3. Teilchen in der Box

a)

Lösen der Schrödingergleichung:

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{1}$$

Bekannte Lösungsfunktion (keine Cosinus-Terme aufgrund der (linken) Randbedingung):

$$\psi = Asin(kx) \tag{2}$$

Daraus ergipt sich gleich die Dispersionsrelation:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{3}$$

Verwendet man die Randbedingungen $\psi(0) = \psi(L) = 0$, ergibt sich für k:

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad mit \;\; n = 1, 2, 3... \tag{4}$$

Eigenfuntionen und Eigenenergien sind daher:

$$\psi_n = Asin(\frac{n\pi x}{L}) \tag{5}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \tag{6}$$

Durch normieren ($|\psi|^2 = 1$) erhält man:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \tag{7}$$

b)

Der Anfangszustand des Systems ist: $\phi = \frac{1}{\sqrt{L}}(sin(\frac{\pi x}{L}) + sin(\frac{2\pi x}{L}))$.
Der Erwartungswert wird folgendermaßen berechnet (wobei $\hat{x}$ der Ortsoperator ist):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \hat{x}\, \phi \,\mathrm{d}x = \tag{8}$$

$$= \frac{1}{L}[\int_0^L xsin^2(\frac{\pi x}{L})\mathrm{d}x + \int_0^L 2x\, sin(\frac{\pi x}{L})sin(\frac{2\pi x}{L})\mathrm{d}x + \int_0^L xsin^2(\frac{2\pi x}{L})\mathrm{d}x] = \tag{9}$$

$$= \frac{1}{L}[\frac{L^2}{4} - \frac{16L^2}{9\pi^2} + \frac{L^2}{4}] = L(\frac{1}{2} - \frac{16}{9\pi^2}) \tag{10}$$

Hinweis: Der Erwartungswert muss immer reell sein!

c)

Der Erwartungswert wird folgendermaßen berechnet (wobei $\hat{p}$ der Impulsoperator ist):

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \hat{p}\, \phi \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x}\, \phi \,\mathrm{d}x \tag{11}$$

Einsetzen und ausmultiplizieren führt auf vier Terme der Form:

$$\int_0^{\pi} sin(u) cos(u) \mathrm{d}u = 0 \tag{12}$$

$$\int_0^{\pi} sin(2u) cos(2u) \mathrm{d}u = 0 \tag{13}$$

$$\int_0^{\pi} sin(2u) cos(u) \mathrm{d}u = \frac{4}{3} \tag{14}$$

$$\int_0^{\pi} 2 sin(u) cos(2u) \mathrm{d}u = -\frac{4}{3} \tag{15}$$

Daher ergibt sich:

$$\langle p \rangle = 0 \tag{16}$$

d)

Allgemeine Zeitentwicklung:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \psi(x) \tag{17}$$

Daher für die Eigenfunktionen:

$$\psi_n(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \psi_n(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) \tag{18}$$

Und für den Zustand des Systems:

$$\phi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \phi_(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \psi_1(x) + e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \psi_2(x)) \tag{19}$$

Ergebnisse aus a) einsetzen:

$$\phi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} (e^{-i \frac{\hbar \pi^2}{2mL^2} t} sin(\frac{\pi x}{L}) + e^{-i \frac{\hbar \pi^2 4}{2mL^2} t} sin(\frac{2\pi x}{L})) \tag{20}$$

4. Dispersion eines Wellenpakets

a)

Zunächst wird $\langle p \rangle$ berechnet:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}\, \psi \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi \, \mathrm{d}x = \tag{21}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi) \, \mathrm{d}x = \frac{-i\hbar}{2\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}}\, e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} \,|_{-\infty}^{\infty} = 0 \tag{22}$$

Dann $\langle p^2 \rangle$:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}^2 \, \psi \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \, \mathrm{d}x = ... = \frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} \tag{23}$$

(in "..." kommt man auf Integrale der Form $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du$ und $\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-u^2} du$)
Daraus folgt:

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} - 0^2} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \tag{24}$$

Man sieht gleich: $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$

b)

i)

Darstellung einer Wellenfunktion als Superposition ebener Wellen:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} \, \mathrm{d}k \tag{25}$$

Wobei $c(k)$ durch die Fouriertransformation von $\psi(x, 0)$ gegeben ist.

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}}\, e^{-ikx} \, \mathrm{d}x \tag{26}$$

Dies ist auch die Impulsdarstellung des Zustandes. Um das Integral zu lösen, kann man auf vollständige Quadrate ergänzen:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\frac{x}{2\sigma_x} + ik\sigma_x)^2}\, e^{-k^2\sigma_x^2} \, \mathrm{d}x = ... = \frac{\sqrt{2\sigma_x}}{\sqrt[4]{2\pi}} e^{-k^2\sigma_x^2} \tag{27}$$

Somit ist die Darstellung des Wellenpakets gegeben durch:

$$\psi = \frac{\sqrt{2\sigma_x}}{\sqrt{2\pi}\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2\sigma_x^2} e^{ikx} \,\mathrm{d}k \tag{28}$$

Löst man diese Integral, so erhält man wieder den Zustand $\psi(x,0)$ aus der Angabe.

ii)

Um den Zustand als Superposition von zeitabhängigen ebenen Wellen darzustellen geht man ähnlich vor wie zuvor:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{i(kx-\omega t)} \,\mathrm{d}k \tag{29}$$

Unter beachtung von $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ ergibt sich mit einsetzen von $c(k)$ aus i):

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{2\sigma_x}}{\sqrt{2\pi}\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2\sigma_x^2} e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} \,\mathrm{d}k \tag{30}$$

Lösen wieder durch ergänzen auf vollständige Quadrate:

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{2\sigma_x}}{\sqrt{2\pi}\sqrt[4]{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2+\frac{i\hbar t}{2m})}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(k\sqrt{\sigma_x^2+\frac{i\hbar t}{2m}} - \frac{ix}{\sqrt{\sigma_x^2+\frac{i\hbar t}{2m}}})^2} \,\mathrm{d}k \tag{31}$$

Lösen des Integrals und Kürzen ergibt:

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{\sigma_x}}{\sqrt[4]{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2+\frac{i\hbar t}{2m})}} \tag{32}$$

iii)

Das Betragsquadrat einer Wellenfunktion ist gegeben durch: $|\psi|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \,\mathrm{d}x$ Man muss also den komplexen Nenner in der Exponentialfunktion auflösen und erhält:

$$\frac{-x^2}{\sigma_x^2 + \frac{i\hbar t}{2m}} \frac{\sigma_x^2 - \frac{i\hbar t}{2m}}{\sigma_x^2 - \frac{i\hbar t}{2m}} = \frac{-x^2\sigma_x^2}{\sigma_x^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}} + iA \tag{33}$$

Der komplexe Term iA ist unwichtig, da er durch die komplexe Konjugation wegfällt. Berechnet man nun das Betragsquadrat, erhält man mit $\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x}$

aus a):

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{\sigma_x}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_x^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2x^2\sigma_x^2}{4(\sigma_x^4+\frac{\hbar^2 t^2}{4m^2})}} \,\mathrm{d}x = \tag{34}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_p^2 \frac{t^2}{m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2(\sigma_x^2+\sigma_p^2\frac{t^2}{m^2})}} \,\mathrm{d}x = ... = 1 \tag{35}$$

Berechnet man nun im Vergleich $|\psi(x,0;\sigma_x^2)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi \,\mathrm{d}x$, erhält man:

$$|\psi(x,0;\sigma_x^2)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \,\mathrm{d}x = ... = 1 \tag{36}$$

Es ist leicht zu sehen, dass einfach σ_x^2 den Platz von $\sigma_x^2 + \sigma_p^2 \frac{t^2}{m^2}$ eingenommen hat.

Interpretation: Im Impulsraum bleibt das Wellenpaket konstant, siehe $c(k)$. Im Ortsraum gibt es Dispersion und somit "zerfließt" das Wellenpaket. Die Unschärferelation ist bei $t = 0$ genau erfüllt ($\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}$). Bei $t > 0$ liegt keine Minimum-Unschärfe Wellenfunktion mehr vor ($\sigma_x\sigma_p > \frac{\hbar}{2}$).