Blatt 7 **6. Dezember 2021**

Vorlesung

Leo Knapp, Marius Pfeiffer, Juan Provencio Tutor/in: Tobias Hammel

1. Zustände im Kastenpotential

Gegeben sei ein Teilchen der Masse m in einem Kastenpotential eingeschlossen mit einem Potential definiert als

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq d \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \tag{1}$$

a) Da sich das Teilchen auf jeden Fall innerhalb des Kastens befinden muss, muss auf diesem Rand

$$\psi(0) = \psi(d) = 0 \tag{2}$$

gelten. Außerhalb des Kastens für $x < 0$ und für $x > d$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ebenfalls Null.

b) Gegeben seien Energieeigenzustände $|n\rangle$ gegeben mit der Eigenenergie

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{d}n\right)^2 \tag{3}$$

Gesucht ist die allgemeine Form der Ortsdarstellung dieser Zustände $\langle x|k\rangle$. Dafür benutzen wir die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{4}$$

In der Ortsdarstellung nehmen wir

$$-\frac{\hbar}{2m}\boldsymbol{\Delta}\psi(x,t) = i\hbar\,\partial_t\psi(x,t) \tag{5}$$

Eine Lösung zu dieser Gleichung mit den gegebenen Randbedingungen ist[1]

$$\Phi_n = \mathrm{e}^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\phi_n(x) \tag{6}$$

[1] Quelle: Vorlesung

mit[2]

$$\phi_n(x) = 2Ai\sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \tag{7}$$

Die Konstante A muss bestimmt werden, so dass Φ_n die Normalitätsbedingungen erfüllt:

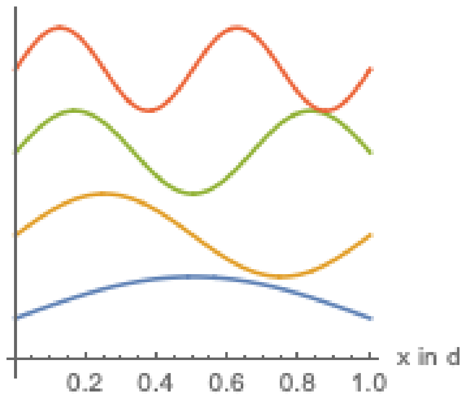
$$\begin{aligned}
1 &\overset{!}{=} \int_0^d \Phi_n^* \Phi_n \mathrm{d}x \qquad (8)\\
&= \int_0^d 4A^*A\sin^2\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \qquad (9)\\
&= \left[4A^*A\left(\frac{x}{2} - \frac{d\sin\left(\frac{2n\pi x}{d}\right)}{4n\pi}\right)\right]_0^d \qquad (10)\\
&= 4|A|^2\frac{d}{2} \qquad (11)\\
|A|^2 &= \frac{1}{2d} \qquad (12)\\
A &= \sqrt{\frac{1}{2d}}\mathrm{e}^{i\varphi} \quad \checkmark \qquad (13)
\end{aligned}$$

Das heißt insgesamt kann die Ortsdarstellung des Eigenenergiezustandes geschrieben werden als:

$$\begin{aligned}
\langle x|n\rangle &= 2\sqrt{\frac{1}{2d}}\mathrm{e}^{i\varphi}i\sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \qquad (14)\\
&= \sqrt{\frac{2}{d}}\mathrm{e}^{i\varphi}i\sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \quad \checkmark \qquad (15)
\end{aligned}$$

c) Ein Zustand $|n\rangle$ hat $n-1$ Knoten wie man in der unteren Abbildung erkennen kann:

[2]Dieses Ergebnis stammt aus dem Ansatz, dass eine Lösung der Form $\phi = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$ ist.



Richtig, aber gefragt war nach $|\phi(x)|^2$

Abbildung 1: Funktion für verschiedene n

d) Gegeben sei ein Elektron und der Bohrradius $a_0 \approx 0{,}053\,\mathrm{nm}$. Für $d = a_0$ und $d = 2a_0$ hat der Grundenergiezustand einen Wert von:

$$E_{g_1} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\pi}{a_0}\right)^2 \tag{16}$$
$$\approx 133{,}9\,\mathrm{eV} \tag{17}$$
$$E_{g_2} \approx 33{,}5\,\mathrm{eV} \tag{18}$$

Das Spektrum der beiden sieht folgendermaßen aus:

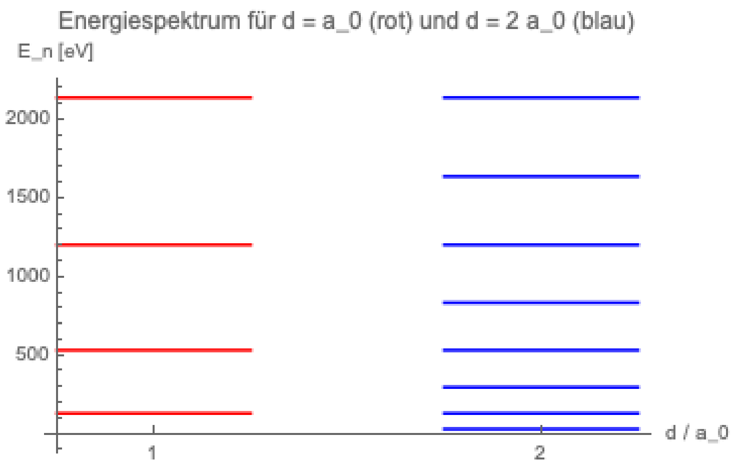


Abbildung 2: Spektrum für $d = a_0$ und $d = 2a_0$

Je größer wir d machen, desto näher sind die einzelnen Linien an einander, für $d \to \infty$ erwarten wir also irgendwann ein kontinuierliches Spektrum.

3/3

2. Scharfe Observablen als Funktionen von unscharfen

Gegeben seien die quantenmechanischen Zustände

$$|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x')\,|x'\rangle\,\mathrm{d}x', \tag{19}$$

deren Darstellung in der Ortsbasis gegeben ist durch

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \mathcal{N}_n H_n \frac{x}{\sigma} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \quad ✓ \tag{20}$$

Hierbei ist

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{21}$$

mit Masse m, Frquenz $\frac{\omega}{2\pi}$, die H_n entsprechen den Hermite-Polynomen

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2 \tag{22}$$

und der Normierungsfaktr $\mathcal{N}$ ist gegeben durch

$$\mathcal{N}_n = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}. \tag{23}$$

a) Nun sei zunächst der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \tag{24}$$

für eine rein kinetische Energie gegeben. Den Erwartungswert erhalten wir, wie in der Vorlesung eingeführt, nach

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \left\langle \psi \middle| \frac{\hat{p}^2}{2m} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \middle| \psi \right\rangle. \quad ✓ \tag{25}$$

In der letzten Gleichung wurde $\hat{p}$ bereits in Impulsdarstellung umgeschrieben, deshalb wollen wir auch ψ in der Impulsbasis betrachten. Nach der gegebenen Identität gilt für die Fourier-Transformierte gilt:

$$\psi_n(k) = (-i)^n \mathcal{N}_n \sigma H_n(k\sigma) \exp\left\{-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right\}. \quad ✓ \tag{26}$$

Der Erwartungswert entspricht also

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(k)\psi^*(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mathrm{d}k \tag{27}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} k^2 \left|(-i)^n \mathcal{N}_n \sigma H_n(k\sigma)\exp\left\{-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right\}\right|^2 \mathrm{d}k \tag{28}$$

Der Integrand kann vereinfacht werden, da nur der Betrag der komplexen Zahl relevant ist:

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} k^2 \left|\mathcal{N}_n \sigma H_n(k\sigma)\exp\left\{-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right\}\right|^2 \mathrm{d}k \tag{29}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} k^2 \mathcal{N}_n^2 \sigma^2 H_n^2(k\sigma)\exp\left\{-k^2\sigma^2\right\}\mathrm{d}k \tag{30}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{N}_n^2\int_{-\infty}^{\infty} k^2 \sigma^2 H_n^2(k\sigma)\exp\left(-(k\sigma)^2\right)\mathrm{d}k \tag{31}$$

Um das Integral an dieser Stelle auszurechnen betrachten wir kurz folgendes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x)\mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x \overset{\text{Part.}}{=} \underbrace{xH_n(x)\mathrm{e}^{-x^2}\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} \tag{32}$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x\left(2H_n(x)2nH_{n-1}(x)\mathrm{e}^{-x^2}\right)}_{=0} - 2xH_n^2(x)\mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x$$

$$= 2\int_{-\infty}^{\infty} x^2 H_n^2(x)\mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x \tag{33}$$

Dies benutzen wir um das Integral in (31) zu vereinfachen:

$$\left\langle \hat{H}\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{N}_n^2\int_{-\infty}^{\infty} k^2\sigma^2 H_n^2(k\sigma)\exp\left(-(k\sigma)^2\right)\mathrm{d}k \qquad \Big| u = k\sigma \tag{34}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{N}_n^2 \cdot \frac{1}{\sigma}\int_{-\infty}^{\infty} u^2 H_n^2(u)\mathrm{e}^{-u^2}\,\mathrm{d}u \qquad \Big|(33) \tag{35}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m\sigma}\mathcal{N}_n^2\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(u)\mathrm{e}^{-u^2}\,\mathrm{d}u \qquad \Big|\text{Orthogonalität} \tag{36}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m\sigma}\mathcal{N}_n^2 \cdot \sqrt{\pi}2^n n! \qquad \Big|\mathcal{N}_n = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi\sigma^2}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \tag{37}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m\sigma} \cdot \sqrt{\frac{1}{\pi\sigma^2}}\frac{1}{2^n n!} \cdot \sqrt{\pi}2^n n! \qquad \Big|\frac{1}{\sigma} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{38}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) \tag{39}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \tag{40}$$

Im Fall $n = 1$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \mathcal{N}_1^2 \sigma^2 H_1^2(k\sigma) \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k && (41) \\
&= \frac{\sigma^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi} m} \int_{-\infty}^{\infty} k^4 \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k \quad | \text{🪄} && (42) \\
&= \frac{\sigma^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi} m} \frac{3\sqrt{\pi}}{4\sigma^5} && (43) \\
&= \frac{3\hbar\omega}{4} && (44)
\end{aligned}$$

Für die Varianz

$$\mathrm{Var}(x) = \sqrt{\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{H} \right\rangle^2} \tag{45}$$

müssen wir nun noch $\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle$ für $n = 0$ und $n = 1$ bestimmen.

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle &= \left\langle \psi \middle| \frac{\hat{p}^4}{4m^2} \middle| \psi \right\rangle && (46) \\
&= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-\infty}^{\infty} k^4 \mathcal{N}_n^2 \sigma^2 H_n^2(k\sigma) \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k && (47)
\end{aligned}$$

Mit $n = 0$ gilt:

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-\infty}^{\infty} k^4 \mathcal{N}_0^2 \sigma^2 H_0^2(k\sigma) \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k && (48) \\
&= \frac{\hbar^4 \sigma}{4m^2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k^4 \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k \quad | \text{🪄} && (49) \\
&= \frac{\hbar^4 \sigma}{4m^2\sqrt{\pi}} \frac{3\sqrt{\pi}}{4\sigma^5} && (50) \\
&= \frac{3}{16} \frac{\hbar^4}{m^2\sigma^4} = \frac{3\hbar^2\omega^2}{16} && (51)
\end{aligned}$$

Mit $n = 1$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle &= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-\infty}^{\infty} k^4 \mathcal{N}_1^2 \sigma^2 H_1^2(k\sigma) \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k && (52) \\
&= \frac{\sigma^3 \hbar^4}{2\sqrt{\pi} m^2} \int_{-\infty}^{\infty} k^6 \exp\left\{-k^2\sigma^2\right\} \mathrm{d}k \quad | \text{🪄} && (53) \\
&= \frac{\sigma^3 \hbar^4}{2\sqrt{\pi} m^2} \frac{15\sqrt{\pi}}{8\sigma^7} && (54)
\end{aligned}$$

$$= \frac{15\hbar^4}{16\sigma^4 m^2} = \frac{15\hbar^2\omega^2}{16} \tag{55}$$

Also gilt für die Varianz:

$$\langle E_{kin}^2 \rangle - \langle E_{kin} \rangle^2 = \mathrm{Var}\left(\hat{H}\right)_0 = \sqrt{\left(\frac{3\hbar^2\omega^2}{16}\right) - \left(\frac{\hbar\omega}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{2\hbar^2\omega^2}{16}} = \cancel{\frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4}} = \frac{(\hbar\omega)^2}{8} \tag{56}$$

$$\mathrm{Var}\left(\hat{H}\right)_1 = \sqrt{\frac{15\hbar^2\omega^2}{16} - \left(\frac{3\hbar\omega}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{6\hbar^2\omega^2}{16}} = \frac{\sqrt{6}\hbar\omega}{4} = \frac{3\hbar^2\omega^2}{8} \tag{57}$$

$$\tag{58}$$

b) Nun müssen wir zunächst die Ortsdarstellung des Operators für die potenzielle Energie finden. Das ist aber einfach, da dieser Operator im Ortsraum gerade der Ortskoordinate x entspricht:

$$\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} \to \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{59}$$

Mit Einsetzen von ω folgt dann:

$$\frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{\hbar x^2}{2m\sigma^4} \tag{60}$$

Hierfür bietet sich die Ortsdarstellung an, da sowieso eine x-Abhängigkeit durch den Operator vorliegt. Abkürzend nutzen wir für den Operator $\hat{V}$

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = \langle\psi|\, \hat{V}\, |\psi\rangle \tag{61}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \frac{\hbar x^2}{2m\sigma^4}\psi(x)\mathrm{d}x \tag{62}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\sigma^4}\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}_n^2 H_n^2(x/\sigma)x^2 \exp\left\{-x^2/\sigma^2\right\}\mathrm{d}x \tag{63}$$

n=0:

$$= \frac{\hbar}{2m\sigma^4}\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}_0^2 H_0^2(x/\sigma)x^2 \exp\left\{-x^2/\sigma^2\right\}\mathrm{d}x \tag{64}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\sigma^4}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} x^2 \exp\left\{-x^2/\sigma^2\right\}\mathrm{d}x \tag{65}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m\sigma^2} \tag{66}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \tag{67}$$

Also ergibt sich das gleiche Ergebnis wie oben. Selbiges gilt für n=1:

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle_{n=1} = \frac{3\hbar\omega}{4} \quad ✓ \tag{68}$$

Dieses Ergebnis wirkt zunächst überraschend, ergibt intuitiv aber Sinn, da beim harmonischen Oszillator zum Beispiel mit dem Virialsatz auf Dauer gleiche Mittelwerte von kinetischer und potenzieller Energie vorliegen. Es ist daher naheliegend, dass dies auch hier für die Erwartungswerte gelten muss. Die Varianzen sind für den Fall der potenziellen Energien identisch wie in (56)(57).

c) Der Erwartungswert ist einfach zu bestimmen. Wir können die Operatoren wieder einsetzen, die Linearität des Integrals verwenden. Anschließend findet man:

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{n=0} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad ✓ \tag{69}$$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{n=1} = \frac{3\hbar\omega}{2} \quad ✓ \tag{70}$$

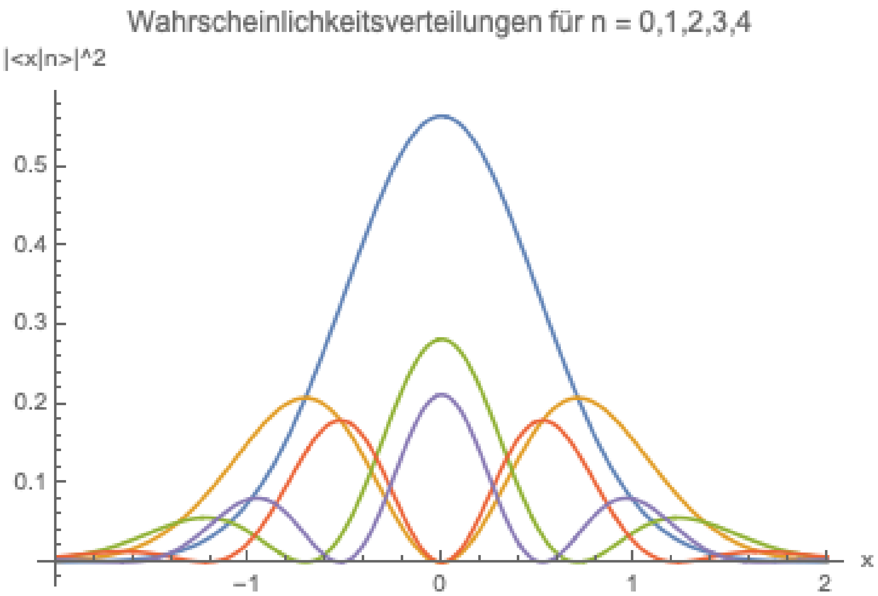
Für die Varianz nutzen wir aus, dass ψ_n die Energieeigenfunktionen sind. Damit folgt aber direkt aus der Vorlesung, dass die Varianz für $\hat{H}$ verschwinden muss, da $\hat{H}$ gerade der Operator für die Gesamtenergie ist.
Somit sollten Messungen der Gesamtenergie bzw der Eigenenergiezustände 'scharf' sein. ✓

d) $\langle x|n\rangle$ ist in der Aufgabenstellung gegeben als

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \mathcal{N}_n H_n\left(\frac{x}{\sigma}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \tag{71}$$

Da dieser Ausdruck rein reell ist, lässt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung einfach als dessen Quadrat berechnen

$$|\langle x|n\rangle|^2 = \mathcal{N}_n^2 H_n^2\left(\frac{x}{\sigma}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{\sigma^2}}. \tag{72}$$



die äußeren Woods sollten die höchsten sein .–

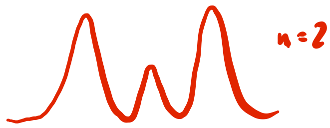


Abbildung 3: as

3/3

3. Fragen zur Vorlesung

- Juan: Was ist die ”Welle” einer Wellengleichung? In anderen Worten, welche Eigenschaft eines Zustands ”wellt”?
- Marius: Was bedeuten Erwartungswert und Varianz in Bezug auf beispielsweise einen Impuls- oder Hamiltonoperator? Was genau wird hierbei „erwartet“?
- Leo:
  Warum betrachten wir fast immer nur Gauss-Wellenpakete? Es ist ja anscheinend vergleichsweise einfach, mit ihnen zu rechnen, aber inwiefern haben sie physikalische Realität?

3/3