

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Nico Bolse

M. Sc. Manuel Koppitz

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Festkörperelektronik

Lösung zum 3. Tutorium

Tutorien 08. - 12. Mai 2015

1. Leuchtende Quantenpunkte

In der Nanotechnologie spielen Quantenpunkte eine wachsende Rolle. Mathematisch gesehen entsprechen diese Punkte einem 3-dimensionalen Potentialtopf. Betrachten Sie einen würfelförmigen Quantenpunkt der Kantenlänge L .

- a) Zeigen Sie, dass der Betrag des Wellenvektors $|\vec{k}|$ eines Elektrons im Quantenpunkt nur diskrete Werte annehmen kann und berechnen Sie diese. Nehmen Sie zur Vereinfachung des Problems außerhalb des Quantenpunktes ein Potential $V = \infty$ an (d.h., das Elektron kann den Quantenpunkt nicht verlassen).

Ansatz für die Wellenfunktion: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$. Dies beschreibt die Überlagerung einer nach links und einer nach rechts laufenden ebenen Welle. Da das Potential zeitunabhängig ist, muss der zeitabhängige Term $e^{j\omega t}$ nicht weiter betrachtet werden.

Für das Potential gilt:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 \\ 0 & : 0 \leq x \leq L \\ \infty & : L < x \end{cases} \quad (1)$$

Aufgrund des unendlich hohen Potentials außerhalb des Quantenpunktes folgt:

$$\psi_x(0) = 0 \text{ und } \psi_x(L) = 0 \quad (2)$$

Einsetzen des Ansatzes liefert

$$\psi_x(0) = Ae^0 + Be^0 \stackrel{!}{=} 0 \quad (3)$$

$$\Leftrightarrow B = -A \quad (4)$$

und

$$\psi_x(L) = Ae^{jk_x L} - Ae^{-jk_x L} \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

$$\Leftrightarrow 2jA \sin k_x L = 0 \quad (6)$$

$$\Leftrightarrow \sin k_x L = 0 \quad (7)$$

Für die x -Komponente des Wellenvektors folgt somit die Quantisierungsbedingung

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L}. \quad (8)$$

Entsprechend gilt $k_y = \frac{n_y \pi}{L}$ und $k_z = \frac{n_z \pi}{L}$. Wenn die Komponenten des Wellenvektors $\vec{k}$ diskret sind, so kann auch der Betrag des Wellenvektors nur diskrete Werte annehmen.

- b) Zeigen Sie mit Hilfe der zeitunabhängigen (stationären) Schrödingergleichung $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W \psi$, dass gilt: $W(|\vec{k}|) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}$.

Ansatz: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$

Einsetzen in die SG liefert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-Ak_x^2 e^{jk_x x} - Bk_x^2 e^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (11)$$

$$W_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad (12)$$

Entsprechend gilt $W_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$ und $W_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ und damit nach Superposition

$$W(|\vec{k}|) = W_x + W_y + W_z = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}. \quad (13)$$

- c) Bestimmen Sie die Quantenzahlen zur Energie $W = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{mL^2}$. Lassen sich die Quantenzahlen eindeutig bestimmen?

Die Quantenzahlen lassen sich nicht eindeutig bestimmen. Folgende Kombinationen $n = (n_x, n_y, n_z)$ sind möglich:

$$n_1 = (2, 1, 1), n_2 = (1, 2, 1), n_3 = (1, 1, 2) \quad (14)$$

- d) Bestimmen Sie die Wellenfunktionen $\psi_{x,n_x}, \psi_{y,n_y}, \psi_{z,n_z}$ und ψ_n . Bestimmen Sie die Amplitude der Wellenfunktion so, dass gilt $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1$. Hinweis: Sie erleichtern sich die Rechnung, wenn Sie hier die komplexen e-Funktionen in Sinus-Funktionen wandeln.

Ansatz: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$

Wir wissen bereits: $B = -A$, $k_x = \frac{n_x \pi}{L}$

Daraus folgt:

$$\psi_x(x) = A \left(e^{j \frac{n_x \pi}{L} x} - e^{-j \frac{n_x \pi}{L} x} \right) = \underbrace{2jA}_{C} \sin \frac{n_x \pi}{L} x \quad (15)$$

Normierung der Funktion:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \psi_x dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (16)$$

Da sich das Elektron nur im Bereich $[0, L]$ aufhalten kann, können die Integrationsgrenzen eingeschränkt werden.

$$\int_0^L (C \sin \frac{n_x \pi}{L} x) (C^* \sin \frac{n_x \pi}{L} x) dx \quad (17)$$

$$= C^2 \int_0^L \left(\sin \frac{n_x \pi}{L} x \right)^2 dx \quad (18)$$

O.B.d.A wählen wir C hier reell, also $C^* = C$ (daraus folgt, dass A komplex sein muß, siehe oben).

Eine Formelsammlung (oder partielle Integration) liefert zu $\int (\sin ax)^2$ die Stammfunktion $\frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$ und damit das Integral:

$$= C^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{L}{4n_x \pi} \sin 2 \frac{n_x \pi}{L} x \right]_0^L \quad (19)$$

$$= C^2 \left(\frac{1}{2}L - 0 + 0 - 0 \right) \stackrel{!}{=} 1 \quad (20)$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (21)$$

$$\Rightarrow \psi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_x \pi}{L} x \quad (22)$$

Entsprechend ergibt sich:

$$\psi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_y \pi}{L} y \quad (23)$$

$$\psi_z(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_z \pi}{L} z \quad (24)$$

Für die Gesamt-Wellenfunktion folgt daraus:

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z) = \frac{2}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n_x \pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{n_y \pi}{L} y \right) \sin \left(\frac{n_z \pi}{L} z \right) \quad (25)$$

Anmerkung: Wegen $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$ ist $\psi(x, y, z)$ bereits auf 1 normiert, wenn ψ_x , ψ_y und ψ_z dies sind.

- e) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ zu ψ_{x,n_x} .

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \hat{x} \psi_x dx = \int_0^L \psi_x^* x \psi_x dx \quad (26)$$

$$= \int_0^L \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cdot x \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right] dx \quad (27)$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L x \cdot \left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (28)$$

Durch partielle Integration findet man $\int x \cdot (\sin ax)^2 dx = \frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{4a}x \sin 2ax - \frac{1}{8a^2} \cos 2ax$. Es folgt demnach:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}x^2 - \frac{L}{4n_x \pi} x \sin\left(2\frac{n_x \pi}{L} x\right) - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos\left(2\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right]_0^L \quad (29)$$

$$= \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}L^2 - \frac{L}{4n_x \pi} L \sin(2n_x \pi) - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos(2n_x \pi) \right] \quad (30)$$

$$- \left[0 - \frac{L}{4n_x \pi} x \sin 0 - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos 0 \right] \\ = \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}L^2 - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} - \left[-\frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \right] \right] = \frac{L}{2} \quad (31)$$

Für den Impulserwartungswert berechnen wir mit dem Impulsoperator $\hat{p} = -j\hbar \nabla$:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \hat{p} \psi_x dx = \int_0^L \psi_x^* (-j\hbar \nabla) \psi_x dx \quad (32)$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) (-j\hbar \nabla) \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) dx \quad (33)$$

$$= \frac{-2j\hbar n_x \pi}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cos\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) dx \quad (34)$$

Durch partielle Integration findet man $\int \sin ax \cos ax dx = \frac{1}{2a} (\sin ax)^2$. Es folgt demnach:

$$\langle p \rangle = \frac{-j\hbar}{L} \left[\left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 \right]_0^L = 0 \quad (35)$$

Dieses vielleicht etwas überraschende Ergebnis lässt sich anschaulich damit erklären, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ für einen Grundzustand (d.h. nicht-zusammengesetzter Zustand) zeitunabhängig ist, d.h. der Ortserwartungswert ändert sich nicht mit der Zeit. Daher kann die Elektronenwolke als ganzes auch keinen Impuls besitzen.

- f) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron in einem würfelförmigen Raumbereich in der Mitte des Quantenpunkts befindet, dessen Volumen einem 27stel des gesamten Quantenpunkts entspricht?

Da das Volumen ein 27stel des Gesamten Quantenpunkts betragen soll, und in der Mitte des Punktes zentriert ist, betrachten wir den Bereich $x, y, z \in [L/3, \dots, 2L/3]$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bezeichnen wir mit P .

$$P = \int_a^b \int_a^b \int_a^b \psi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) dz dy dx \quad (36)$$

Wegen $\psi(x, y, z) = \psi_x \psi_y \psi_z$ gilt:

$$P = \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_x^* \psi_x dx \cdot \underbrace{\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_y^* \psi_y dy}_{\hat{=} 1. \text{Integral}} \cdot \underbrace{\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_z^* \psi_z dz}_{\hat{=} 1. \text{Integral}} \quad (37)$$

Im folgenden betrachten wir deshalb:

$$\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_x^* \psi_x dx = \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (38)$$

$$= \frac{2}{L} \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (39)$$

Durch partielle Integration folgt:

$$= \frac{2}{L} \left[\frac{1}{2} x - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(2 \frac{n_x \pi}{L} x\right) \right]_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \quad (40)$$

$$= \frac{2}{L} \left(\left[\frac{1}{3} L - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) \right] - \left[\frac{1}{6} L - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right] \right) \quad (41)$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right) \quad (42)$$

Daraus folgt für P :

$$P = \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right) \right) \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_y \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_y \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_y \pi\right) \right) \right) \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_z \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_z \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_z \pi\right) \right) \right) \quad (43)$$

Daraus ergibt sich für einige ausgewählte Quantenzahlkonfigurationen konkret:

$$\begin{array}{llll} n_x = 1 & n_y = 1 & n_z = 1 & \Rightarrow P = 0, 23 \\ n_x = 1 & n_y = 1 & n_z = 2 & \Rightarrow P = 0, 20 \\ n_x = 2 & n_y = 2 & n_z = 2 & \Rightarrow P = 7, 47 \cdot 10^{-3} \\ n_x = 1000 & n_y = 1000 & n_z = 1000 & \Rightarrow P = 0, 04 \end{array} \quad (44)$$

- g) Beim Übergang eines Elektrons aus dem Zustand $n^* = (2, 1, 1)$ in den Zustand $n = (1, 1, 1)$ werde die frei werdende Energie in Form von infrarotem Licht emittiert.

Die Quantenpunkte emittieren infrarotes Licht der Wellenlänge $\lambda = 3 \mu\text{m}$. Welche Kantenlänge L haben die Quantenpunkte?

Die frei werdende Energie berechnet sich zu:

$$\Delta W = W_{n_x=2} - W_{n_x=1} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (2^2 - 1^2)}{2mL^2} \quad (45)$$

Mit $\Delta W = hf$ und $c = \lambda f$ folgt:

$$L = 1,65 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad (46)$$

2. Überlagerte Zustände

Betrachtet werden die beiden energetisch niedrigsten Zustände in einem unendlich hohen Potentialtopf.

- a) Geben Sie diese beiden zeitabhängigen Zustände $\psi_1(x, t)$ und $\psi_2(x, t)$ explizit an.

Sei L die Breite des Topfes. Aus dem zweiten Kapitel des Skriptes folgt:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_n t} \quad (47)$$

Beachten Sie, dass hier explizit nach $\psi(x, t)$ gefragt ist. Die zeitunabhängige Lösung aus dem Skript ist also um den stets vorhandenen, aber bei zeitunabhängigen Problemen nicht ausgeschriebenen harmonischen Term $e^{-j\omega_n t}$ zu ergänzen. Die Normierungskonstante ergibt sich zu:

$$A_n^2 = \frac{2}{L} \quad (48)$$

Für ψ_1 und ψ_2 gilt also:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_1 t} \quad (49)$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_2 t} \quad (50)$$

Aus der sin-Funktion lässt sich durch Vergleich mit $\sin(kx)$ außerdem ablesen, dass für die Wellenzahl $k = \frac{n\pi}{L}$ gilt.

- b) Wie lautet der Zustand $\psi(x, t)$, der sich zu gleichen Teilen aus den beiden Zuständen ψ_1 und ψ_2 zusammensetzt?

Allgemein setzen wir für einen Überlagerungszustand

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (51)$$

an, mit den komplexen Koeffizienten c_1 und c_2 . Die Forderung nach gleichen Anteilen der Zustände bedingt $c_1 = c_2 \equiv c$, also

$$\psi = c\psi_1 + c\psi_2. \quad (52)$$

Nun gilt es noch, diesen Zustand zu normieren. Wir fordern also

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (53)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (c^* \psi_1^* + c^* \psi_2^*) (c \psi_1 + c \psi_2) dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (54)$$

$$|c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1^* \psi_1 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2) dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (55)$$

$$|c|^2 \left(\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_1 dx}_{=1} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_2 dx}_{=0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^* \psi_1 dx}_{=0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^* \psi_2 dx}_{=1} \right) \stackrel{!}{=} 1 \quad (56)$$

$$|c|^2 \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} \quad (57)$$

Der vorletzte Schritt folgt zum einen aus der Orthogonalität der Zustände ψ_1 und ψ_2 , zum anderen aus der Normiertheit der Zustände. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir nun $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und erhalten somit:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2. \quad (58)$$

Es sei noch angemerkt, dass man bei einer Messung der Energie stets entweder die Eigenenergie zu Zustand ψ_1 , W_1 messen wird, oder die Eigenenergie zu Zustand ψ_2 , W_2 . Alle Messwerte dazwischen sind quantenmechanisch verboten! Darüber hinaus ändert eine Messung das System. Es befindet sich nach der Messung nur noch in dem Eigenzustand, zu welchem die Energie gemessen wurde. Die Überlagerung geht verloren.

- c) Bestimmen Sie mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung den Orts-Erwartungswert $\langle x \rangle(t)$.

Für den Ortserwartungswert setzen wir an

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) dx \quad (59)$$

Im Ortsraum gilt für den Ortsoperator $\hat{x} \equiv x$. Da $\psi(x, t)$ außerhalb des Topfes verschwindet, können wir die Integration auf den Topf beschränken. Nach Einsetzen von $\psi(x, t)$ erhalten wir also

$$\langle x \rangle(t) = \int_0^L \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) dx \quad (60)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int_0^L (\psi_1^*(x, t) x \psi_1(x, t) + \psi_1^*(x, t) x \psi_2(x, t) \\ &\quad + \psi_2^*(x, t) x \psi_1(x, t) + \psi_2^*(x, t) x \psi_2(x, t)) dx \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned}
&= \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^L (x\psi_1^*(x,t)\psi_1(x,t) + x\psi_2^*(x,t)\psi_2(x,t)) dx}_I \\
&\quad + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^L (x\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t) + x\psi_2^*(x,t)\psi_1(x,t)) dx}_II
\end{aligned} \tag{62}$$

Wir betrachten zunächst den Teil I der Gleichung. Wegen $e^{-j\omega_1 t} \cdot e^{j\omega_1 t} = 1$ gilt $\psi_1(x,t)^*\psi_1(x,t) = \psi_1(x)^*\psi_1(x)$, ψ_2 entsprechend. Der Ortserwartungswert der Eigenzustände ψ_1 und ψ_2 allein ist jeweils also zeitunabhängig. Einsetzen der Eigenzustände ergibt

$$I = \frac{2}{L} \int_0^L \left(x \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) + x \sin^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right) dx = L \tag{63}$$

Die Berechnung des Integrals folgt dabei aus partieller Integration oder mit Hilfe von Integraltabellen.

Für Teil II berechnen wir

$$II = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{j\omega_1 t} x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-j\omega_2 t} dx \tag{64}$$

$$\begin{aligned}
&+ \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{j\omega_2 t} x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{-j\omega_1 t} dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \underbrace{(e^{j\omega_1 t} e^{-j\omega_2 t} + e^{j\omega_2 t} e^{-j\omega_1 t})}_{e^{j(\omega_1 - \omega_2)t} + e^{-j(\omega_1 - \omega_2)t}} dx
\end{aligned} \tag{65}$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} (2 \cos((\omega_1 - \omega_2)t)) dx \tag{66}$$

Der Integrand lässt sich mit Hilfe des Additionstheorems $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ umformen zu:

$$II = \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \int_0^L x \left(\cos \frac{\pi x}{L} - \cos \frac{3\pi x}{L} \right) dx \tag{67}$$

Dieses Integral ist Bronstein-integrabel:

$$\int x \cos ax dx = \frac{\cos ax}{a^2} + \frac{x \sin ax}{a} \tag{68}$$

Daraus folgt:

$$\Pi = \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \left(\left[\frac{L^2}{\pi^2} \cos \frac{\pi x}{L} \right]_0^L + \underbrace{\left[\frac{Lx}{\pi} \sin \frac{\pi x}{L} \right]_0^L}_{=0} \dots \right. \quad (69)$$

$$\dots - \left[\frac{L^2}{9\pi^2} \cos \frac{3\pi x}{L} \right]_0^L - \underbrace{\left[\frac{Lx}{3\pi} \sin \frac{3\pi x}{L} \right]_0^L}_{=0} \left. \right) \quad (70)$$

Insgesamt erhalten wir also

$$\langle x \rangle(t) = \frac{1}{2} \left(L + \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \left[-\frac{2L^2}{\pi^2} + \frac{2L^2}{9\pi^2} \right] \right) \quad (71)$$

$$= \frac{L}{2} - \frac{16L}{9\pi^2} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \quad (72)$$

Nun müssen wir noch ω_1 und ω_2 aus der zeitabhängigen SG bestimmen:

$$j\hbar \frac{d}{dt} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (73)$$

Die Lösung hat die Form $\psi = Ae^{-jkx}e^{-j\omega t}$. Einsetzen ergibt:

$$j\hbar(-j\omega)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}(-jk)^2\psi \quad (74)$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}k^2 \quad (75)$$

Einsetzen in die Lösung mit $k = \frac{n\pi}{L}$ liefert:

$$\langle x \rangle(t) = \frac{L}{2} - \frac{16L}{9\pi^2} \cos \left(\frac{3\hbar\pi^2}{2mL^2} t \right) \quad (76)$$