Quantenmechanik

Aufgabe: Berechnen Sie für die Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}}\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{1}$$

(a) den Erwartungswert des Quadrates des Ortes,

(b) den Erwartungswert des Quadrates des Impulses,

(c) sowie heraus

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\langle\ \hat{x}^2\ \rangle - \langle\ \hat{x}\ \rangle^2} \cdot \sqrt{\langle\ \hat{p}^2\ \rangle - \langle\ \hat{p}\ \rangle^2} \tag{2}$$

Lösung:

(a) Es sei im folgenden $A = 1/\sqrt[4]{\pi\sigma^2}$.

$$\langle\ \hat{x}^2\ \rangle = A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cdot x^2 \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \cdot x^2 \tag{3}$$

Substituiere $\lambda = 1/\sigma^2$ und umschreibe den entstehenden Ausdruck mit einer Ableitung nach λ, denn:

$$\frac{d}{d\lambda}\ e^{-\lambda x^2} = -x^2\ e^{-\lambda x^2} \tag{4}$$

wobei vom neuen Integral die Stammfunktion bekannt ist, d.h.

$$\langle\ \hat{x}^2\ \rangle = -A^2\ \frac{d}{d\lambda} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\lambda x^2} = -A^2\ \frac{d}{d\lambda}\ \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{A^2}{2}\ \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda^{3/2}}$$

$$= A^2\ \frac{\sqrt{\pi} \cdot \sigma^3}{2} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \cdot \sigma}\ \frac{\sqrt{\pi} \cdot \sigma^3}{2} = \frac{\sigma^2}{2} \tag{5}$$

(b)

$$\langle\ \hat{p}^2\ \rangle = A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2}\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

$$= -A^2\hbar^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\ \frac{d}{dx} \left(-\frac{x}{\sigma^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

$$= -A^2\hbar^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \left[-\frac{1}{\sigma^2}\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} + \left(-\frac{x}{\sigma^2}\right) \cdot \left(-\frac{x}{\sigma^2}\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\right)\right]$$

$$\langle\ \hat{p}^2\ \rangle = -A^2\hbar^2 \left[-\frac{1}{\sigma^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}}}_{=\sqrt{\pi}\sigma} + \frac{1}{\sigma^4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 \cdot e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}}}_{=\sqrt{\pi}\sigma^3/2,\ \text{s.}\langle x^2\rangle} \right]$$

$$= -A^2\hbar^2 \left(-\frac{\sqrt{\pi}}{\sigma} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \right) = -A^2\hbar^2 \left(-\frac{2\sqrt{\pi}}{2\sigma} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \right) = A^2\ \frac{\hbar^2\sqrt{\pi}}{2\sigma}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}\cdot\sigma}\ \frac{\hbar^2\sqrt{\pi}}{2\sigma} = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \tag{6}$$

(c) Für diesen Aufgabenteil benötigen wir zunächst die Erwartungswerte des Ortes $\langle\ \hat{x}\ \rangle$ und des Impulses $\langle\ \hat{p}\ \rangle$:

Erwartungswert des Orts:

$$\langle\ \hat{x}\ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(x)\ x\ \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x \cdot e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} = 0 \tag{7}$$

Das letzte Integral in Gleichung (4) ist Null, da $x \cdot e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}}$ eine ungerade Funktion darstellt, d.h. $f(-x) = -f(x)$.

Eine weitere Möglichkeit ergibt sich mit einem Ableitungstrick

$$\frac{d}{dx}\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} = -\frac{2x}{\sigma^2}\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \qquad \Longrightarrow \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x \cdot e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} = -\frac{\sigma^2}{2}\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \tag{8}$$

also folgt

$$\langle\ \hat{x}\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \left(-\frac{\sigma^2}{2} \right) \left[\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}}\ \right]_{-\infty}^{\infty} = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \left(-\frac{\sigma^2}{2} \right) [0 - 0] = 0 \tag{9}$$

Erwartungswert des Impulses:

$$\langle\ \hat{p}\ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(x)\ \hat{p}\ \Psi(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\ \frac{d}{dx}\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \left(-\frac{1}{\sigma^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x \cdot e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \overset{\text{s.o.}}{=} 0 \tag{10}$$

Demnach ist

$$\langle\ \hat{x}\ \rangle = \langle\ \hat{p}\ \rangle = 0$$

ist, folglich gilt auch

$$\langle\ \hat{x}\ \rangle^2 = \langle\ \hat{p}\ \rangle^2 = 0 \tag{11}$$

Setzen wir also Eq. (11) und die Ergebnisse aus (a) und (b) in Gl. (2) ein, erhalten wir

$$\Delta\hat{x} \cdot \Delta\hat{p} = \sqrt{\langle\ \hat{x}^2\ \rangle} \cdot \sqrt{\langle\ \hat{p}^2\ \rangle} = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}\ \frac{\hbar}{\sqrt{2} \cdot \sigma} = \frac{\hbar}{2} \tag{12}$$

was genau der Heisenberg'schen Unschärferelation entspricht.

Einschub: Normierung der Wellenfunktion

Setzen wir die Wellenfunktion allgemein mit einer Normierungskonstanten $\mathcal{N}$ an, ergibt sich:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(x)\ \Psi(x) = \mathcal{N}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \mathcal{N}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \tag{13}$$

Das Integral in Eq. (8) ist ein sogenanntes Gauß Integral und besitzt die folgende Lösung (s. Bronstein)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{14}$$

damit folgt

$$1 = \mathcal{N}^2 \cdot \sqrt{\pi\sigma^2} \qquad \Longrightarrow \qquad \mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} \tag{15}$$

Möchte man sich keiner Formelsammlung bedienen bzw. hat gerade keine zur Hand, kann mit einem Trick das Integral auch so gelöst werden. Offensichtlich gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-y^2} \tag{16}$$

Mit Hilfe des Zusammenhänge

$$x^2 + y^2 = r^2, \qquad x = r\ \sin(\phi) \qquad y = r\ \cos(\phi)$$

zwischen kartesischen und Polarkoordinaten folgt über die Funktionaldeterminante

$$dx\ dy = r\ dr\ d\phi \tag{17}$$

somit kann eine Koordinatentransformation des Integrals vorgenommen werden:

$$\begin{aligned}
\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2}\right)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-x^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dy\ e^{-y^2} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, dy\ e^{-(x^2+y^2)} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} dr\, d\phi\, r\, e^{-r^2} \\
&= 2\pi \int_0^{\infty} dr\, r\, e^{-r^2} = 2\pi\left(-\frac{1}{2}\right)\left[e^{-r^2}\right]_0^{\infty} = -\pi(e^{-\infty} - e^0) = \pi
\end{aligned} \tag{18}$$

Für das allgemeine Gauß Integral mit dem Argument $-ax^2$ in der Exponentialfunktion erhält man letztendlich die Lösung $\sqrt{\pi/a}$, in dem ganz am Anfang eine Substitution $v = ax^2$ vorgenommen wird, d.h. $dx = dv/\sqrt{a}$.