

Übungen zum physikalischen Ergänzungsfach

Serie 12: Unendlich tiefer Potentialtopf und separierbare Lösungen

- *Basic* – Dinge, die du einfach gesehen und bearbeitet haben musst → **obligatorisch!**
- *Die Essenz* – zentrale Aufgabe für das grundlegende Verständnis → **obligatorisch!**
 - *Noch ein Beispiel* – Zusatzaufgabe mit weiterer Anwendung zur Vertiefung → **fakultativ!**
 - *Du willst es? Du kriegst es!* – längere, weiterführende Aufgabe mit neuen Inhalten → **fakultativ!**

1. •• Zum Verständnis stationärer Zustände

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

- Weshalb werden die separierbaren Lösungen der S.-Gl. als **stationäre Zustände** (= “unbewegliche” oder “unveränderliche” Zustände) bezeichnet, obwohl die Wellenfunktion $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ offensichtlich von der Zeit t abhängig ist und sich somit verändert?
- Ein Teilchen befinde sich im stationären Zustand $\Psi_n(x, t)$. Was stimmt, was nicht? Weshalb?
 - Dieser stationäre Zustand entspricht einer separierbaren Lösung der S.-Gl. und weist eine ganz bestimmte Gesamtenergie E_n auf.
 - Die Erwartungswerte aller physikalischen Größen sind zeitlich konstant.
 - Messe ich den Ort x des Teilchens, so ergibt sich ein ganz bestimmter Wert x_n , der durch den aus $\Psi_n(x, t)$ berechneten Erwartungswert $\langle x \rangle$ vorausgesagt wird.
 - 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.
- Ein Teilchen befinde sich im Zustand $\Psi(x, t)$, der eine Linearkombination mehrerer stationärer Zustände sein soll. Was sagst du zur folgenden Behauptung: “Alle aus $\Psi(x, t)$ berechneten Erwartungswerte sind zeitlich konstant.”

2. • Zwei Rechnungen mit der Euler-Schreibweise für Sinus und Cosinus

- Im Skript zu den Komplexen Zahlen wird auf Seite 37 aus den Additionstheoremen 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:

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

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

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

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

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

3. •• Orthonormalität der $\psi_n(x)$ im unendlich tiefen Potenzialtopf

Im Buch zeigt Griffiths auf Seite 55, dass die Ortsanteile der separierbaren Lösungen $\Psi_n(x, t)$ im unendlich tiefen Potentialtopf der Breite a gegeben sind durch

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(k_n x) \quad \text{mit} \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{und} \quad n \in \mathbb{N} \quad . \quad (1)$$

- (a) Weshalb ist der Normierungsfaktor $\sqrt{\frac{2}{a}}$ gar nicht mehr vom Index n abhängig?

Denke nur grafisch über diese Frage nach! Wie sehen denn die Graphen von $|\psi_n(x)|^2$ aus?

Tipp: Lasse dir $|\psi_n(x)|^2$ in Abhängigkeit eines Schiebereglers n in GeoGebra aufzeichnen.

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \quad \text{mit} \quad m, n \in \mathbb{N} \quad (2)$$

sollte für $m = n$ den Wert 1 ergeben und ansonsten gleich 0 sein. 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:

$$2 \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) = \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi x\right) \quad (3)$$

Dies kannst du mittels der Euler-Schreibweisen für die Sinus- und die Cosinusfunktion zeigen. Am besten führst du diesen Schritt vor der ganzen Integralberechnung separat durch.

- ii. Den Schritt von der zweiten zur dritten Zeile, also die Ermittlung der Stammfunktion, kannst du mittels einer linearen Substitution durchführen, wenn du bereits über diese Integraltechnik verfügst. Ansonsten kann man auch an eine "umgekehrte Kettenregel" denken:

$$\int_0^a \cos(kx) dx = \frac{1}{k} \cdot [\sin(kx)] \Big|_0^a$$

Der Faktor $\frac{1}{k}$ hebt die innere Ableitung bei der Differentiation von $\sin(kx)$ aus, sodass dabei nur $\cos(kx)$ entsteht.

- iii. Weshalb ergibt sich auf der letzten Zeile der Wert 0, wenn $m \neq n$ ist?

Tipp: Denke zur Beantwortung über die Nullstellen der Sinusfunktion nach!

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

4. ◦ Allgemeines zu Linearkombinationen separierbarer Lösungen

Auf Seite 51 im 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 eine Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) \quad \text{mit } c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (4)$$

also eine **Linearkombination** von $\Psi_1(x, t)$ und $\Psi_2(x, t)$, die selber Lösungen der S.-Gl.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \quad (5)$$

zu irgendeinem Potential $V(x)$ sein sollen.

Zeige, dass $\Psi(x, t)$ ebenfalls eine Lösung der S.-Gl. zu diesem Potential ist.

Tipp: Die Angelegenheit ist recht einfach! Setze $\Psi(x, t)$ in die S.-Gl. ein, multipliziere aus resp. wende die Ableitungen auf die in $\Psi(x, t)$ enthaltene Summe an und suche dann Glieder auf der linken und der rechten Gleichungsseite die aufgrund der Voraussetzung gleich sein müssen.

(b) Die allgemeine Lösung $\Psi(x, t)$ der S.-Gl. zu einem bestimmten Potential $V(x)$ ist eine Linearkombination der unendlich vielen **separierbaren Lösungen** $\Psi_n(x, t)$ ($n \in \mathbb{N}$):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n \Psi_n(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) + \dots \quad \text{mit } c_n \in \mathbb{C} \quad (6)$$

Die $\Psi_n(x, t)$ mit $n \in \mathbb{N}$ seien also separierbare und einzeln bereits normierte Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Dann gilt aber ganz allgemein (wie Griffiths allerdings erst im Kapitel 3 zeigt), dass diese separierbaren Lösungen sogenannten **orthonormiert** sind. Das bedeutet:¹

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq n \\ 1 & \text{für } m = n \end{cases} \quad (7)$$

Soll die Funktion $\Psi(x, t)$ in (6) selber wieder eine gültige Wellenfunktion sein, so muss sie zusätzlich normierbar sein. Zeige nun unter Verwendung von (7), dass sich daraus eine zusätzliche Anforderung für die Koeffizienten c_n ($n \in \mathbb{N}, c_n \in \mathbb{C}$) ergibt.

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

(c) Die Koeffizienten c_1 und c_2 in (4) 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 (7) 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 (7).

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 (6) 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?!

5. •• Erst 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 hier 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:

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (8)$$

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: $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$.

- 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 eine 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?
- Zur Veranschaulichung soll das allgemeine Resultat aus (a) auf den konkreten Fall des unendlich tiefen Potentialtopfs angewendet werden. Dabei lauten die beiden Wellenfunktionen mit den tiefsten Energien innerhalb des Topfs, also im Intervall $[0; a]$:

$$\Psi_1(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{\pi}{a} \cdot x\right) \cdot e^{-iE_1 t/\hbar} \quad \text{und} \quad \Psi_2(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x\right) \cdot e^{-iE_2 t/\hbar}$$

$$\text{mit } A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \text{und} \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

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

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

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

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

Tipp: Definiere zu Beginn der Funktionseingabe die Konstante $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. 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.

Hinweis: Um in GeoGebra eine Funktion auf ein bestimmtes Intervall zu beschränken, kannst du den Befehl `Funktion()` verwenden. Er hat drei Argumente: Im ersten steht die Funktionsgleichung, im zweiten die untere und im dritten die obere Grenze.