Gesamtpunktzahl: **20 Punkte**

Übungsbetreuung: Stefan Liebler (stefan.liebler@kit.edu)

Aufgabe 1: Fourier-Transformation und Wellenpaket **2+2+3 = 7 Punkte**

Der Welle-Teilchen-Dualismus erlaubt die Beschreibung von Teilchen als Wellenpakete, deren Auftreten in Orts- und Impulsraum durch eine Fourier-Transformation verknüpft sind. Wir betrachten im Impulsraum eine generische Wellenzahlverteilung der Form

$$g(k) = \begin{cases} N & \text{für} \quad -K \leq k \leq K \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

(a) Berechnen Sie die Form des Wellenpakets im Ortsraum, indem Sie die Fourier-Transformation

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ikx}$$

ausführen.

(b) Berechnen Sie den Normierungsfaktor N so, dass das Wellenpaket im Ortsraum normiert ist, also

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = 1$$

gilt. Berechnen Sie sodann auch $\int_{-\infty}^{\infty} dk |g(k)|^2$.
Hinweis: Schlagen Sie die notwendigen Integrale gerne nach.

(c) Skizzieren Sie die Verteilungen $f(x)$ und $g(k)$, und ermitteln Sie anhand der Skizze eine sinnvolle Definition für die Breiten Δx und Δk der Verteilungen $f(x)$ und $g(k)$. Zeigen Sie, dass unabhängig von K gilt

$$(\Delta x)(\Delta k) \geq \mathcal{O}(1) .$$

Dies entspricht der Heisenberg'schen Unschärferelation. Betrachten und interpretieren Sie zuletzt die Grenzfälle $K \to \infty$ bei endlichem N und $K \to 0$ bei endlichem $N \cdot K$.

Lösung der Aufgabe 1

(a) Wir berechnen die Form des Wellenpakets im Ortsraum, indem wir die Fourier-Transformation wie angegeben ausführen. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) \exp(ikx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-K}^{K} dk N \exp(ikx) \\ &= \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ix} \exp(ikx)\Big|_{-K}^{K} = \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ix} \left(\exp(iKx) - \exp(-iKx)\right) \\ &= \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ix} 2i \sin(Kx) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} N \frac{\sin(Kx)}{x} . \end{aligned}$$

(b) Wir bestimmen den Normierungsfaktor zunächst aus $\int_{-\infty}^{\infty} dx|f(x)|^2 = 1$. Dazu benötigen wir

$$|f(x)|^2 = \frac{2N^2}{\pi}\frac{\sin^2(Kx)}{x^2}\,.$$

Wir integrieren also

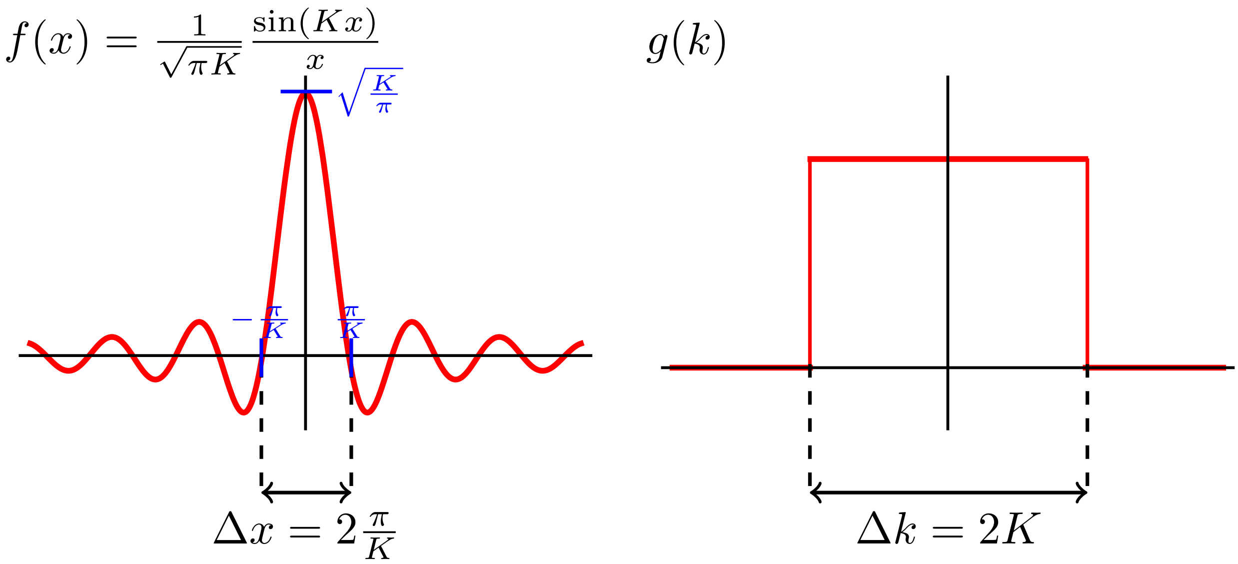
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|f(x)|^2 = \frac{2}{\pi}N^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{\sin^2(Kx)}{x^2} = 2KN^2 \overset{!}{=} 1\,.$$

Hierbei haben wir $\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{\sin^2(Kx)}{x^2} = \pi K$ benutzt. Es folgt somit $N = \sqrt{\frac{1}{2K}}$. Genauso folgt mit diesem Normierungsfaktor

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk|g(k)|^2 = \int_{-K}^{K} N^2 = 2N^2K = 1\,.$$

Dies ist im Einklang mit dem Satz von Plancherel.

(c) Wir skizzieren zuerst die beiden Graphen:



Dabei wird als vernünftiges Maß für die Breite im Falle von $f(x)$ der Abstand der beiden Nullstellen bei $x = \pm\frac{\pi}{K}$ gewählt. Bei $g(k)$ bietet sich schlicht die Breite des Kastens an. Es folgt dann

$$(\Delta x)(\Delta k) = 2K2\frac{\pi}{K} = 4\pi \geq \mathcal{O}(1)\,.$$

Insbesondere ist dies unabhängig von K. Dies impliziert bereits, dass für eine kleinere Breite von $g(k)$ im Impulsraum, also kleineres K, die Breite im Ortsraum entsprechend zunimmt. Wir diskutieren zuletzt die beiden Grenzfälle:

- $K \to \infty$, N endlich: Die Wellenzahlverteilung $g(k)$ ist eine konstante Funktion mit dem Wert N. Die Wellenfunktion $f(x)$ wird in diesem Grenzübergang eine δ Distribution.
- $K \to 0$, NK endlich: Hier wird $g(k)$ zu einer δ Distribution. Im Gegenzug wird $f(x)$ konstant, nämlich

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk g(k)e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\delta(0)e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,.$$

Aufgabe 2: Dispersion eines Wellenpakets **5+4+2+2 = 13 Punkte**

Wir möchten uns in dieser Aufgabe mit Wellenpaketen noch vertrauter machen und betrachten die Ausbreitung eines Gauß'schen Wellenpaketes $\psi(x,t)$ in Raum und Zeit. Per Konstruktion erfüllt $\psi(x,t)$ die eindimensionale Schrödingergleichung des freien Teilchens. Für ein Ebensolches berechnen wir in dieser Aufgabe die zunehmende Ortsunschärfe.
Hinweis: Wenn Sie bei der Berechnung mancher Integrale scheitern können Sie trotzdem weitermachen. Sie können Teilaufgaben auch einzeln bearbeiten.

(a) Als Beispiel für die Ausbreitung einer nicht-relativistischen Materiewelle in einer Dimension betrachten wir das Gauß'sche Wellenpaket

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \; g(k) e^{i(kx-\omega(k)t)} \qquad \text{mit} \qquad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

und

$$g(k) = C \, \exp\left(-\frac{1}{2a^2}(k-k_0)^2\right) .$$

(i) Bestimmen Sie $\psi(x,t)$. Das Ergebnis lässt sich auf die folgende Form bringen

$$\psi(x,t) = \frac{Ca}{\sqrt{1+i\frac{a^2\hbar t}{m}}} \exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{2(1+i\frac{a^2\hbar t}{m})}\right) \exp\left(i(k_0 x - \omega_0 t)\right)$$

mit $v_g = \hbar k_0/m$ und $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$. *Hinweis:* Um auf dieses Resultat zu kommen, empfiehlt sich beispielsweise folgendes Vorgehen: Substituieren Sie $u = k - k_0$. Nehmen Sie von u abhängige Anteile aus dem Integral. Führen Sie zwischenzeitlich die Abkürzung $s = \left(1 + ia^2\hbar t/m\right)/(2a^2)$ ein, so dass Sie nach quadratischer Ergänzung einen Ausdruck $\exp\left\{-s\left[u - i(x - v_g t)/(2s)\right]^2\right\}$ im Integral stehen haben. Nutzen Sie $\int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-A(y-y_0)^2) = \sqrt{\frac{\pi}{A}}$.

(ii) Legen Sie die Konstante C so fest, dass $\psi(x,t)$ und $g(k)$ normiert sind, also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; |\psi(x,t)|^2 = 1 \qquad \text{und} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dk \; |g(k)|^2 = 1 \, .$$

(b) Bilden Sie für die normierten Wellenfunktionen $\psi(x,t)$ aus Teilaufgabe (b) ($C^{-1} = \sqrt{a\sqrt{\pi}}$) den Erwartungswert des Ortes

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x,t)^* x \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^2$$

sowie die Varianz $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ als Maß für die Breite des Gauß'schen Wellenpakets im Ortsraum. *Hinweis:* Hier ist auch $\int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 \exp(-Ay^2) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{A^3}}$ hilfreich.

(c) Kommentieren Sie das raum-zeitliche Verhalten von $|\psi(x,t)|^2$.

(d) Innerhalb welcher Zeitspannen T verdoppelt sich die bei $t = 0$ vorhandene Breite $(\Delta x)_{t=0}$ in den nachfolgenden Fällen? Berechnen Sie T für

i) ein Elektron mit Masse $m_e = 0.9 \cdot 10^{-27}$ g und $(\Delta x)_{t=0} \approx 10^{-8}$ cm, welches anfänglich innerhalb einer dem Atomdurchmesser entsprechenden Strecke lokalisiert ist.

ii) ein Elektron mit Masse $m_e = 0.9 \cdot 10^{-27}$ g und $(\Delta x)_{t=0} \approx 10^{-1}$ cm, einer Breite, die typisch für Blendenöffnungen bei Versuchen im Labor ist.

iii) die Biene Maja mit Masse $m = 0.1$ g und $(\Delta x)_{t=0} \approx 1$ cm.[1]

Lösung der Aufgabe 2

(a) Definitionsgemäß ist $\psi(x,t)$ von der Form:

$$\psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(-\tfrac{1}{2a^2}(k-k_0)^2 + i(kx - \tfrac{\hbar k^2}{2m}t)\right)$$

Wir substituieren mit $u = k - k_0$ und $du = dk$ und erhalten

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(-\frac{u^2}{2a^2} + i(u+k_0)x - i\frac{\hbar(u+k_0)^2 t}{2m}\right) \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(-\frac{1}{2a^2}u^2 + iux + ik_0x - i\frac{\hbar t}{2m}u^2 - i\omega_0 t - iv_g tu\right) .\end{aligned}$$

Hierbei wurde $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$ und $v_g = \hbar k_0/m$ eingeführt. Weiter folgt

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(-\frac{1}{2a^2}u^2 - i\frac{\hbar t}{2m}u^2 + iux - iv_g tu + ik_0x - i\omega_0 t\right) \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i(k_0x - \omega_0 t)\right) \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[-\left(\frac{1}{2a^2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)u^2 + i(x - v_g t)u\right] .\end{aligned}$$

Wir führen nun die Abkürzung $s = \left(1 + i\frac{\hbar t a^2}{m}\right)/(2a^2)$ ein und schreiben weiter um

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i(k_0x - \omega_0 t)\right) \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[-s\left\{u^2 - i\frac{x - v_g t}{s}u\right\}\right] \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i(k_0x - \omega_0 t)\right) \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[-s\left\{\left(u - i\frac{x - v_g t}{2s}\right)^2 + \frac{(x - v_g t)^2}{4s^2}\right\}\right] .\end{aligned}$$

Hierbei wurde im letzten Schritt eine quadratische Ergänzung durchgeführt. Nun lässt sich auch der letzte Term aus dem Integral nehmen und es folgt weiter

$$\psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i(k_0x - \omega_0 t)\right) \exp\left(-\frac{(x - v_g t)^2}{4s}\right) \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[-s\left(u - i\frac{x - v_g t}{2s}\right)^2\right] .$$

Zuletzt nutzen wir das angegebene Integral oder substituieren mit $y = u\sqrt{s}$ und $du = dy/\sqrt{s}$ und erhalten somit

$$\psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}\sqrt{s}} \exp\left(i(k_0x - \omega_0 t)\right) \exp\left(-\frac{(x - v_g t)^2}{4s}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left[-\left(y - i\frac{x - v_g t}{2s^2}\right)^2\right] .$$

[1] Muss sich Maja Sorgen machen, dass sie nach der Quarantäne nicht mehr durch den Nestausgang passt?

Das letzte Integral ergibt $\sqrt{\pi}$ und somit verbleibt das angegebene Resultat, sobald wir s wieder einsetzen:

$$\psi(x,t) = \frac{Ca}{\sqrt{1+i\frac{a^2\hbar t}{m}}}\exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{2(1+i\frac{a^2\hbar t}{m})}\right)\exp\left(i(k_0 x - \omega_0 t)\right) \, .$$

Als Nächstes benötigen wir das Betragsquadrat der Wellenfunktion im Ortsraum. Wir schreiben die Exponentialfunktion wie folgt um

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{Ca}{\sqrt{1+i\frac{a^2\hbar t}{m}}}\exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{2(1+i\frac{a^2\hbar t}{m})}\right)\exp\left(i(k_0 x - \omega_0 t)\right) \\
&= \frac{Ca}{\sqrt{1+i\frac{a^2\hbar t}{m}}}\exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2\left(1-i\frac{a^2\hbar t}{m}\right)}{2(1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2})}\right)\exp\left(i(k_0 x - \omega_0 t)\right) \\
&= \frac{Ca}{\sqrt{1+i\frac{a^2\hbar t}{m}}}\exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{2(1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2})}\right)\exp\left[i\left(k_0 x - \omega_0 t + \frac{a^2(x-v_g t)^2\frac{a^2\hbar t}{m}}{2(1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2})}\right)\right] \, .
\end{aligned}$$

Der komplexe Anteil der Exponentialfunktion entfällt bei Bilden des Betragsquadrats. Für den Vorfaktor gilt

$$\left|\frac{1}{\sqrt{x+iy}}\right|^2 = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}} \, .$$

Somit ergibt sich unmittelbar

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{|C|^2 a^2}{\sqrt{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}}\exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right) \, .$$

Erneut unter Benutzung von

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-A(x-x_0)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}}$$

folgt dann für die Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = |C|^2 a\sqrt{\pi} \, .$$

Genauso gilt im Einklang mit dem Satz von Plancherel

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk = \int_{-\infty}^{\infty} |C|^2 \exp\left(-\frac{1}{a^2}(k-k_0)^2\right) dk = |C|^2 a\sqrt{\pi} \, .$$

Somit liefert die Normierung $|C|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}$.

(b) Wir möchten den Erwartungswert des Ortes ermitteln. Gemäß der Definition ist also

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x,t) x \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^2$$

auszuwerten. Wir erhalten daher

$$\langle x \rangle = \frac{|C|^2 a^2}{\sqrt{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{1+\frac{a^4\hbar^2t^2}{m^2}}\right) .$$

Wir substituieren $y = x - v_g t$ und $dy = dx$ und erhalten

$$\langle x \rangle = \frac{|C|^2 a^2}{\sqrt{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dy (y + v_g t) \exp\left(-\frac{a^2 y^2}{1+\frac{a^4\hbar^2t^2}{m^2}}\right) .$$

Der Beitrag linear in y ist ungerade und entfällt daher. Es verbleibt daher der konstante Beitrag in y, für welchen wir wieder das angegebene Integral nutzen. Es folgt

$$\langle x \rangle = |C|^2 a^2 v_g t \sqrt{\pi} = v_g t \, .$$

Das Gauß'sche Wellenpaket bewegt sich also im Mittel genau mit der Gruppengeschwindigkeit, die wir anfänglich eingeführt haben und die aus der Dispersionsrelation für ein freies Teilchen folgt. Um die Varianz auszurechnen, benötigen wir nach Anwendung des Verschiebungssatzes im Ausdruck $(\Delta x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ noch den Erwartungswert $\langle x^2 \rangle$. Dieser ist ganz analog

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x,t)|^2 \, .$$

Wir schreiben daher

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{|C|^2 a^2}{\sqrt{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \exp\left(-\frac{a^2(x-v_g t)^2}{1+\frac{a^4\hbar^2t^2}{m^2}}\right) .$$

Wir führen wieder die gleiche Substitution $y = x - v_g t$ aus und verbleiben bei

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{|C|^2 a^2}{\sqrt{1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dy (y^2 + v_g^2 t^2) \exp\left(-\frac{a^2 y^2}{1+\frac{a^4\hbar^2t^2}{m^2}}\right) .$$

Den linearen Teil in y haben wir direkt über Bord geworfen. Wir nutzen nun auch das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 \exp(-Ay^2) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{A^3}}$ und erhalten schlussendlich

$$\begin{aligned}\left\langle x^2 \right\rangle &= |C|^2 a \left[v_g^2 t^2 \sqrt{\pi} + \frac{1+\frac{a^4\hbar^2t^2}{m^2}}{2a^2}\sqrt{\pi}\right] \\ &= v_g^2 t^2 + \frac{1}{2a^2}\left(1+\frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}\right) .\end{aligned}$$

Somit verbleibt für die Standardabweichung als Wurzel der Varianz

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{2}a}\sqrt{1 + \frac{a^4 \hbar^2 t^2}{m^2}}\,.$$

Wir halten also fest, dass die Breite des Wellenpakets mit der Zeit anwächst. Nicht gefragt, aber der Vollständigkeit halber erwähnt seien der Erwartungswert und die Standardabweichung des Impulses. Diese ergeben sich zu

$$\langle p \rangle = \hbar k_0, \qquad \Delta p = \frac{a\hbar}{\sqrt{2}}\,.$$

Der Mittelwert des Impulses bleibt demnach konstant, genauso die Breite im Impulsraum. Für $t = 0$ folgt $(\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}$, für $t > 0$ ist dann sogar $(\Delta x)(\Delta p) > \frac{\hbar}{2}$. Die Heisenberg'sche Unschärferelation ist also erfüllt.

(c) Das Betragsquadrat $|\psi(x,t)|^2$ wird als Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Ortsraum verstanden. Wir haben berechnet, dass das Teilchen sich im Mittel an der Stelle $\langle x \rangle = v_g t$ befindet, das Wellenpaket aber eine zeitabhängige Breite aufweist, die durch $\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}a}\sqrt{1 + \frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}$ charakterisiert ist. Das Wellenpaket zerfließt daher. Dies ist bedingt durch die vorhandene Impulsunschärfe in Form der Gauß-Verteilung $g(k)$. Ein Teilchen, welches zum Zeitpunkt $t = 0$ mit der Genauigkeit Δx lokalisiert werden kann, kann daher zu einem späteren Zeitpunkt mit noch geringerer Genauigkeit lokalisiert werden.

(d) Wir berechnen T für die drei angegebenen Fälle. Offenbar gilt

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}a}\sqrt{1 + \frac{a^4\hbar^2 t^2}{m^2}}, \qquad (\Delta x)_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{2}a} \qquad \Rightarrow \qquad a = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta x_0}\,.$$

Die doppelte Breite ist erreicht, wenn folgende Gleichung erfüllt ist:

$$(\Delta x)_{t=T} = 2(\Delta x)_{t=0} = \frac{\sqrt{2}}{a} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\sqrt{2}}{a} = \frac{1}{\sqrt{2}a}\sqrt{1 + \frac{a^4\hbar^2 T^2}{m^2}}$$

$$\Rightarrow \qquad T^2 = \frac{3m^2}{a^4\hbar^2} = \frac{12m^2}{\hbar^2}(\Delta x)^4_{t=0} \qquad \Rightarrow \qquad T = \frac{\sqrt{12}m}{\hbar}(\Delta x)^2_{t=0}$$

In den angegebenen Fällen ergibt sich:

i) $T = 2.9 \cdot 10^{-16}$ s,

ii) $T = 2.9 \cdot 10^{-2}$ s,

iii) $T = 3.2 \cdot 10^{26}$ s.

Hier wird offensichtlich, dass Unschärfe für makroskopische Objekte nicht von Relevanz ist, während mikroskopische Objekte einer quantenmechanischen Beschreibung bedürfen. Biene Maja passt auch noch nach dem Erlöschen unserer Sonne durch den Ausgang des Bienennests, auch wenn Königin Angela im Einklang mit Virologe Willi erst dann die Quarantäne auflöst.