Übungen zur Quantenphysik

Serie 12: Potenzielle Energie, Euler-Schreibweisen der Winkelfunktionen und Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

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

   Es geht um die **Aufgabe 1.8 auf Seite 39** im QM-Buch von Griffiths.

   In der klassischen Mechanik haben wir gelernt, dass wir in der Wahl des **Nullniveaus der potenziellen Energie** frei sind. Gibt es dieses Prinzip auch in der Quantenmechanik? Falls ja, müsste uns die Schrödinger-Gleichung diese Möglichkeit garantieren.

   Nehmen wir also an, $\Psi(x,t)$ sei die Lösung der Schrödinger-Gleichung

   $$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

   zu einem bestimmten Potential $V(x)$. Was passiert nun mit $\Psi(x,t)$, wenn wir das Nullniveau der potenziellen Energie verändern, also irgendeine Konstante V_0 zu $V(x)$ hinzuaddieren?

   Im Buch wird behauptet, dass die neue Wellenfunktion $\Psi_{\mathrm{neu}}(x,t)$ dann durch

   $$\Psi_{\mathrm{neu}}(x,t) = e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}\cdot\Psi(x,t)$$

   gegeben ist. Der Vorfaktor $e^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ wird als **Phasenfaktor** bezeichnet.

   (a) Zeige, dass obiges $\Psi_{\mathrm{neu}}(x,t)$ die mit V_0 modifizierte Schrödinger-Gleichung

   $$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi_{\mathrm{neu}}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi_{\mathrm{neu}}}{\partial x^2} + (V+V_0)\,\Psi_{\mathrm{neu}}$$

   erfüllt. Benutze dabei, dass $\Psi(x,t)$ der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung genügt.

   (b) Untersuche, was mit dem **Erwartungswert**

   $$\langle Q\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\widehat{Q}\,\Psi\,\mathrm{d}x$$

   einer Größe Q passiert, wenn statt Ψ nun Ψ_{neu} zu dessen Berechnung verwendet wird.
   Zur Erinnerung: Jeder Operator $\widehat{Q}$ setzt sich aus dem Ortsoperator $\widehat{x}=x$ und dem Impulsoperator $\widehat{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ zusammen. Das bedeutet, $\widehat{Q}$ enthält garantiert keine Ableitung nach der Zeit t.
   Gib schließlich eine gut begründete Antwort auf die Frage, ob auch in der Quantenmechanik das Nullniveau der potenziellen Energie frei gewählt werden kann.

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

   (a) Benutze die **Symmetrieeigenschaften** von Sinus- und Cosinusfunktion, um aus den **Additionstheoremen** für $\sin(\alpha+\beta)$ und $\cos(\alpha+\beta)$ (Gleichungen (6.1) im Skript über die Komplexen Zahlen) diejenigen für $\sin(\alpha-\beta)$ und $\cos(\alpha-\beta)$ herzuleiten.

   (b) Die **Doppelwinkelformeln** führen $\sin(2x)$ und $\cos(2x)$ auf die Werte von $\sin x$ und $\cos x$ zurück. Benutze die Additionstheoreme und die bestehenden Doppelwinkelformeln, um nun auch "Tripelwinkelformeln" für $\sin(3x)$ und $\cos(3x)$ zu notieren. Versuche $\sin(3x)$ alleine unter Verwendung von $\sin x$ zu notieren – ebenso $\cos(3x)$ nur mit $\cos x$.

   Tipps: Für den Start: $\sin(3x)=\sin(2x+x)$; und für den Schluss: $\sin^2 x+\cos^2 x=1$.

   (c) Im Skript haben wir hergeleitet, dass sich die Funktion $\cos^2 x$ durch eine doppelt so schnelle Cosinusfunktion mit halber Amplitude ersetzen lässt:

   $$\cos^2 x=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos(2x)$$

   Nachdem wir nun aber die Euler-Schreibweise für die Cosinusfunktion kennengelernt haben, ist die im Skript gezeigte Herleitung unter Verwendung von Additionstheoremen resp. Doppelwinkelformeln eigentlich eher ein Umweg. Direkter geht's wie folgt:

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

   Zeige in gleicher Weise, dass $\sin^2 x=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos(2x)$ ist.

   (d) Lasse dir den Graphen von $f(x)=\cos^2 x\sin x$ in GeoGebra aufzeichnen und beweise anschließend unter Verwendung der Euler-Schreibweise von Sinus und Cosinus die folgende Identität:

   $$\cos^2 x\,\sin x\equiv\frac{1}{4}\big(\sin(3x)+\sin x\big)$$

   Von der Richtigkeit dieser Identität kannst du dich natürlich direkt in GeoGebra überzeugen.

   (e) Bei der Ableitung von $\cos^3 x$ wenden wir "hemmungslos" die Kettenregel an:

   $$\big[\cos^3 x\big]'=-3\cos^2 x\cdot\sin x$$

   Benutze die Euler-Schreibweise, um die Richtigkeit dieser Kettenregel-Anwendung auf die Ableitungsregel für Potenzfunktionen zurückzuführen (vgl. Beispiel 2 auf Seite 40 im Skript zu den komplexen Zahlen). Dabei hilft zuletzt der unter (d) gezeigte Zusammenhang!

   (f) Alle Sinusfunktionen mit Mittelhöhe $y=0$ und einer bestimmten Periode T lassen sich schreiben in der Form:

   $$f(x)=A\cdot\sin\big(k(x-x_0)\big)\qquad\text{mit}\quad k=\frac{2\pi}{T}$$

   Dabei sind A die **Amplitude** und x_0 die **Rechtsverschiebung**.

   Behauptung: Jede derartige Sinusfunktion $f(x)$ lässt sich auch folgendermaßen notieren:

   $$f(x)=B\cdot\sin(kx)+C\cdot\cos(kx)\qquad\text{mit}\quad k=\frac{2\pi}{T}$$

   Erläuterung: Jede beliebige Sinusfunktion mit Periode T und Mittelhöhe $y=0$ ist also eine **Linearkombination** aus einer horizontal nicht verschobenen Sinus- und einer ebensolchen Cosinusfunktion mit Periode T. $\sin(kx)$ und $\cos(kx)$ spannen gemeinsam den Raum aller Sinusfunktionen mit Periode T und Mittelhöhe $y=0$ auf. Da nur zwei **Koeffizienten** B und C benötigt werden, handelt es sich hierbei um einen **zweidimensionalen Funktionenraum**.

   Beweise nun die obige Behauptung!

   Tipp: Additionstheoreme oder Euler-Schreibweise – beides funktioniert – was gefällt dir besser? Ich verzichte auf weitere spezifische Tipps. Nur so viel: Die Koeffizienten B und C müssten sich durch die Amplitude A und Rechtsverschiebung x_0 ausdrücken lassen.

3. *Der Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators*

Hier geht es um die **Aufgabe 1.9 auf Seite 41** im QM-Buch von Griffiths. Zum ersten Mal lernen wir eine wirklich bedeutsame **Wellenfunktion** kennen:

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

Wie wir später erfahren werden, handelt es sich hierbei um den **Grundzustand des harmonischen Oszillators**, also des "quantenmechanischen Federpendels".

Gehe die Aufgaben (a) bis (d) durch und löse danach auch noch die Aufgabe (e) unten.

Lösungen und Zwischenresultate finden sich zur Kontrolle am Ende dieser Übungsserie. Die folgenden **Tipps** sind sicher hilfreich:

- Von früher kennen wir die Werte der folgenden **Gauss-Integrale:**

$$\int_0^{+\infty} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \qquad \int_0^{+\infty} x\,e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2} \qquad \int_0^{+\infty} x^2\,e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$$

- Zu (a): Der Vorfaktor A ist so festzulegen, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 beträgt. Mit $\Psi^*(x,t) = A \cdot e^{-amx^2/\hbar} \cdot e^{\mathrm{i}at}$ stellen wir fest, dass der **Phasenfaktor** $e^{-\mathrm{i}at}$ keine Rolle spielt (alle Integrale gehen von $-\infty$ bis $+\infty$):

$$\int |\,\Psi|^2\,\mathrm{d}x = \int \Psi^*\,\Psi\,\mathrm{d}x = A^2 \cdot \int e^{-amx^2/\hbar}\,e^{\mathrm{i}at} \cdot e^{-amx^2/\hbar}\,e^{-\mathrm{i}at}\,\mathrm{d}x = A^2 \cdot \int e^{-2amx^2/\hbar}\,\mathrm{d}x$$

- Arbeite bei allen Integralen mit der **linearen Substitution** $s = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}}\,x$.
- Zu (b): Berechne vorab die partiellen Ableitungen $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ und $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ und notiere sie in einer Form mit der Wellenfunktion Ψ als Faktor. Danach müssen diese Ableitungen in die Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\,\Psi$$

eingesetzt werden, um einen Ausdruck für $V(x)$ zu gewinnen. Da die Wellenfunktion Ψ nun nur noch ein Faktor ist, kann sie komplett aus der Gleichung herausgestrichen werden.

- Bei der Berechnung von $\langle p^2 \rangle$ solltest du einerseits unbedingt auf deine Ableitung $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$, sowie andererseits auf deine Vorarbeit bei der Berechnung von $\langle x^2 \rangle$ zurückgreifen.
- Berechnung der Standardabweichungen: $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ resp. $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$.

(e) **Berechne den Erwartungswert und Standardabweichung der Gesamtenergie und erläutere anschließend die Bedeutung dieser Resultate.**

Die Gesamtenergie setzt sich aus kinetischer und potentieller Energie zusammen. Die klassische kinetische Energie ist $\frac{p^2}{2m}$, woraus in der Quantenmechanik mit dem Impulsoperator $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ der Operator $\frac{\widehat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ wird. Der Operator für die potenzielle Energie ist einfach der Faktor $V(x)$.

Der Operator für die Gesamtenergie, der als **Hamilton-Operator** oder im Englischen einfach als **Hamiltonian** $\widehat{H}$ bezeichnet wird, sieht demnach wie folgt aus:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Bevor du irgendein Integral berechnest, solltest du diesen Hamilton-Operator auf unsere Wellenfunktion anwenden. Das gibt fast überhaupt nichts zu tun, denn $\widehat{H}\,\Psi$ ist gerade die rechte Seite der Schrödinger-Gleichung, die gleich der linken Seite sein muss...

Zur Berechnung von $\langle E^2 \rangle$ sei angemerkt, dass $\widehat{H}^2$ für die doppelte Anwendung des Operators $\widehat{H}$ steht. Das bedeutet:

$$\widehat{H}^2\,\Psi = \widehat{H}\big(\widehat{H}\,\Psi\big)$$

Damit wird die Berechnung von $\langle E^2 \rangle$ sehr einfach.

Zwischen- und Endresultate zur Aufgabe 3

(a) $A = \sqrt[4]{\frac{2am}{\pi\hbar}}$

(b) Partielle Ableitungen: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\mathrm{i}a\,\Psi$ und $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\big(2a^2mx^2 - a\hbar\big)\,\Psi$
$\Rightarrow \quad V(x) = 2a^2mx^2$

(c) $\langle x \rangle = 0 \qquad \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4am} \qquad \langle p \rangle = 0 \qquad \langle p^2 \rangle = am\hbar$

(d) $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}$ und $\sigma_p = \sqrt{am\hbar} \quad \Rightarrow \quad \sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}$

(e) $\widehat{H}\,\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\,\Psi = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = a\hbar \quad \Rightarrow \quad \langle E \rangle = a\hbar$
$\widehat{H}^2\,\Psi = \widehat{H}\big(\widehat{H}\,\Psi\big) = \widehat{H}(a\hbar\Psi) = (a\hbar)^2\,\Psi \quad \Rightarrow \quad \langle E^2 \rangle = (a\hbar)^2$
$\Rightarrow \quad \sigma_E = 0$ (Bedeutung?!)