Übungen zur Quantenphysik

Serie 14: Der unendliche tiefe Potenzialtopf

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

   (a) In seinem QM-Buch leitet zeigt Griffiths auf Seite 55, dass für das Teilchen im unendlich tiefen Potenzialtopf nur Wellenfunktionen mit einem Ortsanteil der Form

   $$\psi_n(x) = A_n \cdot \sin(k_n x) \qquad \text{mit} \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{und} \quad n \in \mathbb{N} \tag{1}$$

   erlaubt sind. Gleich danach – oben auf Seite 56 – normiert Griffiths diese Wellenfunktionen. Er erhält:

   $$|A|^2 \overset{!}{=} \frac{2}{a} \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{2}$$

   Dabei setzt er diese Amplitude reell an, weil wir früher gezeigt haben, dass ein zusätzlicher Phasenfaktor (der Form $e^{\mathrm{i}\alpha}$) keine physikalische Auswirkung hätte.

   Wir sollten dieses Resultat kurz hinterfragen:

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

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

   iii. Wie kommt es, dass der Normierungsfaktor A_n gar nicht mehr vom Index n abhängt?
   Über diese Frage lässt sich auch gut grafisch nachdenken. Wie sehen denn die Graphen der Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi(x)|^2$ aus?

   Führe zur Beantwortung dieser Fragen die Normierung selber Schritt für Schritt durch.

   (b) Der Beweis der Orthonormalität der $\psi_n(x)$ oben auf Seite 57 geht ein bisschen gar schnell...
   Das anfängliche Integral

   $$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x \qquad \text{mit} \quad m,n \in \mathbb{N} \tag{3}$$

   soll für das **Skalarprodukt** von $\psi_m(x)$ mit $\psi_n(x)$ stehen. Nur für $m = n$ sollte es daher 1 ergeben und ansonsten 0. Genau wenn dies der Fall ist, sagen wir, die $\psi_n(x)$ sind orthogonal und normiert, oder eben in einem Wort **orthonormiert**.

   Gehe nun Schritt für Schritt durch diesen Orthonormalitätsbeweis hindurch. Dabei triffst du auf die folgenden Teilaufgaben:

   i. Besonders anspruchsvoll ist der Schritt von der ersten zur zweiten Zeile. Offenbar gilt:

   $$2\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \tag{4}$$

   Diesen Schritt kannst du entweder mittels Ausnutzung der Additionstheoreme für den Cosinus, oder aber unter Benutzung der Euler-Schreibweise für die Sinusfunktion zeigen. Am besten führst du ihn vor der Betrachtung der ganzen Rechnung separat durch.

   ii. Der Schritt von der zweiten zur dritten Zeile kann sehr übersichtlich mittels einer linearen Substitution durchgeführt werden.

   iii. Unterhalb des Beweises sagt Griffiths, dass der Beweis für $m = n$ nicht funktioniert. Bei welchem Schritt scheitert er genau und weshalb?

   iv. Für $m = n$ müsste eigentlich die gesamte Rechnung nochmals separat durchgeführt werden. Weshalb verzichtet Griffiths darauf resp. weshalb weiß er bereits, dass dies sicher der Fall ist?

2. *Die komplexen Lösungen des klassischen harmonischen Oszillators*

Bei der Lösung des unendlich tiefen Potenzialtopfs führt die Schrödinger-Gleichung innerhalb des Topfs auf die gewöhnliche Differenzialgleichung (DGL)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\,\Psi \qquad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{5}$$

Griffiths sagt an dieser Stelle (S. 54 unten), dass dies den **klassischen harmonischen Oszillator**, also das Federpendel beschreibe. Das ist so natürlich nicht ganz richtig, denn in der klassischen Mechanik haben wir jeweils eine DGL für die Ortsfunktion $x(t)$, die im Falle des harmonischen Oszillators die Form

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\omega^2\,\Psi \qquad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{m}} \tag{6}$$

aufweist. Aus mathematischer Sicht sind diese beiden DGLs aber effektiv dieselben, sodass Griffiths einfach die allgemeine reelle Lösung notiert:

$$\psi(x) = A\,\sin(kx) + B\,\cos(kx) \qquad \text{resp.} \qquad x(t) = A\,\sin(\omega t) + B\,\cos(\omega t) \tag{7}$$

Wir wollen die Gelegenheit nutzen, die DGL (6) für den klassischen harmonischen Oszillator nochmals zu lösen, diesmal allerdings komplex! Diese Gleichung entspringt dem Aktionsprinzip für ein Federpendel mit Federkonstante D und Masse m. Die rücktreibende Kraft des Pendels ist proportional zur Auslenkung x aus der entspannten Lage bei $x = 0$, also $F_{\text{res}} = F_{\text{F}} = -D \cdot x$, wobei die Federkonstante D die Stärke der Feder angibt. Die Beschleunigung entspricht der zweiten Ableitung der Ortsfunktion:

$$F_{\text{res}} = m \cdot a \quad \Rightarrow \quad -D \cdot x = m \cdot \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{D}{m}\,x \tag{8}$$

Wir gelangen also zu einer gewöhnlichen, linearen und homogenen DGL 2. Ordnung für die Ortsfunktion $x(t)$ und wissen daher, dass die allgemeine Lösung eine Linearkombination zweier linear unabhängiger Funktionen $f(t)$ und $g(t)$ sein muss:

$$x(t) = A\,f(t) + B\,g(t) \tag{9}$$

Während wir in (7) $f(t) = \sin(\omega t)$ und $g(t) = \cos(\omega t)$ angesetzt hatten, lässt sich (8) aber auch mit einem exponentiellen Ansatz lösen, denn diese DGL besagt ja, dass die zweite Ableitung $\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}$ proportional zur Funktion $x(t)$ sein soll. Das schreit schon fast nach Exponentialfunktion!

(a) Zeige nun also, dass der Ansatz

$$x(t) = C\,e^{\mathrm{i}\omega t} + D\,e^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{10}$$

ebenfalls die DGL (8) löst, sofern $\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$ ist.

(b) Die linear unabhängigen Funktionen $e^{\mathrm{i}\omega t}$ und $e^{-\mathrm{i}\omega t}$ bilden folglich eine Basis des zweidimensionalen Lösungsraumes aller komplexen Funktionen für die DGL (8).

Behauptung: Genau derselbe Lösungsraum wird aufgespannt, wenn wir in (7) für die Koeffizienten A und B auch komplexe Zahlen zulassen.

Beweise diese Behauptung, indem du explizit zeigst, dass es zu jedem Koeffizientenpaar (A, B) ein Koeffizientenpaar (C, D) gibt, sodass gilt:

$$A\,\sin(\omega t) + B\,\cos(\omega t) = C\,e^{\mathrm{i}\omega t} + D\,e^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{11}$$

(c) Wie lauten C und D für die Lösung zu den Anfangsbedingungen $x(0) = -A$ und $v(0) = 0$?

3. *Kennenlernen des "Fourier-Tricks"*

   Zu unterst auf Seite 57 stellt Griffiths den sogenannten **Fourier-Trick** vor.

   Die Ortsanteile $\psi_n(x)$ der separierbaren Lösungen sind **vollständig**. Das bedeutet, sie bilden zusammen eine Basis des Raums aller Funktionen $\psi(x)$, die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung sind. Jedes $\psi(x)$ kann als Linearkombination dieser Basisfunktionen geschrieben werden. Im Falle des unendlich tiefen Potenzialtopfs sieht das dann so aus:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \tag{12}$$

Alle $\psi_n(x)$ haben denselben Normierungsfaktor $\sqrt{\frac{2}{a}}$, der deshalb ausgeklammert werden kann.

   (a) Aber wodurch werden diese Koeffizienten c_n in einer bestimmten Situation festgelegt? Welche separierbaren Lösungen sind wie ausgeprägt in der Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ enthalten?

   Das funktioniert gleich wie bei den bisher betrachteten Differenzialgleichungen, nämlich durch Vorgabe einer Anfangsbedingung. Kennen wir die Anfangsfunktion $\Psi(x,0)$, also die Wellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$, so werden dadurch die c_n eindeutig festgelegt. Offenbar gilt:

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\, \Psi(x,0)\, \mathrm{d}x \tag{13}$$

   Überzeuge dich von der Richtigkeit dieser Aussage!
   Tipp: Bereits $\Psi(x,0)$ ist eine Linearkombination der $\psi_n(x)$:

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\, \Psi_n(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \tag{14}$$

   Setze diesen Ausdruck für $\Psi(x,0)$ ins Integral in (13) ein und benutze die Orthonormalität der $\psi_n(x)$ um zu zeigen, dass so genau c_n "herausgepickt" wird.
   Nebenbei: Sind die c_n einmal festgelegt, so behalten sie ihren Wert, während die Zeit fortschreitet. Alles andere würde einer Veränderung des Zustandes entsprechen, wofür allerdings eine Art von Prozess oder Messung notwendig wäre.

   (b) Zur weiteren Veranschaulichung betrachten wir das Beispiel 2.2 auf S. 59 im Griffiths. Gegeben ist eine konkrete Anfangsfunktion innerhalb des unendlich tiefen Potenzialtopfs:

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} Ax(a-x) & \text{für} \quad 0 \le x \le a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad \text{mit} \quad A, a > 0 \quad \text{und} \quad A, a \in \mathbb{R} \tag{15}$$

   Zunächst kann A bestimmt werden, denn bereits $\Psi(x,0)$ muss normiert sein. Danach geht es darum die Koeffizienten c_n zu bestimmen, um damit die komplette Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ anzugeben. Das ist eine beachtliche Integralrechnung, deren "Kurzform" im Griffiths auf Seite 60 zu sehen ist. Unterscheide am Ende zwischen geraden und ungeraden n und überlege dir, dass gilt:

$$\cos(n\pi) = \begin{cases} 1 & \text{für } n \text{ gerade} \\ -1 & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{16}$$

   Überzeuge dich schließlich davon, dass die Schlussformel für $\Psi(x,t)$ im Griffiths auf Seite 60 korrekt ist, da für die vollständige Wellenfunktion gilt:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\, \Psi_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \tag{17}$$

   Dabei muss die Formel für die Energie im n-ten stationären Zustand im unendlich tiefen Potenzialtopf benutzt werden (vgl. Griffiths S. 55 unten).

4. *Konsequenzen der Koeffizienten c_n*

   Wir haben nun in Teilaufgabe (b) von Aufgabe 3 aufgrund einer konkreten Anfangsfunktion $\Psi(x, 0)$ die Koeffizienten c_n bestimmt, die festlegen, wie sich die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ aus den $\Psi_n(x, t)$ zusammensetzt:

$$c_n = \begin{cases} 0 & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{18}$$

   (a) Lies auf den Seiten 60f im Griffiths nochmals nach, was über die Bedeutung von c_n resp. $|c_n|^2$ gesagt wird.

   (b) Wie groß sind folglich die Wahrscheinlichkeiten bei einer Messung der Gesamtenergie die Energie E_1 resp. E_2 zu messen?

   Betrachte dazu die Anmerkungen im Beispiel 2.3 auf Seite 61f im Griffiths, das die Fortsetzung von Beispiel 2.2 ist.

   (c) Überprüfe, dass gilt:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \tag{19}$$

   Benutze dabei die folgende Summenformel:

$$\sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^4} = \frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \ldots = \frac{\pi^4}{96} \tag{20}$$

   (d) Wie groß ist der Erwartungswert $\langle H \rangle$ der Gesamtenergie? Es gilt:

$$\sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^6} = \frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \ldots = \frac{\pi^6}{960} \tag{21}$$

   (e) Am Ende von Beispiel 2.3 sagt Griffiths: *"Wie zu erwarten ist, liegt er (der Erwartungswert $\langle H \rangle$) dicht bei $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ – wegen der Beimischung der angeregten Zustände ist er ein wenig größer."* Dieses Ergebnis ist zu erwarten, weil die Anfangsfunktion $\Psi(x, 0)$ ganz ähnlich aussieht wie der Ortsanteil $\psi_1(x)$ des Grundzustandes, so Griffiths Aussage zu Beginn von Beispiel 2.3.

   Vergleiche nun die Werte $\langle H \rangle = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$ und $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ noch ganz explizit miteinander. Um wie viele Prozente ist $\langle H \rangle$ größer als E_1?

5. **Zusatzaufgabe:** *"Ganz alleine schwimmen!"*

   Zum ersten Mal lasse ich dich ohne weitere Erläuterungen auf eine Griffiths-Aufgabe los – aber nur, wenn du Zeit und Lust hast. Wir haben in den letzten Serien viel Erfahrungen mit verschiedenen Fragen und Berechnungen rund um Wellenfunktionen gesammelt, sodass du darauf durchaus hinreichend vorbereitet bist und es ja auch erlaubt ist, Dinge nochmals nachzuschlagen und nachzuschauen, was wir an anderer Stelle wie gemacht haben.

   Konkret geht es um die Aufgabe 2.5 auf den Seiten 62f im Griffiths. Probier' es aus!