liefert durch Ablesen für die doppelte Varianz

$$2(\Delta x)^2 = \frac{\sigma^4 + 16\beta^2 t^2}{2\sigma^2},$$

woraus sich die Standardabweichung ("Unschärfe") des Ortes im Zustand $\psi(x,t)$ ergibt:

$$\Delta x(t) = \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} + \frac{4\beta^2}{\sigma^2} t^2}. \tag{2.33}$$

Die Breite des Wellenpaketes nimmt also mit der Zeit t zu, das Wellenpaket "zerfließt", wie bereits zu Beginn vermutet. Für große Zeiten wächst die Standardabweichung linear mit der Zeit, anders als bei der Diffusion eines klassischen Teilchens ($\sim \sqrt{t}$).

Aufgabe: Man bestimme die Unschärfe im Orts- und Impulsraum und untersuche die Heisenberg-Unschärfe-Relation. Wie hängt das Unschärfeprodukt von k_0 und von der Zeit ab?
Aufgabe: Man wiederhole die Rechnung für eine exponentiell abfallende Anfangsverteilung.

2.7 Endliche räumliche Ausdehnung von Mikroteilchen

Wir hatten bereits in Abschnitt 1.1 gesehen, dass sich die Probleme der klassischen Beschreibung von Mikroteilchen beheben lassen, wenn die Teilchen eine endliche Ausdehnung besitzen würden. Mathematisch kann dies durch ein Wellenpaket dargestellt werden. Den Zusammenhang zwischen Breite des Paketes im Orts- und Impulsraum diskutieren wir im nächsten Abschnitt. Die physikalische Ursache dieser endlichen Breite sind verknüpft mit der Unschärferelation (die diskutieren wir ausführlich später). Mathematisch folgt die endliche Breite bereits aus der Fouriertransformation, die Ort und Impuls (sowie Zeit und Frequenz) verknüpft.

2.7.1 Wahrscheinlichkeitsamplitude und Unschärfe

Wir wollen qualitativ noch einmal den Begriff der Unschärfe aufgreifen.

A) klassisches Teilchen: Für ein klassisches Teilchen lassen sich "im Prinzip" die Ortsunschärfe (oder Ortsungenauigkeit) Δr und die Impulsunschärfe Δp beliebig verkleinern (im Rahmen der klassischen Mechanik wird angenommen, dass der aktuelle Phasenraumpunkt eines Teilchens beliebig genau bestimmbar ist). Dies ist mit der oben betrachteten Lösung der Schrödingergleichung für das (typische) Beispiel eines Gaußschen Wellenpaktetes nicht vereinbar.

B) freies Mikroteilchen: Unsere erste Beschreibung eines freien Mikroteilchens hatten wir an Hand des Doppelspaltexperiments mit einer ebenen Welle realisiert. Nun betrachten wir eine ebene Lichtwelle:

$$\underline{E}(x,t) = \underline{E}_0 e^{-i\omega t + ikx}$$

Hierbei haben wir nur einen freien Parameter, da

$$\omega(k) = c \cdot k$$

als Lösbarkeitsbedingung für die Maxwell-Gleichung folgte. Wir bestimmen nun die Frequenz ω und die Wellenzahl k für Mikroteilchen und bringen die Interferenzbilder für Licht und Teilchen

für alle x, z und t zur Deckung. Nun variieren wir die Beschleunigungsspannung U und damit auch die kinetische Energie. Als Resultat erhalten wir folgende ebene Welle:

$$\psi_{\text{frei}}(x,t) = \psi_0 e^{-i\frac{E(p)}{\hbar}t + i\frac{p}{\hbar}x} \tag{2.34}$$

Hieraus folgt dann $E = \hbar\omega$ und $\underline{p} = \hbar\underline{k}$. Man erhält also das gleiche Resultat wie für Photonen (vergleiche hierzu Einsteins Erklärung der Photoeffekts). Diskutieren wir nun die Darstellung durch Gleichung (2.34). Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist gegeben durch:

$$\rho_{\text{frei}}(x,t) = |\psi_{\text{frei}}|^2 = |\psi_0|^2. \tag{2.35}$$

Wir haben also eine orts- und zeitunabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Die Impulsunschärfe ist gleich 0, da der Impuls in (2.34) fixiert ist. Da jedoch alle Aufenthaltsorte gleich wahrscheinlich sind, gilt für die Ortsunschärfe:

$$\Delta x \to \infty.$$

Hierzu sind noch einige Bemerkungen zu machen. Die obige ebene Welle beschreibt eine unendlich ausgedehnte Wahrscheinlichkeitsamplitude, die darüber hinaus auch für alle Zeiten, $-\infty < t < \infty$ existiert. Dies ist ein Modell, welches physikalisch nicht realisierbar ist (Vergleiche hierzu die divergente Energie einer ebenen monochromatischen Welle in der Elektrodynamik). Auch ist für Gleichung (2.35) die Normierung problematisch. Die korrekte Lösung besprechen wir später. Wenden wir uns nun dem realistischen Fall C) zu.

C) Räumlich lokalisiertes Teilchen: Betrachten wir nun ein Mikroteilchen, welches wir räumlich lokalisieren können. Dies konnten wir ja zum Beispiel nach der Beugung am Spalt.

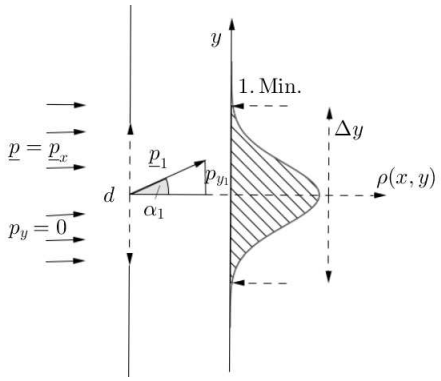


Abbildung 2.11: räumliche Lokalisierung eines Mikroteilchens bei der Beugung am Spalt

Vor der Beugung liegt der gesamte Impuls in x-Richtung vor und wir haben keine Komponente in y-Richtung. Dafür ist y-Komponente vor der Beugung unscharf. Nach der Beugung können wir den Impuls nur noch durch

$$0 \leq |p_{y_1}| \leq p_y(\alpha_1) = \Delta p_y$$

abschätzen. Das heißt, indem wir die Ortsunschärfe auf Δy begrenzt haben, hat sich die Impulsunschärfe auf Δp_y vergrößert. Aus der Wellenoptik wissen wir:

$$\sin\alpha_1 = \frac{\lambda}{d},$$

und es gilt auch:

$$\frac{p_{y_1}}{|\underline{p}_1|} = \sin\alpha_1 \,.$$

Mit Sicherheit gilt auch $\Delta y \gtrsim d$. Damit haben wir folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned}\Delta y \cdot \Delta p_y &\gtrsim d \cdot p_1 \sin\alpha_1 \\ &= d \cdot \hbar \cdot k\frac{\lambda}{d} \\ &= \hbar k \frac{2\pi}{k}\end{aligned}$$

Wir erhalten also den Spezialfall des allgemeines Gesetzes der Unschärfe von Heisenberg:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim h \tag{2.36}$$

Eine geringere Unschärfe ist also nicht möglich[13]. Dies ist kein Defizit der Messapparatur oder der Messmethode, sondern eine Eigenschaft der Mikroteilchen. Also auch eine Eigenschaft der Natur. Diese Eigenschaft der Unschärfe hat jede Welle. Wir müssen hierfür nur oben $\underline{p}$ durch $\frac{k}{\hbar}$ ersetzen. Man kann die Unschärfe als Eigenschaft der Fourier-Transformation sehen. Sie folgt aus dem Zusammenhang zwischen dem direkten und dem Fourier-Raum. Schauen wir uns hierzu noch einmal eine monochromatische Welle für ein festes t an.

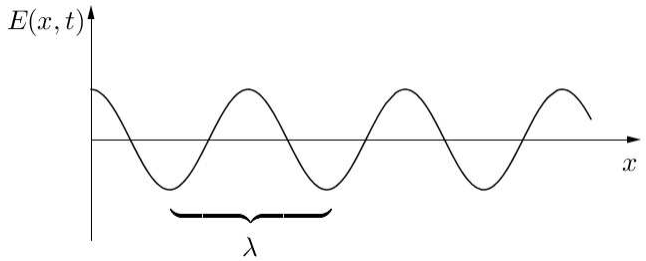


Abbildung 2.12: Monochromatische Welle für ein festes t.

Die Fourier-Transformation liefert eine scharfe Wellenzahl k_0.

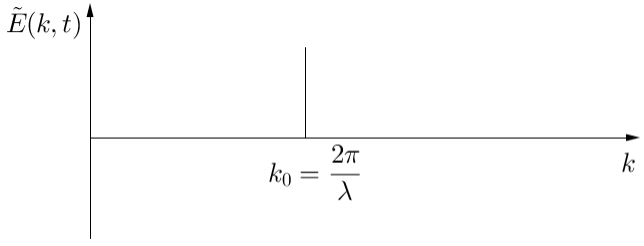


Abbildung 2.13: Spektrum einer monochromatischen Welle im k-Raum

Die Fourier-Transformation in den Variablen t und ω verläuft analog. Betrachten wir nun nicht mehr eine monochromatische Welle, sondern eine Überlagerung aus mehreren monochromatischen Wellen mit unterschiedlichen Wellenlängen so ergibt sich ein Wellenpaket mit einer endlichen Breite in x-Richtung.

[13]Diese Abschätzung ist noch grob. Die genaue Rechnung, sowie die Anwendung auf ein Gaußsches Wellenpaket unten zeigen, dass die korrekte untere Grenze der Unschärfe $\hbar/2$ beträgt

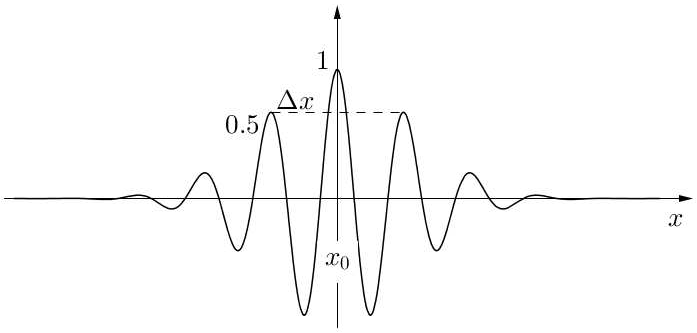


Abbildung 2.14: Nicht-monochromatisches Wellenpaket

Dieses hat im Fourier-Raum ebenfalls eine endliche Breite.

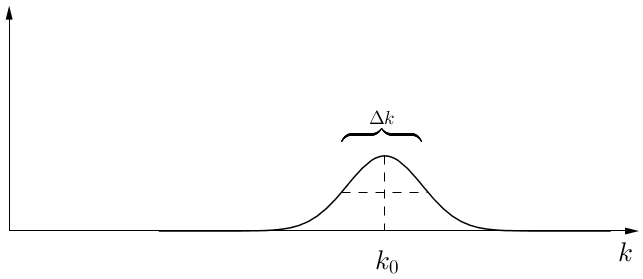


Abbildung 2.15: Gaußförmige Verteilung im k-Raum

Für den Zusammenhang der beiden Breiten folgt:

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi$$

Analog gilt für den Zusammenhang des Zeit- und Frequenzraums:

$$\Delta t \cdot \Delta \omega = 2\pi$$

Wir sehen also, dass der Zusammenhang der Breiten im Orts- und Impulsraum eine direkte Konsequenz der Fouriertransformation ist (Ort und Wellenzahl bzw. Zeit und Frequenz sind Fourierkonjugierte Größen). Aus diesem Grund ist auch die Heisenberg-Unschärfe-Relation kein spezifisches quantenmechanisches Phänomen sondern eine Konsequenz der Fourier-Transformation.

2.7.2 Ursache der endlichen Ausdehnung von Mikroteilchen

Wie wir im Abschnitt 1.1 gesehen haben, gibt es keine Möglichkeit, die Phänomene der Mikrowelt mit einem klassischen Modell zu verstehen, das die Teilchen als "punkt-förmig" ansieht. Dies würde unweigerlich zum Kollaps der Elektronen im Atom führen (Divergenz der Wechselwirkung-Energie), die in der Natur nicht beobachtet wird. Die natürliche Lösung des Problems erfolgt dadurch, dass die Teilchen – zusätzlich zur attraktiven Wechselwirkung mit den Atomkernen – eine kinetische Energie besitzen, die den Kollaps zu einem Punkt (der die potentielle Energie minimieren würde) verhindert. Betrachten wir dazu die rechte Seite der Schrödingergleichung eines freien Teilchens ($V = 0$), die nichts anderes als den Operator der kinetischen Energie, angewendet auf die Wellenfunktion, darstellt (ein-dimensionaler Fall),

$$\hat{T}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \sim -K(x). \tag{2.37}$$

Dieser Ausdruck ist proportionoal zur lokalen Krümmung $K(x)$ (mal -1). Für die charakteristische Form eines Wellenpaketes, das wir oben betrachtet haben, ist die Krümmung im zentralen Bereich, der die Hauptbeiträge zur Wahrscheinlichkeitsdichte enthält, überall negativ und dieser Ausdruck daher immer positiv, vergleiche Abb. 2.9. Die kinetische Energie (hier die räumlich delokalisierte Dichte der kinetischen Energie) ist also positiv, wie aus der klassischen Mechanik bekannt. Interessanterweise besitzt ein quantenmechanisches Teilchen aber – anders als ein klassisches Teilchen – bereits eine kinetische Energie, wenn es sich in Ruhe befindet. Diese Energie verschwindet nur, wenn die Krümmung verschwindet, also bei unendlicher Ausdehnung des Teilchens (was physikalisch nicht möglich ist). Umgekehrt würde für ein klassisches Punktteilchen die Krümmung unbegrenzt wachsen und die kinetische Energie divergieren. Auch dies ist nicht möglich, da die Natur (spontan) nur Zustände realisiert, die die Energie minimieren.

Für ein Elektron in der Nähe des Atomkerns (attraktive potentielle Energie) $V_{ek} < 0$ ergibt sich also eine Gesamtenergie $H = V_{ek} + T$, die sich als räumliches Mittel über die ausgedehnte Wellenfunktion ergibt,

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \left\{ V_{ek}(x) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{x^2}^2 \right) \right\} \psi(x)\,. \tag{2.38}$$

Während der erste Term negativ ist, ist der zweite positiv, und die Wellenfunktion nimmt die Form an, die diese Gesamtenergie minimiert (im Grundzustand). Dies führt auf die bekannten Wellenfunktionen des Elektrons im Atom, die eine Ausdehnung der Größenordnung des Bohr-Radius aufweisen. Gleichzeitig wird das unendliche Auseinanderfließen wie bei einem freien Teilchen hier durch das attraktive Kernpotential verhindert.
Durch diese einfache Lösung (endliche Ausdehnung von Mikroteilchen aufgrund ihrer quantenmechanischen kinetischen Energie) sind alle fundamentalen Problem der klassischen Beschreibung behoben. Diese qualitativen Betrachtungen werden in den folgenden Kapiteln durch strenge Rechnungen im Rahmen der Schrödingergleichung bestätigt.
Abschließend noch eine Bemerkung zum häufig diskutierten *"Welle-Teilchen-Dualismus"*[14]. Dieser wird oft missverstanden als ein Verhalten, das *entweder* durch Teilchen- oder durch Welleneigenschaften charakterisiert ist, wo sich das Objekt zu einer Zeit wie eine Welle, zu einer anderen wie ein Teilchen verhält. Dies ist falsch. Charakteristisch für die Mikrowelt ist dagegen die fundamentale Eigenschaft einer *endlichen räumlichen Ausdehnung aller Objekte*. Die Propagation als Wellenpaket trägt dabei Züge der Dynamik klassischer Teilchen. Die Superposition ebener monochromatischer Wellen im Wellenpaket enthält *gleichzeitig* die Möglichkeit zur Interferenz. Wie stark Welleneigenschaften ausgeprägt sind und wie groß die räumliche Ausdehnung ist, hängt eintscheidend von der Umgebung des Teilchens, also von den Randbedingungen und äußeren Einflüssen – externen Potentialen oder Feldern – ab. Die mathematische Antwort auf diese Fragen ist durch die Schrödingergleichung gegeben.

2.8 Teilchen im Kastenpotential. Diskretes und kontinuierliches Energie-Spektrum

Wir kommen nun zur ersten physikalischen Anwendung der stationären Schrödinger-Gleichung, bei der wir ein Mikroteilchen in einem externen Potential $V(x)$ betrachten. Um dies zu motivieren, geben wir zunächst einige Beispiele.

[14] Genausowenig existiert ein "Welle-Teilchen-Dualismus" beim Licht. Auch hier treten beide Eigenschaften simultan auf und werden durch die Maxwell-Gleichungen für das quantisierte elektromagnetische Feld beschrieben.

1. Die Elektronen im Atom wechselwirken mit dem Potential, welches durch die Coulombwechselwirkung mit dem Kern erzeugt wird.

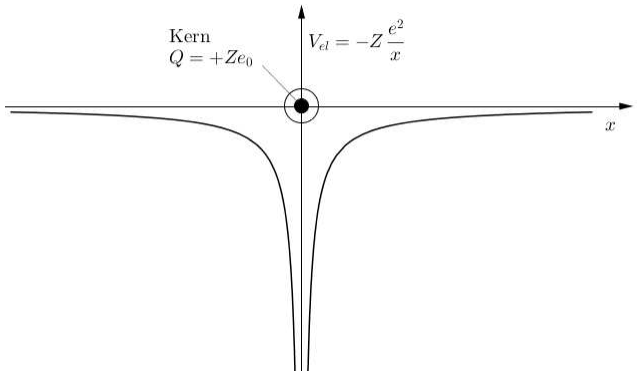


Abbildung 2.16: Wechselwirkungspotential $V_{ei}(x)$ des Elektrons mit dem Atomkern (eindimensionales Modell)

2. Auch Elektronen in Halbleiter-Nanostrukturen erfahren charakteristische Potentiale mit Bindungscharakter.

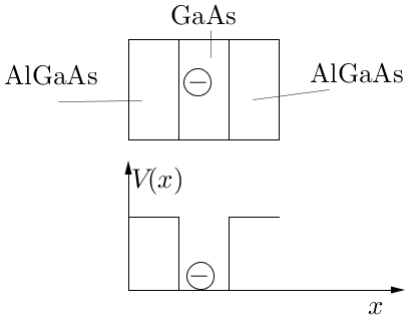


Abbildung 2.17: Halbleiter-Heterostruktur und zugehöriges Potential (schematisch)

3. Atome in kalten Gasen in einem confinement-Potential oder optischem Gitter (durch interferierende Laser erzeugt).

4. Ein weiteres Beispiel sind Quarks, die durch die starke Wechselwirkung in den Baryonen lokalisiert sind (bag model).

Was ist zu erwarten? Wir werden kurz unsere Erwartungen besprechen, wobei wir auf klassische Teilchen in einem externen Potential und auf Licht in einem Resonator eingehen.

1. **Klassisches Teilchen:** Hier gilt die Energieerhaltung, also:

$$E = \frac{m}{2}v^2 + V(x) = \text{const.}$$

Zeichnen wir ein typisches Potential wie in der Abbildung unten, so gibt es klassisch 3 Möglichkeiten (nur zwei sind realisierbar).

(a) Wenn die Gesamtenergie größer als das Maximum des Potentials ist, so liegt eine ungebundene Bewegung vor.

$$E > V_{max}$$

(b) Liegt die Gesamtenergie auf Höhe des Potentials so gibt es eine gebundene Bewegung und in Folge dessen Oszillationen mit den Wendepunkten x_0 und x_1.

$$V_{min} < E < V_{max}$$

(c) Der Fall

$$E < V_{min}$$

ist aufgrund der Energieerhaltung nicht möglich, da die kinetische Energie keine negativen Werte annehmen kann.

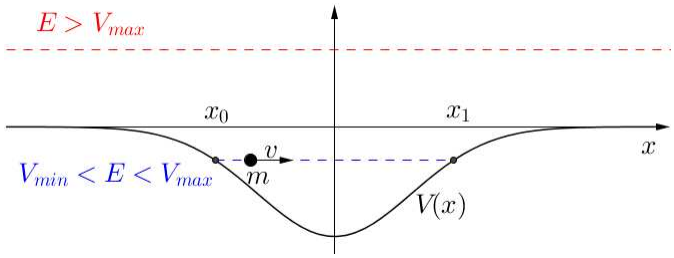


Abbildung 2.18: Mögliche klassische Zustände eines Teilchens in einem Potential $V(x)$.

2. **Resonator:** Wie angekündigt besprechen wir nun noch kurz das Verhalten von Licht im Resonator. Einen einfachen gedanklichen Aufbau erhält man, wenn man ein den beiden Enden einer Strecke L einen Spiegel positioniert. Das Licht wird dann an den Spiegeln reflektiert und interferiert mit sich selbst. Es gibt nur dann keine Auslöschung, wenn konstruktive Interferenz vorliegt. Man erhält stehende Wellen also für die Resonanzbedingung

$$E(0) = E(L) = 0$$

mit

$$L = n\frac{\lambda}{2}$$

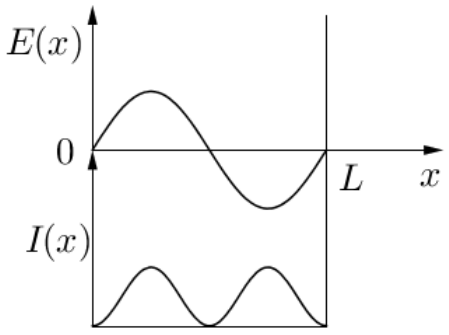


Abbildung 2.19: Stehende Welle des elektromagnetischen Feldes und ihre Intensitätsverteilung in einem Resonator für den Fall undurchdringlicher (vollständig reflektierender) Wände.

Wir werden im Folgenden verschiedene relevante Varianten des eindimensionalen Kastenpotentials besprechen.

2.8.1 A) Eindimensionaler Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden

Wir betrachten zunächst den einfachsten Fall—ein Potential der Form (s. Abb. 2.20):

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & , \ x \in [-a, a] \\ \\ \infty & , \ \text{sonst} \end{cases}$$

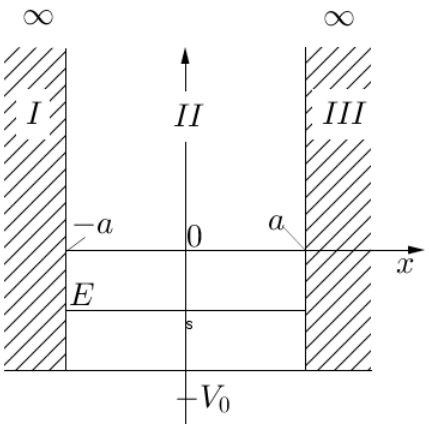


Abbildung 2.20: Eindimensionaler Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden. Die Energie-Eigenwerte E werden relativ zum Boden des Potentials angegeben, d.h. $V_0 \to 0$.

Die Breite des Kasten ist also $L = 2a$. Die Bereiche I und III sind nicht zugänglich, da das Teilchen nicht in eine unendlich hohe Barriere eindringen kann. Wir müssen also nur den Bereich II untersuchen. Dort hat der Hamilton-Operator folgende Gestalt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_0$$

Damit wird die stationäre Schrödinger-Gleichung im Intervall $[-a, a]$ zu:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_0\right)\psi_E(x) &= E \cdot \psi_E(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E''(x) &= (V_0 + E)\psi_E \\ \psi_E''(x) + \alpha_E\psi_E = 0, \qquad &\text{mit} \quad \alpha_E = (V_0 + E)\frac{2m}{\hbar^2} \geq 0. \end{aligned}$$

Hierbei ist $V_0 + E = E - (-V_0)$ der Energieabstand von E zu V_0. An die Lösung ψ_E der obigen Differentialgleichung stellen wir folgende Bedingungen:

- Wie bereits erwähnt, sind die Bereiche I und III nicht zugänglich. Damit ist für $x \notin [-a, a]$ $\psi_E(x) \equiv 0$. Da die Wellenfunktion aber stetig sein soll, muss gelten:

$$\psi_E(-a) = \psi_E(a) = 0$$

- Außerdem gelte wie üblich die Normierungsbedingung:

$$\int_{-a}^{a} \psi_E^*(x) \cdot \psi_E(x) dx = 1.$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung erfolgt über einen e-Ansatz:

$$\psi_E(x) = Ce^{\mu x}$$

Hierbei ist C =const. und μ ein zu berechnender Parameter. Einsetzen in die Differential-Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned} \mu^2 + \alpha_E &= 0 \\ \mu^2 &= -\alpha_E \\ \mu &= \pm i\sqrt{\alpha_E} \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung muss eine Linearkombination dieser beiden Lösungen sein. Setze noch $k_E = \sqrt{\alpha_E}$:

$$\psi_E(x) = C_1 e^{ik_E x} + C_2 e^{-ik_E x}.$$

Hierbei sind $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ zunächst unabhängige Konstanten. Man hat nun noch drei unbekannte Größen in dieser Funktion zu spezifizieren. Zum Einen sind natürlich C_1 und C_2 zu bestimmen. Zum Anderen wissen wir auch noch nicht, welche Werte E annehmen kann. In Folge dessen ist also auch noch k_E unbestimmt. Diese Unbestimmtheiten lassen sich nun aus den oben aufgeführten Randbedingungen und der Normierungsbedingung berechnen. Nutzen wir zunächst die Randbedingungen:

$$\begin{aligned} 0 &= C_1 e^{ik_E a} + C_2 e^{-ik_E a}, \\ 0 &= C_1 e^{-ik_E a} + C_2 e^{ik_E a}. \end{aligned}$$

Lösbarkeitsbedingung:
Dies ist ein lineares homogenes Gleichungssystem für C_1 und C_2. Es besitzt genau dann nicht-triviale Lösungen ($C_1, C_2 \neq 0$), wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix gleich Null ist:

$$\det \begin{pmatrix} e^{ik_E a} & e^{-ik_E a} \\ e^{-ik_E a} & e^{ik_E a}, \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

und damit folgt:

$$0 \stackrel{!}{=} e^{2ik_E a} - e^{-2ik_E a} = 2i \sin 2k_E a.$$

Also erhalten wir die Lösbarkeitsbedingung zu:

$$k_n = \frac{n\pi}{2a} = \frac{n\pi}{L}, \tag{2.39}$$

mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ Hierbei haben wir $k_E \to k_n$ vorgenommen, um deutlich zu machen, dass die Energie aufgrund der Lösbarkeitsbedingung nur diskrete Werte annehmen kann:

$$\alpha_n = (V_0 + E_n)\frac{2m}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2.$$

Die diskreten Energie-(Eigen)Werte erhält man also zu:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2} - V_0.$$

Setzt man den Energie-Nullpunkt so, dass $V_0 = 0$ gilt, erhält man:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}. \tag{2.40}$$

In der Skizze 2.21 sind die möglichen Energien eingezeichnet. Man beachte, dass die Abstände nicht äquidistant sind. Die Energie, die zu $n = 0$ gehört, ist eingeklammert, weil wir jetzt feststellen werden, dass dieser Eigenwert nicht möglich ist.

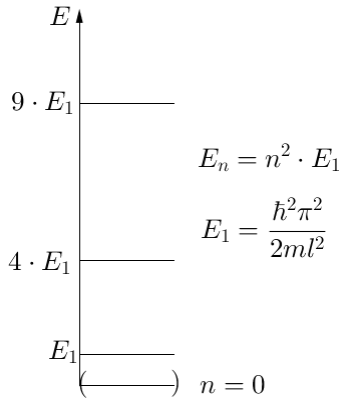


Abbildung 2.21: Diskretes Energie-Spektrum im eindimensionalen Kasten mit unendlich hohen Wänden (Fall A).

Für $n = 0$ gilt nämlich

$$\Psi_0(x) = C_1 + C_2 = \text{const.}$$

Wir müssen aber nicht nur die Randbedingungen, sondern auch die Normierungsbedingung beachten:

$$1 = \int_{-a}^{a} |C_1 + C_2|^2 dx.$$

Hieraus folgt, dass nicht gleichzeitig $C_1 = 0$ und $C_2 = 0$ gelten kann. Dies widerspricht aber zum Beispiel der Randbedingung $\psi_E(a) = 0$. Der Zustand mit $n = 0$ ist also nicht möglich. Das Teilchen besitzt also immer eine positive (kinetische) Energie $E > 0$. In unserem Fall folgt für das endliche Energieminimum

$$E_{min} = E_1 > 0,$$

und damit auch ein endliches Minimum des Impuls-Eigenwertes:

$$p_{min} = \frac{\hbar\pi}{L}.$$

Dies ist ein fundamentaler Unterschied zur klassischen Mechanik, in der Energie und Impuls gleich 0 sein können. Diese *Nullpunktsfluktuation* ist ein reiner Quanteneffekt und findet sich in allen Quantensystemen wieder. Wir können sie in Zusammenhang mit der *Unschärfe* erklären. Zuvor definieren wir den Begriff der Unschärfe noch etwas genauer.

Quantenmechanische "Unschärfe":
Unter Unschärfe einer Größe A (Zufallsprozess) verstehen wir die Standardabweichung σ_A

(Wurzel aus der Varianz) dieser Größe. Für einen Zufallsprozess (und die Quantenmechanik beschreibt Zufallsprozesse) ist die Standardabweichung einer Größe A gegeben durch (wir geben die beiden gebräuchlichen Notationen an):

$$\sigma_A = \Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}.$$

Da die Mittelwertbildung linear ist, gilt für das Argument der Wurzel (die Varianz):

$$\sigma_A^2 = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

Hierbei verstehen wir unter dem Mittelwert des Quadrats der Größe A:

$$\langle A^2 \rangle = \int \psi^*(x) A^2 \psi(x) dx. \tag{2.41}$$

Da – wie wir im folgenden Kapitel sehen werden – in der Quantenmechanik physikalische Größen durch Operatoren beschrieben werden, sind in diesen Definitionen die Funktionen A und A^2 durch die Operatoren $\hat{A}$ bzw. $\hat{A}^2$ zu ersetzen.
Kommen wir nun zurück zur Frage, was die Nullpunktenergie mit der Unschärfe zu tun hat. Die Position des Teilchens ist innerhalb des Kastens unbestimmt. Die Ortsunschärfe ist also von der Ordnung $\Delta x = L$. Die Impulsunschärfe ist nun eben dieser minimal mögliche Impuls $\Delta p = p_{min}$ (für den Zustand ψ_1, mit der minimalen Energie, sonst größer). Das Produkt der Unschärfen ist dann[15]:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \begin{cases} p_{min} \cdot L = \frac{h}{2} & , \; n = 1 \, , \\ p_{min} \cdot L > \frac{h}{2} & , \; n > 1 \, . \end{cases} \tag{2.42}$$

Man bezeichnet den Zustand mit der minimalen Energie auch als *Grundzustand* und alle weiteren Zustände mit höheren Energien als angeregte Zustände[16].
Wir finden nun die Eigenzustände $\psi_n(x)$ zu diesen möglichen Energien E_n. Hierzu nutzen wir die Symmetrie des Systems aus, um die Rechnung zu erleichtern.
Symmetrie-Betrachtung. Parität:
Das Potential ist achsensymmetrisch bezüglich $x = 0$:

$$V(-x) = V(x).$$

Wir erwarten deshalb dieselbe Symmetrie bei allen physikalisch messbaren Größen. Insbesondere gilt also für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(x) = \rho(-x).$$

Da die Wahrscheinlichkeitsdichte aber gerade das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist, existieren 2 Typen von Lösungen für die Wellenfunktion, die wir mit + für eine gerade *Parität* und − für eine ungerade Parität bezeichnen:

1. $\psi_+(-x) = \psi_+(x)$,
2. $\psi_-(-x) = -\psi_-(x)$.

[15] **Aufgabe:** Dieses Resultat ist nur eine grobe Abschätzung. Für die akurate Bestimmung des Unschärfeproduktes berechne man die Varianzen σ_x und σ_p und deren Produkt für die Zustände ψ_n.

[16] Dies ist analog zu stehenden Wellen, wo überblicherweise die Bezeichnung Grundschwingung und Oberschwingungen verwendet wird.

Ist die Wellenfunktion gerade (Fall 1), so folgt aus der Konstruktion von ψ:

$$C_1 = C_2.$$

Ist die Wellenfunktion dagegen ungerade (Fall 2), so gilt:

$$C_1 = -C_2.$$

Hieraus ergibt sich:

1. Für gerade Parität haben die Eigenfunktionen die Form

$$\psi_{n_+} = 2C_1 \cos(k_n x).$$

   Damit hier noch die Bedingung $\psi_{n_+}(a) = 0$ erfüllt ist, muss n ungerade sein[17].

2. Für ungerade Parität erhalten wir analog

$$\psi_{n_-}(x) = 2iC_1 \sin(k_n x),$$

   wobei hier n gerade sein muss, um die Randbedingungen zu erfüllen.

Nun ist nur noch C_1 aus der Normierung zu finden. Für die geraden Lösungen folgt

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-a}^{a} 4|C_1|^2 \cos^2(k_n x)dx \\ &= 4|C_1|^2 \int_{-a}^{a} \frac{1}{2}(1 + \cos(2k_n x))dx = 4|C_1|^2 a \\ |C_1| &= \frac{1}{2\sqrt{a}}. \end{aligned}$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass dies nicht nur für alle ungeraden n gilt, sondern auch für die ungeraden Lösungen (für alle geraden n) und damit für alle $n \in \mathbb{N}$. Da die Phase der Konstanten C_1 irrelevant für alle Observablen ist, setzen wir diese zu Null und können allgemein

$$C_n = C = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

schreiben. In Abbildung 2.22 sind die Eigenfunktionen zu den verschiedenen Eigenwerten E_n skizziert.

[17] Man überprüfe dies an der Definition von k_n.

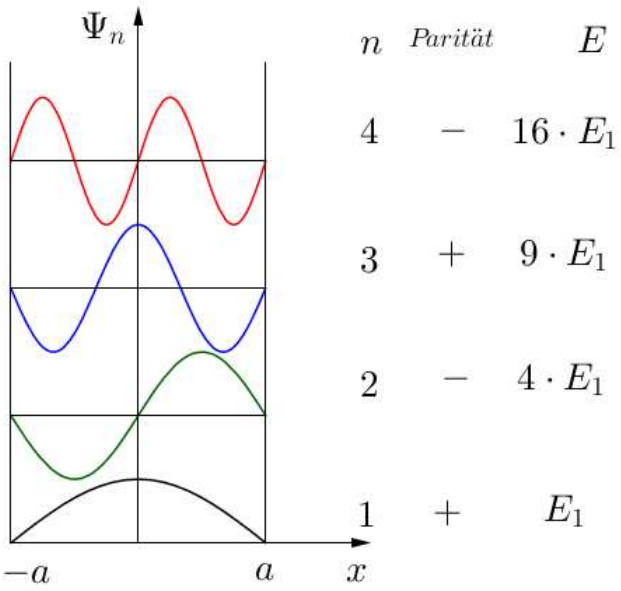


Abbildung 2.22: Eigenfunktionen ψ_n, Parität und Energieeigenwert am eindimensionalen Potential-Kasten unendlicher Tiefe. Die horizontale Achse wurde für die verschiedenen Energie-Eigenwerte vertikal verschoben.

Hat ein Zustand mehr Knoten (Nullstellen) in $[-a, a]$, so besitzt er eine höhere Krümmung und damit, nach der Schrödinger-Gleichung, eine größere kinetische Energie. Wir haben nun also die vollständige Lösung des Problems gefunden:

$$\{(E_1, \psi_1), (E_2, \psi_2), ...\}$$

Nun verbleibt die Frage, welcher der Zustände realisiert wird. Alle Paare (E_n, ψ_n) sind gleichberechtigte Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung. Aus der Linearität ebendieser ergibt sich mit dem Superpositionsprinzip die allgemeine Lösung zu:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n \psi_n(x), \tag{2.43}$$

mit $D_n \in \mathbb{C}$. Die allgemeine Lösung ist also ein Superpositions-Zustand. Der Spezialfall $D_n = \delta_{n,l}$ wird als *reiner Zustand* bezeichnet. Da die Zustände aber eine Orthogonalsystem in $[-a, a]$ bezüglich des Skalarproduktes

$$\psi_n \circ \psi_m = \int_{-a}^{a} \psi_n^*(x) \cdot \psi_m(x) dx,$$

bilden (das trifft hier zu, andernfalls sind die Eigenzustände leicht orthogonalisierbar), gilt:

$$\int_{-a}^{a} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m}.$$

Wegen der Normierungsbedingung folgt:

$$1 = \int_{-a}^{a} |\Psi(x)|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |D_n|^2 \underbrace{\int_{-a}^{a} |\psi_n(x)|^2 dx}_{=1},$$

und damit ist $|D_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit der Realisierung (der Besetzung) des Zustandes n. Die aktuellen Werte dieser Wahrscheinlichkeiten sind abhängig von der Präparation im Experiment.
Die allgemeine zeitabhängige Lösung ist schließlich gegeben durch:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}.$$

Man beachte, dass jede Funktion in dieser Superposition ihren eigenen e-Faktor hat. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte weist also, i.a. Interferenzterme auf.
Aufgabe: Berechnen Sie das Unschärfeprodukt von Ort und Impuls im Grundzustand mit Hilfe der Mittelwertformeln (2.41) und vergleichen Sie mit der Abschätzung (2.42).

2.8.2 B) Eindimensionaler Potentialkasten mit endlicher Tiefe

Der zuvor besprochene Fall mit unendlich hohen Wänden war ein Modellfall, der einige Effekte ausschließt. So kann das Teilchen den Kasten nicht verlassen, und es sind nur gebundene Bewegungen möglich. Wir kommen nun zum allgemeineren Fall einer endlichen Potentialhöhe/ -tiefe. Zur mathematischen Erleichterung behalten wir aber die als senkrecht angenommene Form des Potentials bei[18]. Definieren wir nun also ein Potential der Form:

$$V(x) = -V_0\Theta(a-|x|) = \begin{cases} -V_0 & , -a \le x \le a \\ 0 & , x \notin [-a,a] \end{cases}$$

Die Raumbereiche I und III sind nun ebenfalls zugänglich. Wie im Fall der Klassischen Mechanik gibt es verschiedene Fälle der Energie, die in der Skizze 2.23 eingezeichnet sind.

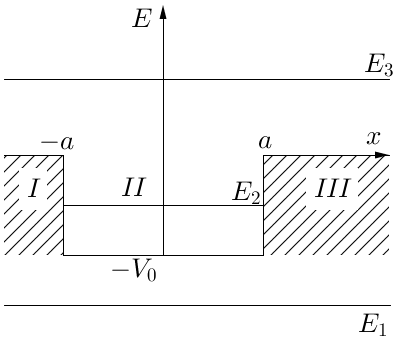


Abbildung 2.23: Potentialkasten endlicher Tiefe (Fall B) mit den drei Raumbereichen für die Lösung der Schrödingergleichung und den drei qualitativ verschiedenen Energiebereichen.

1. Der Fall der Energie $E_1 < -V_0$ ist unmöglich, da dies zu negativen kinetischen Energien führen würde.

2. Bereich E_2, d.h. $-V_0 \le E \le 0$. Hier liegt eine gebundene Bewegung vor, und wir erwarten diskrete Energien, analog zum Abschnitt A.

3. Im Fall E_3, d.h. $E > V_{max} = 0$, liegt eine ungebundene Bewegung vor, und man spricht hier auch von *Streuzuständen*. Wir werden sehen, dass hier kontinuierliche Energie-Eigenwerte möglich sind.

[18] Natürlich trägt dies Modellcharakter. Diese Einschränkung werden wir später fallen lassen, wenn wir uns mit dem harmonischen Oszillator beschäftigen.