Karlsruhe, 1. 6. 2024

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

Stolpersteine in der Didaktik der Quantenmechanik oder Nature of Science und der unendliche hohe Potenzialtopf

Oliver Passon
AG Physik und ihre Didaktik
Bergische Universität Wuppertal

SECTION III

NORMAL MODES OF A DE BROGLIE WAVE

Let us consider an electron shut up in a box. The walls of the box are to be of some perfectly elastic medium, so that the electrons are reflected without loss of energy. Now we have been able to describe all that we can observe of the behaviour of a free electron by means of a wave function ψ which obeys the wave equation; perhaps the same method will describe the behaviour of an electron in a box. Just what kind of solution to look for is not immediately obvious, so let us for a moment forget that our waves have any connection with electrons, and enquire as to what kind of oscillation waves in a box can perform.

Gesetzte, Theorien,
experimentelle Praxen

Guter Physikunterricht = nicht nur **von** sondern auch **über** Physik

Genese und Geltung dieser Wissensform
(***Wie*** und ***warum*** macht man Physik?
Wer macht Physik?)

Dieser „Lernen über Physik“ wird als *Nature of Science* (NOS); zu deutsch „Natur der Naturwissenschaften“ bezeichnet. Es entwickelt sich nicht „nebenbei“…

Draw a scientist test (DAST)

Scientist by an 11-year-old boy.

Stereotyp: Männliche Forscher in sozialer Vereinzelung mit wirren Haaren gehen einer tendenziell gefährlichen Tätigkeit nach…

Chambers, D. W. (1983) Stereotypic images of the scientist: The draw-a-scientist test. *Science education* **67**(2): 255-265.

Diese Vorurteile betreffen die naturwissenschaftlich Tätigen. Ähnliche stereotype betreffen die „***Produkte***“ dieser Arbeit:

- Wissenschaftliche Ergebnisse als „wahr“, „objektiv“ und „unbezweifelbar“.
- Wissenschaftlicher Fortschritt als streng kumulativ.
- Wissenschaftliche Arbeit als streng regelgeleitet. („wissenschaftlicher Methode“).

- Wissenschaftliche Ergebnisse als fallibel und (auch) Resultat von sozialen Aushandlungs-prozessen.
- Wissenschaft in historische und soziale Kontexte eingebettet.
- Wissenschaftliches Arbeiten folgt keiner „Wissenschaftlichen Methode“, sondern erfordert Kreativität.

Höttecke, D. (2001) Die Vorstellungen von Schülern und Schülerinnen von der „Natur der Naturwissenschaften“. *Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften* **7**(1): 7-23.

Heering, P. & Kremer, K. (2018) Nature of Science. In: Krüger, D., Parchmann, I., Schecker, H. (Hrsg.) *Theorien in der naturwissenschaftsdidaktischen Forschung*. Springer: Berlin, Heidelberg.

Wie soll man NOS-Gesichtspunkte in den Unterricht integrieren?

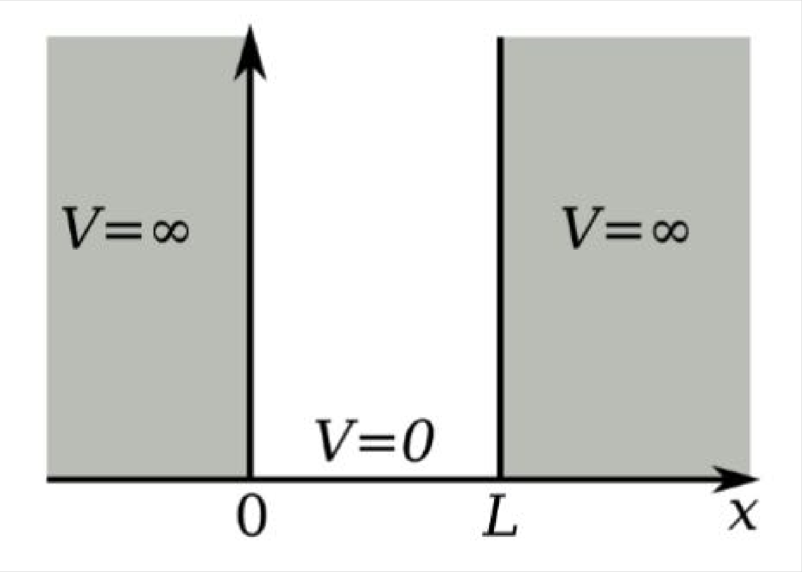
- Historische Fallstudien (übliche Narrative voller Ungenauigkeiten und Fehler)
- Black-Box-Experimente
- Hinweise auf ***aktuelle Forschung*** und ***Kontroversen***

Quanteninformations-theorie & Co.

Nature of Science und der unendliche hohe Potenzialtopf

(Höhepunkt der schulphysikalischen QM und einfachstes Beispiel der universitären QM)

Ein Teilchen mit Masse m in einem stückweise definierten Potenzial:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

„Klassische“ Lösung: Ruhendes oder elastisch reflektierendes Teilchen…

AN OUTLINE OF WAVE MECHANICS

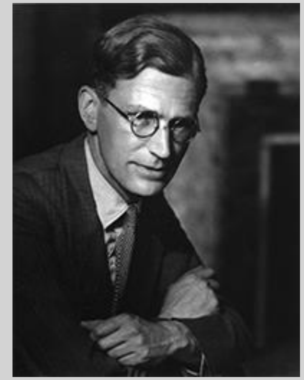
by

N. F. MOTT

Le

T

AT TH



Nevill F. Mott

SECTION III

NORMAL MODES OF A DE BROGLIE WAVE

Let us consider an electron shut up in a box. The walls of the box are to be of some perfectly elastic medium, so that the electrons are reflected without loss of energy. Now we have been able to describe all that we can observe of the behaviour of a free electron by means of a wave function ψ which obeys the wave equation; perhaps the same method will describe the behaviour of an electron in a box. Just what kind of solution to look for is not immediately obvious, so let us for a moment forget that our waves have any connection with electrons, and enquire as to what kind of oscillation waves in a box can perform.

Im Bereich mit „$V = \infty$“ hat die Eigenwertgleichung natürlich keine Lösung, also $\psi(x) = 0$. Das liefert die Stetigkeitsbedingungen:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad \text{(Dirichlet-Randbedingungen)}$$

Im Inneren des Potenzialtopfes gilt jedoch $V(x) = 0$.

Folgender Ansatz bietet sich an (mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$):

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (A, B \in \mathbb{C})$$

$\psi(x) = 0$ erfüllt man mit: $B = 0$

Einsetzen von $\psi(x) = A \sin kx$ in die freie Schrödinger-Gl. liefert

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=E_k}\psi(x)$$

Die Stetigkeit bei $x = L$ liefert:

$$\psi(L) = A\sin(L \cdot k) \overset{!}{=} 0.$$

Das Argument muss also ein ganzzahliges Vielfaches von π sein:

$$L \cdot k = n \cdot \pi \quad \text{mit: } n \in \mathbb{Z}.$$

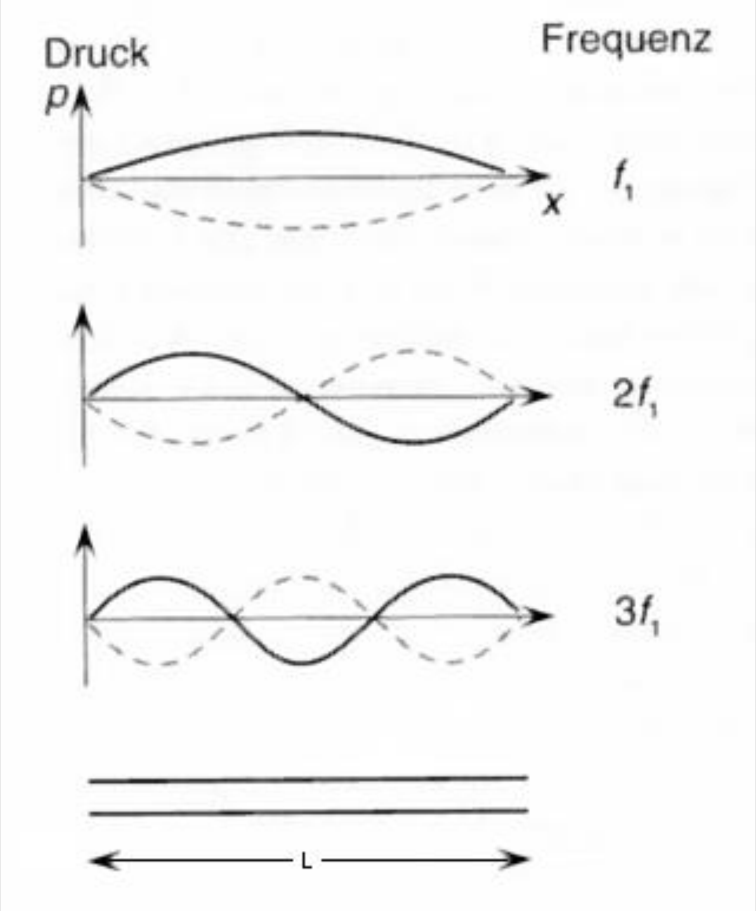
Nicht alle Wellenfunktionen, die die Schrödingergleichung im *Inneren* des Potentialtopfes erfüllen, sind auch Lösungen des *Gesamtproblems*. Erst die Stetigkeitsbedingungen am Rand des Potentialtopfes erzwingen die diskreten Lösungen, die für die Quantentheorie charakteristisch sind.

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad \text{bzw.} \quad n\frac{\lambda_n}{2} = L.$$

Die Eigenzustände entsprechen den stehenden Wellen einer schwingenden Saite bei festen Enden (man beachte: „festes Ende“ bedeutet ebenfalls „$V = \infty$“).

Unterschied zur Akustik:

- In der QM ist $\psi(x)$ eine Wahrscheinlichkeitsamplitude.
- Die Wellenfunktion muss normiert sein: $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$.



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=E_k}\psi(x)$$

$$E_n = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{(\hbar n\pi)^2}{2mL^2} \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

Es muss in $\psi_n(x) = A \sin k_n x$ noch die Konstante A bestimmt werden. Diese folgt aus der Normierungsbedingung:

$$\begin{aligned}
|A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx &= \frac{|A|^2}{2} \int_0^L 1 - \cos \frac{2n\pi x}{L} dx \\
&= \frac{|A|^2}{2} \left(\int_0^L dx - \int_0^L \cos \frac{2n\pi x}{L} dx \right) \\
&= \frac{|A|^2}{2} \left((L - \underbrace{\left[\frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \right]_0^L}_{=0} \right) \\
&= |A|^2 \frac{L}{2} \overset{!}{=} 1.
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

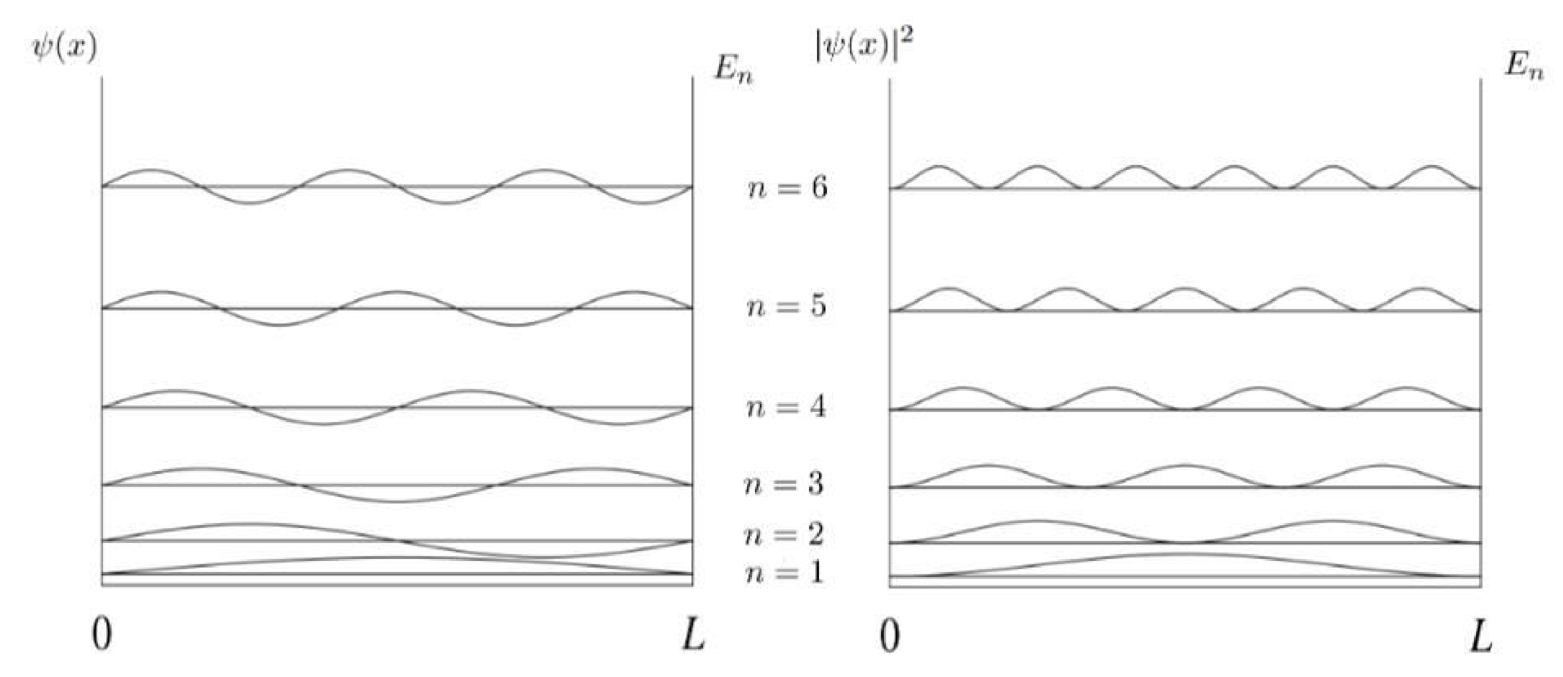
BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

Die Energie-Eigenfunktionen des unendlich hohen Potenzialtopfes

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad x \in [0, L] \quad \text{und} \quad n \in \mathbb{N}$$

mit: $E_n = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{(\hbar n \pi)^2}{2mL^2}$.

„vollständiges Funktionensystem"…



Was man an diesem Problem noch untersuchen kann:

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

- Die drei Parameter des Problems lauten m, L und h. Die einzige Kombination daraus mit der Dimension Energie lautet $\frac{h^2}{mL^2}$.
- In ψ taucht h nicht auf (Dimensionsgründe!), aber $E \sim h^2$(„quantisch“). Allerdings liefert $h \to 0$ keinen gescheiten „klassischen“ Grenzwert.
- Aber für $L \to \infty$ rücken die Energiewerte $E_n \sim \frac{1}{L^2}$ zusammen – die Quantisierungseffekte schrumpfen also. Wegen $E_n \sim \frac{1}{m}$ bewirken größere Massen ebenfalls ein „kontinuierlicheres“ Verhalten.
- Wegen $E_n \sim n^2$ liefert $n \to \infty$ keinen naheliegenden klassischen Limes. Aber bei rascher Oszillation wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit konstant! Dies entspricht dem „reflektierten Teilchen“ der klassischen Analogie…

Die Unbestimmtheitsrelation am unendlichen hohen Potenzialtopf

Der Grundzustand des Systems hat eine von Null verschiedene Energie: $E_1 = \frac{(\pi\hbar)^2}{2mL^2}$. Das ist gut, denn sonst könnte man anschaulich auf $p = 0$ schließen (also auch $\Delta p = 0$) und es würde „$\Delta x = \infty$“ folgen. Wegen $x \epsilon [0, L]$ natürlich Unfug!

Dieses Argument kann auch umgekehrt werden: $\Delta x \approx L$ scheint sinnvoll. Dann sollte $\Delta p \approx \frac{\hbar}{L}$ gelten und $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}$ der minimalen Energie entsprechen. Das passt (bis auf π^2)!

Man kann das Ganze auch „exakt machen“, und die Standardabweichungen von Orts- und Impulsoperator berechnen:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3} - 2}}_{\overset{n=1}{\approx} 1{,}13} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Der Impuls beim unendlichen hohen Potenzialtopf

In der QM lernt man, dass kommutierende Observable gemeinsame Eigenzustände haben.

Hier gilt $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}\right] = 0$ mit $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ dem Impulsoperator.
Sind die ψ_n also auch Impuls-Eigenzustände mit Eigenwerten „$p_n = \hbar k_n = \frac{\hbar n\pi}{L}$"?

$$\begin{aligned}\hat{p}\psi_n(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}\\ &= -i\frac{\hbar n\pi}{L}\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi x}{L}\\ &\neq p_n\cdot\psi_n(x).\end{aligned}$$

seltsam…

Kein Problem! $H = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ beschreibt ja auch nicht das ganze System. Außerdem legt die kinetische Energie den Impuls nur auf ein Vorzeichen fest (klassisch: $p = \pm\sqrt{2mE_{kin}}$)

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{1}{2i}e^{+i\frac{n\pi x}{L}}}_{=\psi_n^+} - \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{1}{2i}e^{-i\frac{n\pi x}{L}}}_{\psi_n^-}.$$

Nun gilt auch: $\hat{p}{\psi_n}^{\pm} = \pm\hbar k_n {\psi_n}^{\pm}$

Aber: $\psi_n^{\pm}(0) \neq 0$ sowie $\psi_n^{\pm}(L) \neq 0.$

Es werden also die Randbedingungen nicht erfüllt, diese Wellenfunktionen sind also gar keine zulässigen Lösungen des Problems.

Irgendetwas läuft hier gerade total falsch...

…der Impulsoperator $\hat{p} = i\hbar \frac{d}{dx}$

ist bei diesem Problem keine Beobachtungsgröße!

Beobachtungsgrößen in der QM

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

In der QM werden Beobachtungsgrößen durch „selbstadjungierte“ Operatoren beschrieben. Warum eigentlich?

Einfach: Erwartungswerte sollten reell sein, $\langle\psi|A\psi\rangle = \langle\psi|A\psi\rangle^*$

In komplexen Räumen gilt aber $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$.

$$\text{Daraus folgt } \langle\psi|A\psi\rangle = \langle A\psi|\psi\rangle^* = \langle\psi|A\psi\rangle^*$$
$$\Longrightarrow \langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A\psi\rangle$$

Kann man einen Operator auf diese Weise durch das Skalarprodukt schieben, nennt man ihn „symmetrisch“ oder „hermitesch“. In der QM muss man jedoch mehr fordern…

Selbstadjungiert ≠ hermitesch

Zu jedem linearen Operator A definiert man den adjungierten Operator $A^\dagger$, sodass gilt: $\langle\psi|A\phi\rangle = \left\langle A^\dagger\psi\middle|\phi\right\rangle$

Setzen wir $\psi = \phi$ und gilt $A = A^\dagger$ folgt die Bedingung der letzten Folie: $\langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A\psi\rangle$

Die Gleichung $A = A^\dagger$ („A selbstadjungiert") drückt aber nicht bloß aus, dass beide Operatoren die selbe Wirkung haben. Sie müssen auch in ihren **Definitionsbereichen** $\mathcal{D}(A)$ und $\mathcal{D}(A^\dagger)$ übereinstimmen!

Banales Bsp. $f(x) = x^2$ mit $x\epsilon[0,1]$ und $g(x) = x^2$ mit $x\epsilon\mathbb{R}$ sind unterschiedliche Funktionen.

Gilt $A\Psi = A^\dagger\Psi \quad \forall\Psi \in \mathcal{D}(A)$, aber lediglich $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger)$, nennt man den Operator A symmetrisch oder hermitesch. Selbstadjungiert nennt man ihn erst, wenn ebenfalls $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$ gilt (Reed und Simon, 1980, S. 255).

- In der QM müssen Beobachtungsgrößen durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben werden, da die Eigenzustände sonst keine Basis des Hilbertraums bilden!
- In der Literatur geht man mit dem Unterschied zwischen “selbstadjungiert” und “hermitesch” sehr schlampig um.

Reed, M. und Simon, B. (1980) *Methods of Modern Mathematical Physics: Functional Analysis (Vol. 1)*. Academic Press: San Diego.

Häufig zeigt man bloß, dass A hermitesch ist, ignoriert die Frage des Definitionsbereichs und erklärt ihn zu einem „selbstadjungierten Operator“. Für den Impulsoperator etwa:

$$
\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{p}_x \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\
&= \underbrace{\frac{\hbar}{i} \Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{\text{Randterm} = 0} + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^* \Psi dx \\
&= \langle \hat{p}_x \Psi | \Psi \rangle .
\end{aligned}
$$

Der Impulsoperator, der zu den Randbedingungen des unendlich hohen Potenzialtopfes passt, lautet:

$$\hat{p}_D = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (D \text{ wie Dirichlet})$$

$$\mathcal{D}(\hat{p}_D) = \{\psi \in \mathcal{H}^1[0,L] \mid \psi(0) = \psi(L) = 0\}$$

Behauptung: (i) Dieser Operator besitzt keine Eigenzustände, die die Bedingung $\psi(0) = 0$ erfüllen. (ii) Außerdem ist dieser Operator nicht selbstadjungiert! ***Beweis von (ii)***:

$$\mathcal{D}(\hat{p}_D^\dagger) = \{\phi \in \mathcal{H}^1[0,L] \mid \forall \psi \in \mathcal{D}(\hat{p}_D) \exists \tilde{\phi} \quad \text{sodass:} \quad \langle \phi | \hat{p}_D \psi \rangle = \langle \tilde{\phi} | \psi \rangle\}.$$

Für $\phi \in \mathcal{D}(\hat{p}_D^\dagger)$ definiert man dann: $\hat{p}_D^\dagger \phi = \tilde{\phi}$. Der adjungierte Operator ist hermitesch, da auch hier bei der partiellen Integration der Randterm verschwindet

$$\frac{\hbar}{i} \phi^*(x)\psi(x)\Big|_0^L = \phi^*(L)\psi(L) - \phi^*(0)\psi(0) = 0.$$

Dieser Term ist Null, weil $\psi(L) = \psi(0) = 0$ gilt. Für die ϕ muss diese Bedingung gar nicht gefordert werden. Ergo: $\mathcal{D}(p_D) \subset \mathcal{D}({p_D}^\dagger)$

Der Impulsoperator für den unendlich hohen Potenzialtopf mit den üblichen Randbedingungen $\psi(L) = \psi(0) = 0$ ist nicht selbstadjungiert. Bei diesem System ist der Impuls also keine Observable.

- Wir hatten $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}\right] = 0$ mit $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ betrachtet, und uns gewundert, dass die ψ_n keine gemeinsamen Eigenzustände sind. Die Voraussetzungen sind aber gar nicht erfüllt!

- Alle Betrachtungen zur Orts-Impuls-Unbestimmtheit sind gegenstandslos!

- Aber das ist noch nicht das Ende der Geschichte…

Selbstadjungierte Erweiterung

Details in Bonneau et al. (2001). Grundidee: Die Bedingung für Hermitizität kann auch ganz anders erfüllt werden.

$$\frac{\hbar}{i}\phi^*(x)\psi(x)\Big|_0^L = \phi^*(L)\psi(L) - \phi^*(0)\psi(0) = 0.$$

- Falls $\psi(L) = \psi(0)$ sowie $\phi(L) = \phi(0)$ wird diese Gleichung auch erfüllt („periodische Randbedingungen“).

- Und eigentlich genügt $\psi(L) = e^{i\theta}\psi(0)$ sowie $\phi(L) = e^{i\theta}\phi(0)$ bereits aus ($\theta = 0$ entspricht den periodischen Randbedingungen). Man kann zeigen, dass diese Operatoren selbstadjungiert sind.

Bonneau, G., Faraut, J., und Valent, G. (2001) Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics. *American Journal of Physics* **69**(3): 322.

Beim **unendlichen** hohen Potenzialtopf gibt es plötzlich **unendliche** viele selbstadjungierte Impulsoperatoren:

$$\hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\mathcal{D}(\hat{p}_\theta) = \{\psi \in \mathcal{H}^1[0, L] \mid \psi(L) = e^{i\theta}\psi(0), \theta \in [0, 2\pi]\}$$

$$\begin{aligned} \psi_n(x, \theta) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p_n x} \\ p_n &= \frac{\hbar}{L}(2\pi n + \theta) \quad \text{mit:} \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

$$E_n^\theta = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2\pi n + \theta)^2.$$

Links und rechtslaufende Wellen

Energie ist entartet

Vergleich der Energien bei
üblichen Randbedingungen vs. *periodische* Randbedingungen

$E_n = \frac{(\hbar n \pi)^2}{\mathbf{2} m L^2} \quad n \epsilon \mathbb{N}$

(weil $L = n \cdot \frac{\lambda}{2}$)

$E_n = \frac{\mathbf{2}(\hbar n \pi)^2}{m L^2} \quad n \epsilon \mathbb{Z}$

(weil $L = n \cdot \lambda$)

Wände undurchlässig

Was „links“ rausfließt, kommt „rechts“ wieder rein…

Was machen wir daraus?

- Einige Arbeiten argumentieren, dass hier bloß ein Artefakt des Modells vorliegt…(„$V \to \infty$“). Etwa Garbaczewski, P. und W. Karwowski (2004) Impenetrable barriers and canonical quantization. *Am. J. Phys*. 72: 924.
- Andere argumentieren, dass die Definition des Impulsoperators modifiziert werden muss. Etwa: Al-Hashimi, M. H., & Wiese, U. J. (2021) Alternative momentum concept for a quantum mechanical particle in a box. *Physical Review Research*, *3*(4), L042008.
- Fragen der Selbstadjungiertheit haben aktuelle Anwendungen in vielen Bereichen…Etwa: Cintio, A., und Michelangeli, A. (2021) Self-adjointness in quantum mechanics: a pedagogical path. Quantum Studies: Mathematics and Foundations 8(3): 271–306.

Herzlichen Dank für ihre Aufmerksamkeit!