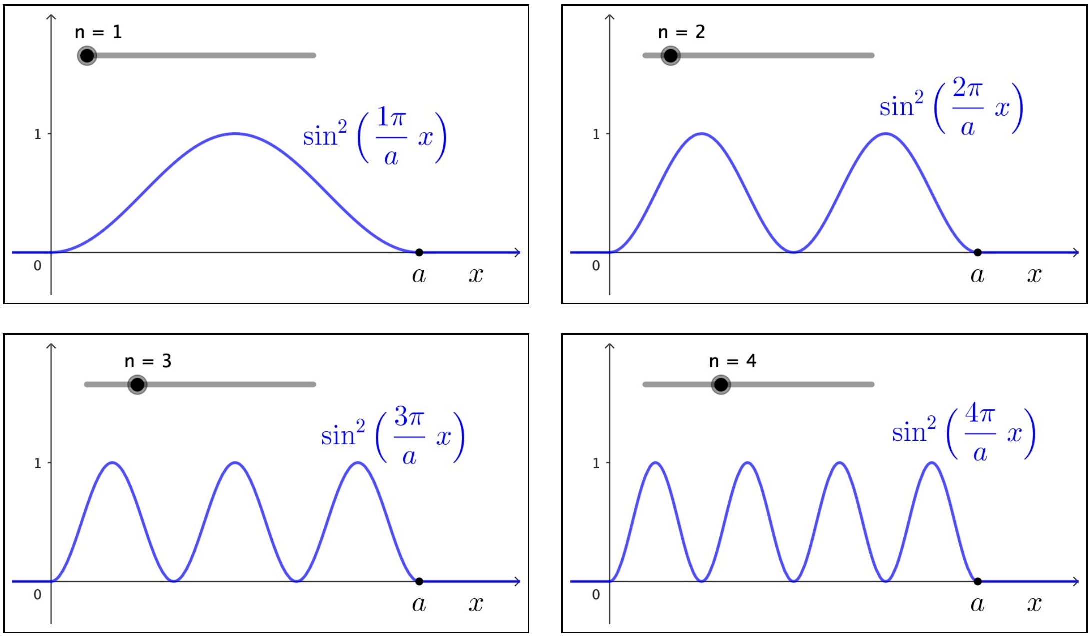
Antwort: Da wir über die Wahrscheinlichkeitsdichte stationärer Zustände integrieren, gilt:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left|\psi_n(x)\, e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\right|^2 = \psi_n^*(x)\, e^{\mathrm{i}E_n t/\hbar} \cdot \psi_n(x)\, e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} = \psi_n^*(x)\, \psi_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

Bei stationären Zuständen ist also die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi_n(x,t)|^2$ nicht von der Zeit abhängig und entspricht genau der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_n(x)|^2$ des örtlichen Anteils.

iii. **Frage:** *Wie kommt es, dass der Normierungsfaktor A_n gar nicht mehr vom Index n abhängt?*

Antwort: In der Rechnung haben wir gesehen, dass sich der Index n einfach rauskürzt. Das könnte man als Antwort fast schon stehen lassen. Es gibt aber zusätzlich ein gutes grafisches Argument, das sichtbar wird, wenn wir uns die ersten paar $|\psi_n(x)|^2$ ohne Normierungsfaktor A_n aufzeichnen lassen:



Es handelt sich immer um dieselbe Sinusfunktion, die allerdings bei grösserem n horizontal immer mehr gestaucht ist. So ist die Fläche unter einem "Zacken" bei $n = 4$ beispielsweise nur noch ein Viertel der Fläche unter dem Bauch bei $n = 1$. Dafür gibt es nun allerdings vier solche Zacken im Gegensatz zu dem einen Bauch, sodass die Fläche unter der Kurve insgesamt gleich bleibt. Folglich muss für alle n mit demselben Faktor normiert – also vertikal gestreckt – werden, damit die Fläche unter dem Graphen gleich 1 wird.

(b) Bevor wir die ganze Rechnung angehen, überzeugen wir uns von der Richtigkeit der in der Aufgabenstellung unter i. vorgestellten trigonometrischen Identität. Das geht ziemlich direkt via Additionsthoreme für den Cosinus, wenn wir mit der rechten Seite beginnen:

$$\begin{aligned}
\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) &= \cos\left(\frac{m\pi}{a}x - \frac{n\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{m\pi}{a}x + \frac{n\pi}{a}x\right) \\
&= \cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\
&\qquad - \left(\cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right) \\
&= 2\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

Auch unter Verwendung der Euler-Schreibweisen für Sinus und Cosinus gelangt man zum Ziel, wobei wir jetzt besser mit der Multiplikation der Sinusfunktionen starten:

$$\begin{aligned}
2\sin\left(\frac{m\pi}{a}\,x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right) &= 2\cdot\frac{e^{\mathrm{i}m\pi x/a}-e^{-\mathrm{i}m\pi x/a}}{2\mathrm{i}}\cdot\frac{e^{\mathrm{i}n\pi x/a}-e^{-\mathrm{i}n\pi x/a}}{2\mathrm{i}} \\
&= 2\cdot\frac{e^{\mathrm{i}(m+n)\pi x/a}-e^{\mathrm{i}(m-n)\pi x/a}-e^{\mathrm{i}(-m+n)\pi x/a}+e^{\mathrm{i}(-m-n)\pi x/a}}{-4} \\
&= \frac{-e^{\mathrm{i}(m+n)\pi x/a}+e^{\mathrm{i}(m-n)\pi x/a}+e^{-\mathrm{i}(m-n)\pi x/a}-e^{-\mathrm{i}(m+n)\pi x/a}}{2} \\
&= \frac{e^{\mathrm{i}(m-n)\pi x/a}+e^{-\mathrm{i}(m-n)\pi x/a}}{2}-\frac{e^{\mathrm{i}(m+n)\pi x/a}+e^{-\mathrm{i}(m+n)\pi x/a}}{2} \\
&= \cos\left(\frac{m-n}{a}\,\pi x\right)-\cos\left(\frac{m+n}{a}\,\pi x\right) \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

Nun können wir den Orthonormalitätsbeweis angehen:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x &= \int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{m\pi}{a}\,x\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\cdot\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}\,x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a}\cdot\int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\,\pi x\right)-\cos\left(\frac{m+n}{a}\,\pi x\right)\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a}\cdot\left[\int_0^a \cos\left(\frac{m-n}{a}\,\pi x\right)\mathrm{d}x-\int_0^a \cos\left(\frac{m+n}{a}\,\pi x\right)\mathrm{d}x\right]
\end{aligned}$$

Es folgen die linearen Substitutionen. Im ersten Integral setze ich $s=\frac{(m-n)\pi}{a}\,x$ und im zweiten $t=\frac{(m+n)\pi}{a}\,x$. Damit folgt:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{a}\cdot\left[\int_0^a \cos\left(\frac{m-n}{a}\,\pi x\right)\mathrm{d}x-\int_0^a \cos\left(\frac{m+n}{a}\,\pi x\right)\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{1}{a}\cdot\left[\frac{a}{(m-n)\pi}\cdot\int_0^{(m-n)\pi}\cos s\,\mathrm{d}s-\frac{a}{(m+n)\pi}\cdot\int_0^{(m+n)\pi}\cos t\,\mathrm{d}t\right] \\
&= \frac{1}{(m-n)\pi}\cdot\sin s\,\Big|_0^{(m-n)\pi}-\frac{1}{(m+n)\pi}\cdot\sin t\,\Big|_0^{(m+n)\pi} \\
&= \frac{\sin\big((m-n)\pi\big)-\sin 0}{(m-n)\pi}-\frac{\sin\big((m+n)\pi\big)-\sin 0}{(m+n)\pi} \\
&= \frac{\sin\big((m-n)\pi\big)}{(m-n)\pi}-\frac{\sin\big((m+n)\pi\big)}{(m+n)\pi}
\end{aligned}$$

Für $m,n\in\mathbb{N}$ und $m\neq n$ sind $m-n$ und $m+n$ von 0 verschiedene ganze Zahlen. Dann gilt:

$$\sin\big((m-n)\pi\big)=0 \quad \text{und} \quad \sin\big((m+n)\pi\big)=0 \quad \text{denn:} \quad \sin(k\pi)=0 \quad \text{für alle } k\in\mathbb{Z}$$

Folglich ergibt sich für $m\neq n$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x=\frac{\sin\big((m-n)\pi\big)}{(m-n)\pi}-\frac{\sin\big((m+n)\pi\big)}{(m+n)\pi}=0$$

Problematisch wird es für $m = n$ beim Schritt der linearen Substitution. Dann entsteht nämlich vor dem vorderen Integral der Bruch $\frac{a}{(m-n)\pi}$, dessen Nenner nun gleich 0 wäre.
Den Fall $m = n$ müssten wir demnach separat anschauen. Das ist aber gar nicht nötig, denn wir wissen von der Normierung her bereits, dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_n(x)\, \mathrm{d}x = 1$$

ist. Nun können wir das Resultat übersichtlich zusammenfassen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x)\, \psi_n(x)\, \mathrm{d}x = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq n \\ 1 & \text{für } m = n \end{cases}$$

Dabei ist δ_{mn} das sogenannte **Kronecker-Symbol**, das für $m = n$ den Wert 1 hat und für $m \neq n$ gleich 0 ist.
Damit haben wir nun die Orthonormalität der Ortsanteile der separierbaren Lösungen im unendlich tiefen Potenzialtopf überprüft.

2. *Die komplexen Lösungen des klassischen harmonischen Oszillators*

(a) Vor dem Einsetzen in die Differentialgleichung leiten wir den Ansatz zweimal ab:

$$\begin{aligned} x(t) &= C\, e^{\mathrm{i}\omega t} + D\, e^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= \mathrm{i}\omega\, C\, e^{\mathrm{i}\omega t} - \mathrm{i}\omega\, D\, e^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} &= \mathrm{i}^2\omega^2\, C\, e^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{i}^2\omega^2\, D\, e^{-\mathrm{i}\omega t} = -\omega^2\, C\, e^{\mathrm{i}\omega t} - \omega^2\, D\, e^{-\mathrm{i}\omega t} = -\omega^2\, x(t) \end{aligned}$$

Damit gehen wir in die DGL hinein:

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{D}{m}\, x \quad \Rightarrow \quad -\omega^2\, x = -\frac{D}{m}\, x \quad \Rightarrow \quad \omega^2 = \frac{D}{m} \quad \Rightarrow \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$$

Wir sehen, wie sich die ganze Funktion $x(t)$ rausstreicht und die DGL am Ende einen Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz ω, Federkonstante D und Pendelmasse m herstellt.

(b) Der klassische harmonische Oszillator kann also auch komplex behandelt werden. Enthält dieser komplexe Ansatz auch wirklich alle reellen Lösungen, die wir mit dem trigonometrischen Ansatz bereits abgedeckt hatten? Genau diese Frage soll hier positiv beantwortet werden, indem wir zeigen, dass zu jedem Koeffizientenpaar (A, B) ein Koeffizientenpaar (C, D) bestimmt werden kann (und umgekehrt).
Das ist nicht weiter schwierig, wenn wir Sinus und Cosinus via Euler-Schreibweise durch komplexe Exponentialfunktionen ausdrücken:

$$\begin{aligned} A\, \sin(\omega t) + B\, \cos(\omega t) &= A \cdot \frac{e^{\mathrm{i}\omega t} - e^{-\mathrm{i}\omega t}}{2\mathrm{i}} + B \cdot \frac{e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}}{2\mathrm{i}} \\ &= \underbrace{\left(\frac{A}{2\mathrm{i}} + \frac{B}{2}\right)}_{=C} \cdot e^{\mathrm{i}\omega t} + \underbrace{\left(-\frac{A}{2\mathrm{i}} + \frac{B}{2}\right)}_{=D} \cdot e^{-\mathrm{i}\omega t} = C\, e^{\mathrm{i}\omega t} + D\, e^{-\mathrm{i}\omega t} \end{aligned}$$

(c) Setzen wir $t = 0$ in den Ansatz und in dessen 1. Ableitung ein, so erhalten wir:

$$\left| \begin{array}{c} x(0) \overset{!}{=} -A \\ v(0) = x'(0) \overset{!}{=} 0 \end{array} \right| \quad \Rightarrow \quad \left| \begin{array}{c} C\, e^0 + D\, e^0 = -A \\ \mathrm{i}\omega C\, e^0 - \mathrm{i}\omega D\, e^0 = 0 \end{array} \right| \quad \Leftrightarrow \quad \left| \begin{array}{c} C + D = -A \\ C - D = 0 \end{array} \right| \quad \Rightarrow \quad 2C = -A$$

$$\Rightarrow \quad C = D = -\frac{A}{2} \quad \Rightarrow \quad x(t) = -\frac{A}{2}\, e^{\mathrm{i}\omega t} - \frac{A}{2}\, e^{-\mathrm{i}\omega t} = -A \cdot \frac{e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}}{2} = -A\, \cos(\omega t)$$

Genau dieses Resultat hätten uns die Randbedingungen auch mit dem reellen Ansatz geliefert.

3. *Kennenlernen des "Fourier-Tricks"*

(a) Wir setzen also $\Psi(x,0)$ als Linearkombination der $\psi_n(x)$ ins gegebene Integral ein und schauen, wie sich daraus c_n ergibt. Allerdings schreibe ich diese Linearkombination vorab nochmals neu auf, einfach damit keine Verwirrung entsteht, wenn ich sie nun mit dem Laufindex m notiere – die Bezeichnung dieses Indexes spielt ja wirklich keine Rolle, aber vielleicht wäre es sonst doch verwirrend.

$$\Psi(x,0) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \, \Psi_m(x,0) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x)$$

Nun setzen wir diese Summe ins Integral ein:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \Psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) \right) \mathrm{d}x$$

Summe und Integral lassen sich wegen der Summenregel für Integrale vertauschen und die c_m sind einfach multiplikative Konstanten, die ebenfalls vor das Integral genommen werden dürfen. Es folgt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \Psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{\infty} \left(c_m \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \psi_m(x) \, \mathrm{d}x \right)$$

Diese Integrale entsprechen aber genau dem Skalarprodukt aus $\psi_n(x)$ und $\psi_m(x)$. Da diese Funktionen **orthonormal** sind, können wir dafür einfach das **Kronecker-Symbol** notieren:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \Psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \delta_{nm} = c_n$$

Das Kronecker-Symbol lässt die Summanden für alle m ausser $m = n$ zu 0 werden. Im Fall $m = n$ ist es 1 und pickt somit aus der Summe genau den Koeffizienten c_n heraus.

Wir haben also gesehen: Der Fourier-Trick funktioniert! Aus einer gegebenen Anfangsfunktion $\Psi(x,0)$ lassen sich die c_n stets berechnen durch:

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \Psi(x,0) \, \mathrm{d}x$$

(b) Zunächst normieren wir die Anfangsfunktion, um A zu bestimmen ($A, a \in \mathbb{R}$):

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi(x,0)|^2 \, \mathrm{d}x &= \int_0^a \big(Ax(a-x)\big)^2 \, \mathrm{d}x = A^2 \cdot \int_0^a \left(a^2x^2 - 2ax^3 + x^4\right) \mathrm{d}x \\
&= A^2 \cdot \left[\frac{a^2}{3} x^3 - \frac{a}{2} x^4 + \frac{1}{5} x^5 \right] \Bigg|_0^a = A^2 \cdot \left(\frac{a^5}{3} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{5} \right) \\
&= A^2 \cdot a^5 \cdot \frac{10 - 15 + 6}{30} = A^2 \cdot \frac{a^5}{30} \overset{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}
\end{aligned}$$

Nun kommt die Hauptschwierigkeit, nämlich aus der gegebenen Anfangsfunktion $\Psi(x,0)$ die Koeffizienten c_n zu bestimmen. Wir benutzen den Fourier-Trick:

$$\begin{aligned}
c_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \, \Psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot \sqrt{\frac{30}{a^5}} \cdot x(a-x) \, \mathrm{d}x \\
&= \frac{\sqrt{60}}{a^3} \cdot \int_0^a \left(ax \, \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) - x^2 \, \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \cdot \left(a \cdot \int_0^a x \, \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \mathrm{d}x - \int_0^a x^2 \, \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \mathrm{d}x \right)
\end{aligned}$$

Um den Überblick zu behalten, berechnen wir die beiden Integrale separat und benötigen dabei die lineare Substitution $s = \frac{n\pi}{a}\, s$, sowie eine oder zwei partielle Integrationen:

$$\begin{aligned}
\int_0^a x\, \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \mathrm{d}x &= \frac{a}{n\pi} \cdot \int_0^{n\pi} \frac{a}{n\pi}\, s\, \sin s\, \mathrm{d}s \\
&= \frac{a^2}{n^2\pi^2} \cdot \left([-s\, \cos s] \Big|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} -\cos s\, \mathrm{d}s \right) \\
&= \frac{a^2}{n^2\pi^2} \cdot \left(-n\pi \cos(n\pi) + 0 + [\sin s] \Big|_0^{n\pi} \right) \\
&= \frac{a^2}{n^2\pi^2} \cdot \big(-n\pi \cos(n\pi) + 0 - 0 \big) \\
&= -\frac{a^2}{n\pi}\, \cos(n\pi)
\end{aligned}$$

Dabei habe ich verwendet, dass $\sin(n\pi) = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Mit $\cos(n\pi)$ werden wir uns später beschäftigen. Nun zum zweiten Integral:

$$\begin{aligned}
\int_0^a x^2\, \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \mathrm{d}x &= \frac{a}{n\pi} \cdot \int_0^{n\pi} \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 s^2\, \sin s\, \mathrm{d}s \\
&= \frac{a^3}{n^3\pi^3} \cdot \left([-s^2\, \cos s] \Big|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} -2s\, \cos s\, \mathrm{d}s \right) \\
&= \frac{a^3}{n^3\pi^3} \cdot \left(-n^2\pi^2 \cos(n\pi) + 0 + 2 \cdot \int_0^{n\pi} s\, \cos s\, \mathrm{d}s \right) \\
&= \frac{a^3}{n^3\pi^3} \cdot \left(-n^2\pi^2 \cos(n\pi) + 2 \cdot \left([s\, \sin s] \Big|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} \sin s\, \mathrm{d}s \right) \right) \\
&= \frac{a^3}{n^3\pi^3} \cdot \left(-n^2\pi^2 \cos(n\pi) + 2 \cdot \left(0 - 0 + [\cos s] \Big|_0^{n\pi} \right) \right) \\
&= \frac{a^3}{n^3\pi^3} \cdot \Big(-n^2\pi^2 \cos(n\pi) + 2 \cdot \big(\cos(n\pi) - 1 \big) \Big) \\
&= -\frac{a^3}{n\pi}\, \cos(n\pi) + \frac{2a^3}{n^3\pi^3} \big(\cos(n\pi) - 1 \big)
\end{aligned}$$

Jetzt können wir die beiden Integralresultate in die ursprüngliche Rechnung einfügen:

$$\begin{aligned}
c_n &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \cdot \left(a \cdot \int_0^a x\, \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \mathrm{d}x - \int_0^a x^2\, \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \mathrm{d}x \right) \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \cdot \left(a \cdot \frac{-a^2}{n\pi}\, \cos(n\pi) - \left(-\frac{a^3}{n\pi}\, \cos(n\pi) + \frac{2a^3}{n^3\pi^3} \big(\cos(n\pi) - 1 \big) \right) \right) \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \cdot \left(-\frac{a^3}{n\pi}\, \cos(n\pi) + \frac{a^3}{n\pi}\, \cos(n\pi) - \frac{2a^3}{n^3\pi^3} \big(\cos(n\pi) - 1 \big) \right) \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \cdot \frac{2a^3}{n^3\pi^3} \big(1 - \cos(n\pi) \big) = \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \big(1 - \cos(n\pi) \big)
\end{aligned}$$

Zum Schluss müssen wir uns überlegen, welche Werte $\cos(n\pi)$ für verschiedene n annimmt:

- Für ungerade n ist $n\pi = \pi, 3\pi, 5\pi, \ldots$. Bei diesen Stellen hat der Cosinus jeweils den Wert -1.
- Bei ungeradem n ist $n\pi = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \ldots$. Über diesen Stellen hat der Cosinus den Wert 1.

Somit erhalten wir zum Ende unserer Rechnung:

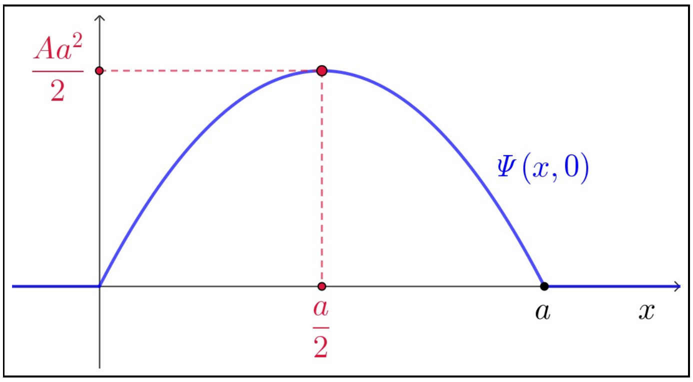
$$c_n = \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \big(1 - \cos(n\pi) \big) = \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \cdot \begin{cases} 0 & \text{für } n \text{ gerade} \\ 2 & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} = \begin{cases} 0 & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ setzt sich also nur aus stationären Zuständen mit ungeradem Index n zusammen. Mit dem Energiewert $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ ergibt sich insgesamt:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \sum_{n=1,3,5,\ldots} \Psi_n(x,t) = \sum_{n=1,3,5,\ldots} c_n\,\psi_n(x)\,\varphi_n(t) \\ &= \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right) \cdot e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \cdot \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^3} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right) \cdot e^{-\mathrm{i}\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}\,t}\end{aligned}$$

So kompliziert sieht also dieses Beispiel einer Linearkombination aus stationären Zuständen in unserem unendlich tiefen Potenzialtopf aus.

Bemerkung: Es ist nicht sonderlich überraschend, dass nur ungerade n in der Linearkombination auftreten. Unsere Anfangsfunktion



ist achsensymmetrisch bezüglich der Mitte des Topfs ($x = \frac{a}{2}$). Dasselbe gilt für die Ortsanteile $\psi_n(x)$ mit ungeradem n. Die $\psi_n(x)$ mit geradem n wären hingegen punktsymmetrisch zu $(\frac{a}{2}, 0)$. Solche Funktionen würden die Symmetrie der Linearkombination brechen.