

Übungen zur Quantenphysik

Serie 13: Separierbare Lösungen, stationäre Zustände und Linearkombinationen

1. Zum mathematischen Verständnis separierbarer Lösungen

Die folgenden Fragen repetieren den mathematischen Inhalt der Seiten 48f im QM-Buch von Griffiths.

- (a) Was genau ist mathematisch mit einer **separierbaren Lösung** (= aufteilbaren Lösung) der Schrödinger-Gleichung mathematisch gemeint?
- (b) In der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \quad (1)$$

stehen *partielle Ableitungen*, also $\frac{\partial}{\partial t}$ und $\frac{\partial}{\partial x}$, währenddem in der "Zeitgleichung"

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \quad (2)$$

und in der **zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (3)$$

gewöhnliche Ableitungen $\frac{d}{dt}$ und $\frac{d}{dx}$ notiert werden.

Warum muss das so sein? Resp.: Was für eine Art von Gleichung ist die Schrödinger-Gleichung (1) und wie nennt man im Gegensatz dazu die Gleichungen (2) und (3)?

- (c) Wie kommt es, dass bei der Variablenseparation eine **Separationskonstante** – im Falle der Schrödinger-Gleichung jeweils mit E bezeichnet – eingeführt werden kann/muss?
- (d) Im Prinzip lautet der vollständige Funktionsansatz für die Lösung der Zeitgleichung (2):

$$\varphi(t) = A \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

Zeige erstens, dass dieser Ansatz Gleichung (2) löst, und begründe zweitens, weshalb Griffiths in der Folge einfach $A = 1$ setzt resp. nur noch $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ schreibt.

2. Zum Verständnis stationärer Zustände

Im Abschnitt 2.1 im QM-Buch von Griffiths haben wir erfahren: *Die stationären Zustände sind genau die separierbaren Lösungen $\Psi_n(x, t)$ der Schrödinger-Gleichung.* Dazu ein paar Kontrollfragen. . .

- (a) Weshalb werden die separierbaren Lösungen der Schrödinger-Gleichung als **stationäre Zustände** (= "unbewegliche" oder "unveränderliche" Zustände) bezeichnet, obwohl die Wellenfunktion $\Psi_n(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ offensichtlich von der Zeit t abhängig ist und sich somit verändert?
- (b) Ein Teilchen befinde sich im stationären Zustand $\Psi_n(x, t)$. Was stimmt, was nicht? Weshalb?
- i. Jeder stationäre Zustand entspricht einer separierbaren Lösung der Schrödinger-Gleichung und weist eine bestimmte Gesamtenergie E auf.
 - ii. Die Erwartungswerte aller physikalischen Größen sind zeitlich konstant.
 - iii. 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.
 - iv. 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.
 - v. Ist $\Psi(x, t)$ eine Linearkombination mehrerer stationärer Zustände, so sind alle aus $\Psi(x, t)$ berechneten Erwartungswerte zeitlich konstant.

3. Allgemeines zu Linearkombinationen separierbarer Lösungen

Auf Seite 51 im QM-Buch von Griffiths lesen wir: "Nun hat aber, wie Sie leicht selbst überprüfen können, die (zeitabhängige) Schrödinger-Gleichung die Eigenschaft, dass eine beliebige Linearkombination von Lösungen selbst auch eine Lösung ist.

(a) Dann überprüfen wir das doch rasch! Gegeben sei also eine Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) \quad \text{mit } c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (5)$$

also eine **Linearkombination** der beiden Wellenfunktionen $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$, die selber Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \quad (6)$$

zu irgendeinem Potenzial $V(x, t)$ seien.

Zeige durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung, dass $\Psi(x, t)$ ebenfalls eine Lösung ist.

(b) Die allgemeine Lösung $\Psi(x, t)$ der Schrödinger-Gleichung ist eine Linearkombination der unendlich vielen **separierbaren Lösungen** $\Psi_n(x, t)$ ($n \in \mathbb{N}$):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n \Psi_n(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) + \dots \quad \text{mit } c_n \in \mathbb{C} \quad (7)$$

Die $\Psi_n(x, t)$ mit $n \in \mathbb{N}$ seien also separierbare und einzeln bereits normierte Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Dann gilt aber auch, wie Griffiths im Kapitel 3 zeigt:¹

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq n \\ 1 & \text{für } m = n \end{cases} \quad (8)$$

Soll die Funktion $\Psi(x, t)$ in (7) selber wieder eine gültige Wellenfunktion sein, so muss sie zusätzlich normierbar sein. Zeige nun unter Verwendung von (8), dass sich daraus eine zusätzliche Anforderung für die Koeffizienten c_n ($n \in \mathbb{N}, c_n \in \mathbb{C}$) ergibt.

Tip: Wie sieht schon wieder die Normierungsbedingung für $\Psi(x, t)$ aus?

(c) Die Koeffizienten c_1 und c_2 in (5) sollen positiv und reell sein. Wie groß sind sie, wenn $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$ gleich stark in der Linearkombination vertreten sein sollen?

¹Das Integral in (8) ist als **Skalarprodukt** zweier Funktionen zu verstehen, die – um die Sprache der **linearen Algebra** zu benutzen – Vektoren in einem unendlich-dimensionalen Vektorraum sind. Das Skalarprodukt zweier verschiedener separierbarer Lösungen $\Psi_m(x, t)$ und $\Psi_n(x, t)$ ergibt 0, d.h., sie sind **orthogonal** zueinander, und da das Skalarprodukt von $\Psi_n(x, t)$ mit sich selber 1 ergibt, sind die zudem **normiert**. Zusammen sagen wir: Die separierbaren Lösungen $\Psi_n(x, t)$ sind **orthonormiert**. Genau das ist die Aussage von Gleichung (8).

In der ebenen Geometrie im \mathbb{R}^2 oder der Vektorgeometrie im \mathbb{R}^3 kam vielleicht die Frage auf, weshalb wir eigentlich von zwei **orthogonalen** Vektoren sprechen, wenn damit ja nur gemeint ist, dass diese beiden Vektoren **senkrecht** zueinander stehen. Nun haben wir aber einen ersten Einblick in die übergeordneten Konzepte der linearen Algebra gewonnen. Darin sind **Vektoren** die Elemente von **Vektorräumen**, wobei Addition und skalare Multiplikation bestimmte Axiome zu erfüllen haben, damit es sich um einen Vektorraum handelt. Der \mathbb{R}^2 und der \mathbb{R}^3 mit ihren sehr greifbaren zwei- resp. dreidimensionalen Vektoren sind nur die aller einfachsten Varianten solcher Vektorräume. Jetzt gerade haben wir ein weiteres Beispiel vor Augen: Anscheinend leben die quadratintegrierbaren (= normierbaren) Lösungen der Schrödinger-Gleichung ebenfalls in einem Vektorraum, der nach seinem "Erfinder" als **Hilbert-Raum** bezeichnet wird. Dabei handelt es sich um einen unendlich-dimensionalen Vektorraum, was durch (7) zum Ausdruck kommt: Jede Funktion $\Psi(x, t)$ ist Linearkombination unendlich vieler **Basisvektoren** $\Psi_n(x, t)$ ($n \in \mathbb{N}$)!

Auf vielen Vektorräumen lässt sich in der Folge ein **Skalarprodukt** definieren, das wiederum bestimmte Bedingungen erfüllen muss, damit es als Skalarprodukt bezeichnet werden darf. Die Definition eines solchen Skalarproduktes hängt allerdings von der Art der Vektoren im jeweiligen Vektorraum ab. In unserer Aufgabe haben wir vorgestellt bekommen, wie das Skalarprodukt im Hilbert-Raum definiert wird. Erst nach der Definition des Skalarproduktes können wir davon sprechen, dass zwei Vektoren **orthogonal** zueinander sind. Das ist genau dann der Fall, wenn ihr Skalarprodukt 0 ergibt. Im Allgemeinen sprechen wir also von der Orthogonalität zweier Vektoren und nicht vom **senkrecht zueinander Stehen**, denn was genau würden wir uns denn unter zwei senkrecht zueinander stehenden Funktionen vorstellen wollen?!

4. Die Linearkombination bewegt das Teilchen!

In dieser Aufgabe wird das Beispiel 2.1 auf den Seiten 52f im QM-Buch von Griffiths genau nachvollzogen. Ich habe allerdings sämtlichen Text neu verfasst, sodass wir ganz ohne das Buch auskommen.

Vorgabe

Ein Teilchen befinde sich in einem Zustand $\Psi(x, t)$, der eine Linearkombination des Grundzustandes $\Psi_1(x, t)$ und des ersten angeregten Zustandes $\Psi_2(x, t)$ sei. Da $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$ stationäre Zustände sind, schreiben wir:

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (9)$$

Dabei wollen wir der Einfachheit halber davon ausgehen, dass $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$, also die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, reelle Funktionen von x sind ($\psi_1(x), \psi_2(x) \in \mathbb{R}$ für alle x). Ebenso sollen die Koeffizienten reell sein: $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$.

- (a) Wir wollen nun zeigen, dass die Linearkombination für eine echte Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|^2$ sorgt. Während $|\Psi_1(x, t)|^2$ und $|\Psi_2(x, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichten stationärer Zustände zeitlich konstant sind, gilt das für Linearkombination daraus nicht mehr! Bestimme also einen "übersichtlichen" Ausdruck für $|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$! Verwende dabei zuletzt die Euler-Schreibweise für die Sinus- oder die Cosinusfunktion, um zu zeigen, dass diese Wahrscheinlichkeitsdichte sinusförmig hin- und herschwingt. Wie groß ist dabei die Kreisfrequenz?
- (b) Um die Sache schließlich – unter (c) – noch ein wenig zu veranschaulichen, gebe ich hier den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators an. Ich beschränke mich dabei auf die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung und die Energiewerte:

$$\psi_1(x) = A \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad \text{mit} \quad A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \quad \text{und} \quad E_1 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\psi_2(x) = A \cdot \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot x \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad \text{mit} \quad A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \quad \text{und} \quad E_2 = \frac{3\hbar\omega}{2}$$

Anmerkung: Typischerweise wird der Grundzustand beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator mit dem Index 0 versehen und der erste angeregte Zustand mit dem Index 1. Ich bleibe hier aber in der Notation unserer Vorgabe von oben und fange mit der Nummerierung ausnahmsweise bei 1 an.

Setze nun $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und formuliere damit das Resultat der Aufgabe (a) für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator.

- (c) Zum Ende wollen wir uns die drei Wahrscheinlichkeitsdichten $|\Psi_1(x, t)|^2$, $|\Psi_2(x, t)|^2$ und $|\Psi(x, t)|^2$ in GeoGebra aufzeichnen lassen und uns so vor Augen führen, wie sich die Linearkombination "bewegt".

Definiere zunächst einen Schieberegler für die Zeit t (von 0 bis 10 mit 0.1er-Schritten) und gib danach die drei Wahrscheinlichkeitsdichten ein. Dabei setzt du $m = \omega = \hbar = 1$, sodass es kaum Konstanten einzugeben gibt.

Tipp: Definiere zu Beginn der Funktionseingabe die Konstante $A = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}$. Damit kannst du danach die (reellen!) Wellenfunktionen $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ eingeben, wodurch sich anschließend die Eingabe von $|\Psi_1(x, t)|^2 = |\psi_1(x)|^2$, $|\Psi_2(x, t)|^2 = |\psi_2(x)|^2$ und $|\Psi(x, t)|^2$ wesentlich übersichtlicher und einfacher gestaltet.

Nun kannst du einerseits die Zeit laufen lassen und die "Schwingung" des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beobachten, andererseits kannst du aber auch einzeln über die drei Wahrscheinlichkeitsdichten integrieren und so kontrollieren, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit stets 1 bleibt – insbesondere bei $|\Psi(x, t)|^2$.