

Das Teilchen im Kasten: Strukturen in der Wahrscheinlichkeitsdichte

P. Stifter¹, C. Leichtle¹, W. P. Schleich¹ und J. Marklof²

¹ Abteilung für Quantenphysik, Universität Ulm, D-89069 Ulm, Germany

² Abteilung für Theoretische Physik, Universität Ulm, D-89069 Ulm, Germany

Z. Naturforsch. **52 a**, 377–385 (1997); eingegangen am 28. Januar 1997

The Particle in a Box: Structures in the Probability Density

Recently W. Kinzel found characteristic structures, e. g. canals and ridges, in the contour plot of the quantum probability density of a particle moving in a box with infinitely high walls. Using the Wigner function we provide an analytical explanation of this numerical observation. Moreover we demonstrate that similar space-time structures also appear in other potentials, such as the one governing the vibrational motion of a diatomic molecule.

Vor kurzem hat Kinzel darauf hingewiesen [1], daß das wohlbekannte Problem der quantenmechanischen Bewegung eines Masseiteilchens in einem Kasten mit unendlich hohen Wänden noch immer Überraschungen bereithält. Er zeigte nämlich, daß sich in einem Höhenliniendiagramm der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ in der Raumzeit charakteristische Strukturen, d. h. Kanäle und Gebirgsgrate ausbilden [2]. Dieses numerisch entdeckte Phänomen, das wir in Abb. 1 noch einmal abgedruckt haben, bedarf nach Kinzel [1] noch einer analytischen Erklärung. In diesem Beitrag erklären wir das Auftreten der Kanäle und Höhenzüge mit Hilfe der Wigner'schen Phasenraumfunktion [3]. Wir diskutieren zunächst die Wigner-Funktion für ein Wellenpaket in einem Kasten und berechnen daraus die zeitabhängige quantenmechanische Ortsverteilung. Anschließend werden die auftretenden Strukturen am Beispiel eines Gauß-Wellenpaketes erläutert. Das analytische Verständnis dieses Phänomens erlaubt uns eine Verallgemeinerung: Wir zeigen, daß solche Raumzeitstrukturen auch bei der Schwingungsbewegung eines zweiatomigen Moleküls auftreten.

I. Spiegel-Wellenpakete sichern Randbedingung

Die Standardbeschreibung der zeitlichen Entwicklung eines Wellenpaketes in einem Kasten mit unendlich hohen Wänden basiert auf der Zerlegung des

Paketes nach Energieeigenfunktionen [4]. Wir folgen jedoch Max Born, der sich Ende der 50er Jahre motiviert durch Diskussionen [5] mit A. Einstein und durch seine Ideen zur Unbestimmtheit der klassischen Mechanik [6] ebenfalls mit diesem Problem beschäftigt hat. Sein Zugang wird uns insbesondere eine elegante Berechnung der Wigner-Funktion für das Teilchen im Kasten erlauben. Selbstverständlich sind beide Herangehensweisen mathematisch äquivalent, allerdings lassen sich durch die Verwendung der Wigner-Funktion die auftretenden Interferenzterme in sehr natürlicher und anschaulicher Weise verstehen, wie wir später zeigen werden.

Um die Randbedingungen

$$\psi(x = 0, t = 0) = \psi(x = L, t = 0) \equiv 0 \quad (1)$$

des Verschwindens der Wellenfunktion an den Wänden des Kastens bei $x = 0$ und $x = L$ zu gewährleisten, benutzt Born eine $2L$ -periodische Überlagerung

$$\psi(x, t = 0) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi(x - 2kL) \quad (2)$$

von antisymmetrischen Wellenfunktionen

$$\phi(x) = \varphi(x) - \varphi(-x), \quad (3)$$

die sich aus den Wellenpaketen $\varphi(x)$ und $\varphi(-x)$ zusammensetzen. Die Wellenfunktion $\psi(x, t = 0)$, (2), erfüllt die gewünschte Randbedingung (1), was man

Sonderdruckanforderungen an Prof. W. P. Schleich;
Fax: +49 731 502 3086.

0932-0784 / 97 / 500-0377 \$ 06.00 © – Verlag der Zeitschrift für Naturforschung, D-72072 Tübingen



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition “no derivative works”). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

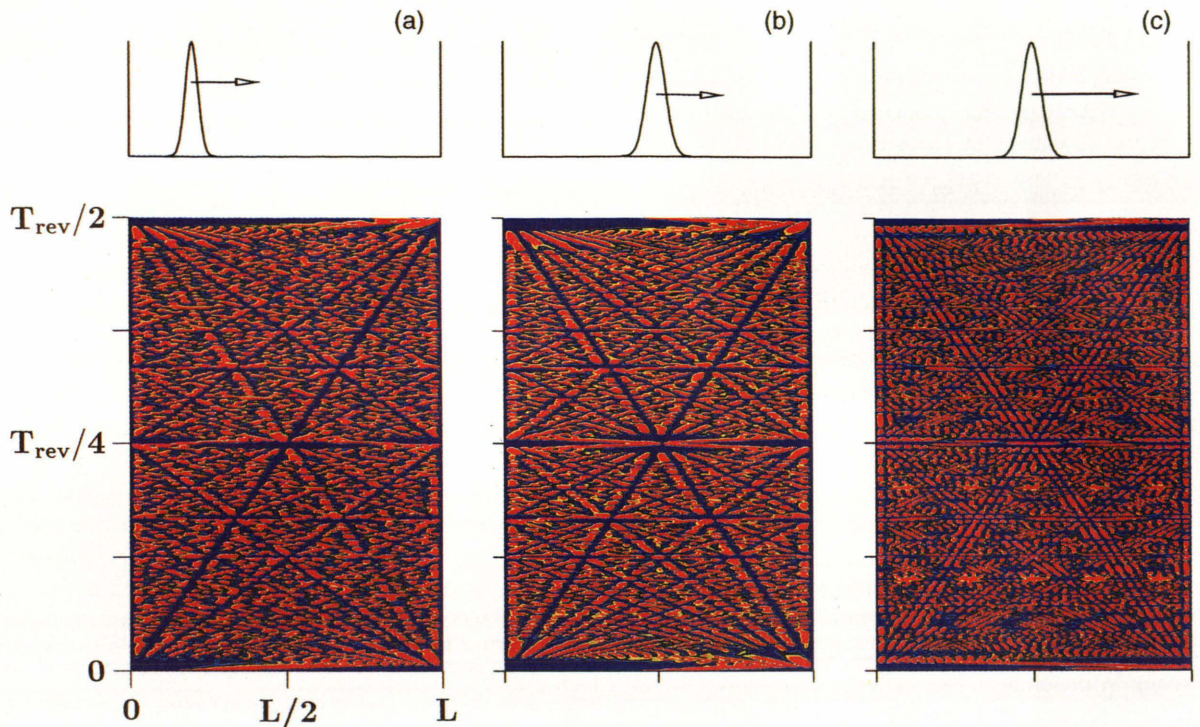


Abb. 1. Höhenlinien der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ für ein Wellenpaket in einem Kasten mit unendlich hohen und unendlich steilen Wänden. Das Anfangswellenpaket ist gaußförmig und startet in (a) am Ort $\bar{x} = 0.3 \cdot L$ mit der mittleren Geschwindigkeit $\bar{v} = 50 \cdot L/T_{\text{rev}}$. In (b) und (c) startet das Teilchen in der Mitte des Kastens, d.h. $\bar{x} = 0.5 \cdot L$ mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten $\bar{v} = 50 \cdot L/T_{\text{rev}}$, (b) und $\bar{v} = 100 \cdot L/T_{\text{rev}}$, (c). Der untersuchte Zeitraum erstreckt sich jeweils bis zur halben Revivalzeit.

leicht durch Einsetzen verifizieren kann. Darüberhinaus erlaubt dies, bei der Propagation des Wellenpaketes mit der Hamilton-Funktion $H = p^2/(2M)$ des freien Teilchens mit Impuls p und Masse M die Reflexionen an den Wänden zu ignorieren, da diese in der Konstruktion schon berücksichtigt wurden. Dies gewährleistet, daß (i) das auf diese Weise konstruierte Wellenpaket die Schrödinger-Gleichung eines Teilchens im Kasten mit unendlich hohen Wänden löst und (ii) die Randbedingung (1) zu *allen Zeiten* erfüllt.

II. Wigner Phasenraumverteilung: Kurze Wiederholung

Im Jahre 1932 schuf Eugene Wigner eine Formulierung der Quantenmechanik, die zu der von Schrödinger und Heisenberg äquivalent ist. Sie basiert auf dem Phasenraum, der durch den Ort x und den Impuls p aufgespannt ist. Unsere weitere Behandlung des

Kasten-Problems erfolgt nun durch die Phasenraumfunktion [3]

$$W_{\psi}(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{ipy/\hbar} \psi(x - y/2, t) \cdot \psi^*(x + y/2, t). \quad (4)$$

Dafür gibt es drei Gründe:

(i) Die Wigner-Funktion bringt klar die Interferezeigenschaft von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden, d. h. von Wellenfunktionen zum Ausdruck. Da nämlich gemäß (4) die Wigner-Funktion bilinear in der Wellenfunktion ist, besteht die Wigner-Funktion

$$W_{\phi}(x, p) = W_{\varphi}(x, p) + W_{\varphi}(-x, -p) + W_{\text{int}}(x, p) \quad (5)$$

der antisymmetrischen Wellenfunktion ϕ nicht nur aus den Wigner-Funktionen $W_{\varphi}(x, p)$ und $W_{\varphi}(-x, -p)$ der beiden an der Überlagerung

beteiligten Pakete $\varphi(x)$ und $\varphi(-x)$, sondern enthält zusätzlich noch den Interferenzterm [7]

$$W_{\text{int}}(x, p) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{ipy/\hbar} \varphi(x - y/2) \cdot \varphi^*(-x - y/2) + k. k. \quad (6)$$

Es ist dieser Term, der die Kanäle und Gebirge formt, wie wir im Folgenden zeigen werden.

(ii) Wir finden die Zeitentwicklung eines freien Teilchens in der Wigner-Funktionsdarstellung der Quantenmechanik, in dem wir den Ort x in der Wigner-Funktion $W(x, p; t = 0)$ zur Zeit $t = 0$ durch $x - pt/M$ ersetzen, d. h. es gilt

$$W(x, p; t) = W(x - \frac{p}{M}t, p; t = 0). \quad (7)$$

(iii) Die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ folgt aus der Wigner-Funktion durch Integration über den Impuls,

$$|\psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp W(x - \frac{p}{M}t, p; t = 0). \quad (8)$$

Dieses Ergebnis folgt unmittelbar aus der Definition (4) unter Benutzung der Integraldarstellung der Deltafunktion.

III. Wigner-Funktion für das Kastenpotential

Wir beginnen unsere Diskussion mit der Berechnung der Wigner-Funktion der Anfangswellenfunktion (2) und (3). Wie im Anhang gezeigt wird, finden wir

$$W_{\psi}(x, p; t = 0) = \frac{\pi\hbar}{2L} \sum_{n,l=-\infty}^{\infty} \delta(p - p_n) (-1)^{n \cdot l} \cdot W_{\phi}(x - lL, p_n). \quad (9)$$

Hierbei ist aufgrund der $2L$ -Periodizität der anfänglichen Wellenfunktion $\psi(x, t = 0)$, (2), der Impuls quantisiert, d. h. $p = p_n \equiv \frac{n\pi\hbar}{2L} = np_1$, wobei n alle positiven und negativen ganzen Zahlen durchläuft. Nur entlang der Geraden $p = p_n$ im Phasenraum nimmt die Wigner-Funktion des Anfangszustandes nichtverschwindende Werte an.

Wenn wir in diesem Ergebnis den Ort x durch $x - pt/M$ ersetzen und in den Ausdruck (8) für

die Wahrscheinlichkeitsdichte einsetzen, so können wir wegen den Deltafunktionen die Impulsintegration ausführen und erhalten

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\pi\hbar}{2L} \sum_{n,l=-\infty}^{\infty} (-1)^{n \cdot l} W_{\phi}[\chi_{n,l}(x, t), p_n]. \quad (10)$$

Das Argument

$$\chi_{n,l}(x, t) = x - \frac{p_n}{M}t - lL \quad (11)$$

der Wigner-Funktion ist der erste Hinweis auf die Kanäle und Höhenzüge in der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, t)|^2$. In der Tat beschreibt diese Funktion für $\chi_{n,l} \equiv 0$, d. h. für

$$\frac{t}{T_{\text{rev}}/2} = \frac{1}{n} \left(\frac{x}{L} - l \right) \quad (12)$$

Geraden, die von den Ecken der einzelnen Raumzeitstreifen des Zentralkastens und der Spiegelkästen loslaufen und die Steigung $\frac{1}{n}$ besitzen. Hier bezeichnet $T_{\text{rev}} = 4L^2M/(\pi\hbar)$ die Revivalzeit, nach der sich das Wellenpaket wieder vollständig restauriert hat.

IV. Gauß-Wellenpaket

Die Raumzeitstrukturen kommen deutlich am Beispiel eines Gauß-Paketes

$$\varphi(x) = (\sqrt{\pi}\Delta x)^{-\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \bar{x}}{\Delta x} \right)^2 \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \bar{p}(x - \bar{x}) \right] \quad (13)$$

mit Anfangsposition \bar{x} , Anfangsimpuls \bar{p} und Breite Δx zum Ausdruck. In Abb. 2 folgen wir M. Born und ersetzen dieses einzelne Gauß-Paket im Kasten (a) durch eine $2L$ -periodische Anordnung (b) von antisymmetrischen Überlagerungen von Gauß-Wellenfunktionen. Die Wigner-Phasenraumfunktion (c) für diese Anordnung besteht zum einen aus der gaußförmigen Wigner-Funktion

$$W_{\varphi}(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \cdot \exp \left[-\left(\frac{x - \bar{x}}{\Delta x} \right)^2 \right] \exp \left[-\left(\frac{p - \bar{p}}{\Delta p} \right)^2 \right] \quad (14)$$

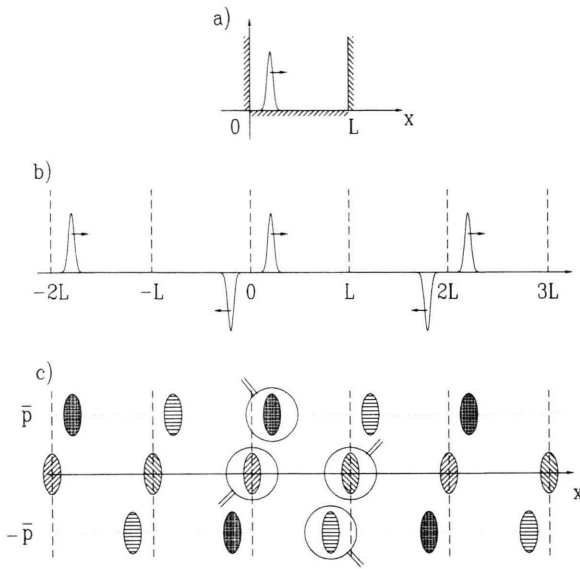


Abb. 2. (a) Wellenpaket in einem Kasten mit unendlich hohen und unendlich steilen Wänden. (b) Um die Randbedingung des Verschwindens der Wellenfunktion an den Wänden bei $x = 0$ und $x = L$ zu befriedigen, betrachten wir eine $2L$ -periodische Anordnung von antisymmetrischen Wellenfunktionen $\phi(x) = \varphi(x) - \varphi(-x)$. Die einzelnen Pakete in den Spiegelkästen unterscheiden sich nicht nur in ihrem Vorzeichen, sondern auch in dem Vorzeichen ihrer Geschwindigkeit. (c) Für ein Gauß-Wellenpaket zeigt die Wigner-Funktion dieser Überlagerung von Wellenpaketen im x - p -Phasenraum neben den klassischen Gauß-Paketen (schattierte Ellipsenscheiben) auch Interferenzterme. In diesen schraffiert gezeichneten Phasenraumgebieten kann die Wigner-Funktion auch negative Werte annehmen. Zur Bedeutung der verschiedenen Schraffierungen siehe Text.

des individuellen Paketes φ . Hierbei ist $\Delta p = \hbar/\Delta x$ die anfängliche Impulsunschärfe. Zum anderen bringt die Überlagerung den Interferenzterm

$$W_{\text{int}}(x, p) = -\frac{2}{\pi\hbar} \cos\left[2\frac{p\bar{x} + \bar{p}x}{\hbar}\right] \exp\left[-\left(\frac{x}{\Delta x}\right)^2\right] \cdot \exp\left[-\left(\frac{p}{\Delta p}\right)^2\right]. \quad (15)$$

ins Spiel. Außerdem gibt es aufgrund der $2L$ -Periodizität noch zusätzliche Interferenzterme. In Abb. 2c stellen wir die Wigner-Funktion der individuellen Terme durch schattierte Ellipsen dar, während die Interferenzterme durch diagonal oder horizontal schraffierte Ellipsen repräsentiert werden. Die Abhängigkeit dieser Beiträge zur Gesamt-Wigner-Funktion W_ψ vom Ort und dem Impuls zeigt Abbildung 3. Nach

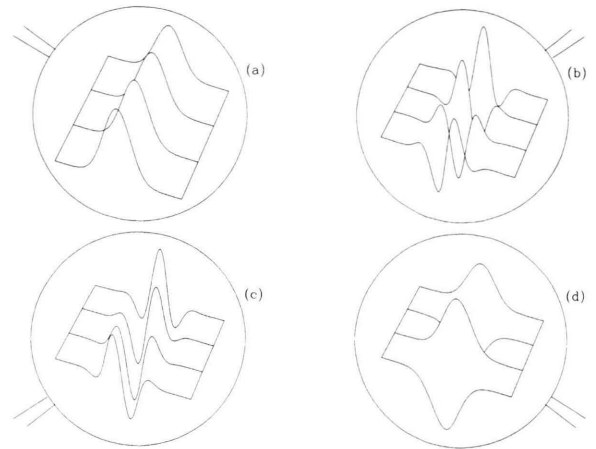


Abb. 3. Verschiedene Beiträge zur Wigner-Funktion der periodischen Anordnung von Gauß-Wellenpaketen aus Fig. 2b. In (a) zeigen wir die Gauß-Glocke des einzelnen Paketes während (b), (c) und (d) die Interferenzterme auf Grund der Spiegelwellenpakete darstellen. Wegen der $2L$ -Periodizität der Anordnung ist der Impuls quantisiert. Die Beiträge (b) und (c) an den Wänden weisen charakteristische Oszillationen auf, die sich in der Phase unterscheiden. Dies führt dazu, daß sich die rechts und links laufenden Kanäle in ihrer Struktur unterscheiden.

Einsetzen von W_φ und W_{int} in (5) und (10) folgt somit für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2L} \sum_{n,l=-\infty}^{\infty} (-1)^{n \cdot l} \left[G_{n,l}^{(+)} + G_{n,l}^{(-)} + I_{n,l} \right] \quad (16)$$

wobei

$$G_{n,l}^{(\pm)} = \pi\hbar W_\varphi \left[\pm \chi_{n,l}(x, t), \pm p_n \right] \quad (17)$$

und

$$I_{n,l} = \pi\hbar W_{\text{int}} \left[\chi_{n,l}(x, t), p_n \right]. \quad (18)$$

Somit ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\psi(x, t)|^2$ eine unendliche Überlagerung von Gauß-Funktionen $G_{n,l}^{(\pm)}$ und modulierten Gauß-Funktionen $I_{n,l}$. Dabei tritt eine Summe über alle Impulse p_n und über alle Kästen, nummeriert durch den Summationsindex l , auf. Dieser Ausdruck ist exakt. Wenn man jetzt die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t)$ an einem festen Raumzeitpunkt (x, t) wissen möchte, so muß man die Doppelsumme ausführen. Das Ergebnis läßt sich als Differenz zweier Jakobi-Thetafunktionen darstellen. Wenn man jedoch nur näherungsweise diesen Wert der Wahrscheinlichkeitsdichte kennen möchte,

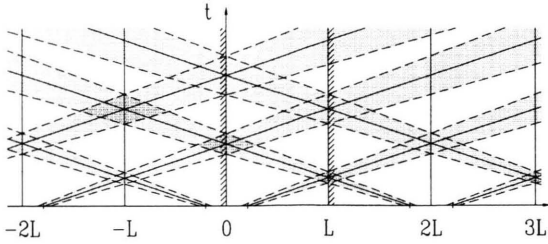


Abb. 4. Bewegung des Teilchens in dem Kasten im Raumzeit-Diagramm als periodische Überlagerung von Gauß-Strahlen.

sind andere Darstellungen [2, 8], die auf der Idee von "fractional revivals" beruhen, von Vorteil. Zum qualitativen und quantitativen Verständnis der Kanäle und Gebirge ist jedoch die vorliegende Form für $P(x, t)$ sehr geeignet, wie wir jetzt zeigen werden.

V. Kanäle und Gebirge aus interferierenden Gaußstrahlen

Zunächst diskutieren wir die Form der einzelnen Beiträge zu diesen Summen und zeigen dann wie hieraus die Strukturen in Abb. 1 zustandekommen. Die Beiträge $G_{n,l}^{(\pm)}$ sind Gauß-Strahlen, die, wie in Abb. 4 gezeigt, ausgehend von der Anfangsposition \bar{x} und deren Spiegelbildern $\pm\bar{x} \pm lL$ entlang der Geraden

$$\frac{t}{T_{\text{rev}}/2} = \frac{1}{n} \left(\frac{x}{L} - l \pm \frac{\bar{x}}{L} \right) \quad (19)$$

verlaufen. Wegen der Gaußgewichtung der Impulse um \bar{p} ist die Steigung $\frac{1}{n}$ dieser Geraden ebenfalls gemäß einer Gaußverteilung um $n \simeq \bar{n} \equiv \bar{p}/p_1$ gewichtet. Man beachte jedoch, daß diese Strahlen nicht immer positiv sind. Ihr Vorzeichen ist durch den Faktor $(-1)^{n \cdot l}$ gegeben. Dies führt zu einer stark oszillierenden Struktur. Die dominierenden Strahlen treten auf für $|p_n - \bar{p}| \ll \Delta p$ und folgen den Geraden (19).

Wir wollen zunächst ein Teilchen mit sehr großem makroskopischen Impuls $\bar{p} \gg p_1$ betrachten, wie in Abbn. 1 und 2 dargestellt. In diesem Fall verlaufen die dominierenden Strahlen äußerst flach und entsprechen der periodischen Bewegung eines klassischen Teilchens, das zwischen den Wänden des Kastens gefangen ist. Aufgrund der von Null verschiedenen Breite Δx und der damit verbundenen Breite Δp der Impulse des Anfangswellenpaketes hat jeder Strahl einen von Null verschiedenen Öffnungswinkel.

Dies führt dazu, daß die Strahlen, die von den Spiegelkästen mit großen l -Werten ausgehen, im Zentralkasten überlappen, wie in Abb. 4 ersichtlich. Für gerade l ergibt sich für den Vorfaktor von $G_{n,l}^{(\pm)}$ der Wert $(-1)^{n \cdot l} = +1$, natürlich für beliebiges n . Aus diesem Grund haben wir solche Beiträge in Abb. 2c schematisch als *schattierte* Ellipsenscheiben dargestellt. Im Gegensatz dazu sind die Terme zu ungeradem l *horizontal schraffiert* gezeichnet, da die Vorfaktoren in diesem Fall $(-1)^{n \cdot l} = (-1)^n$ lauten. Während die Beiträge erster Art (l gerade) zu einem konstanten Hintergrund führen, sind die Beiträge zweiter Art (l ungerade) für sehr feine oszillierende Strukturen auf diesem Hintergrund verantwortlich (Abbildung 1). Diese Feinstruktur geht für sehr kleine mittlere Impulse $\bar{p} \ll \Delta p$ in dominante Täler und Höhenzüge über, wie wir weiter unten zeigen werden.

Die in Abb. 1 sichtbaren Täler und Höhenzüge haben dagegen ihre Ursache in den Interferenztermen $I_{n,l}$, die in Abb. 2c durch *diagonal schraffierte* Ellipsenscheiben dargestellt sind. Diese Beiträge liefern Strahlen, die nicht von der Anfangsposition des Wellenpaketes und seinen Spiegelbildern, sondern gemäß (11) und (15) von den Ecken des Raumzeitstreifens des Zentralkastens und dessen Spiegelbilder ausgehen. Wegen der Gauß-Gewichtung der Impulse p_n um den Impuls $p = 0$ werden jetzt im Gegensatz zu den beiden ersten Beiträgen in (16) kleine Impulse p_n und somit kleine Werte von n betont. Dies führt dazu, daß gemäß (12) nur Strahlen mit großen Steigungen vorkommen. Diese Strahlen überlagern sich mit dem Hintergrund, der von den ersten beiden Beiträgen in (16) gebildet wird. Dabei ist wieder zu bedenken, daß für ungerade Produkte $n \cdot l$ die Strahlen auf diesen Hintergrund addiert werden, bzw. für gerade Produkte $n \cdot l$ Täler in diesen Hintergrund geschnitten werden. Im Gegensatz zu den ersten beiden Termen in (16) weist der dritte Term noch eine Besonderheit auf: Aufgrund des Kosinus ist der Gauß-Strahl moduliert. Die Periode und die Phase dieser Modulation sind durch das Inverse des Anfangsimpulses \bar{p} und durch $p_n \bar{x}$ gegeben. Falls $\bar{p} > \Delta p$, führt diese Modulation zu einer Substruktur der Gaußstrahlen. So zeigt z. B. in Abb. 1 der Strahl, der die linke untere Ecke mit der rechten oberen Ecke des Raumzeitstreifens verbindet, einen Kanal, der von zwei Höhenzügen eingerahmt wird. Dies läßt sich leicht aus (16) erklären, wenn man sich erinnert, daß dieser Strahl den Werten $n = 1$ und $l = 0$ entspricht und mit $\bar{x} = L/2$ folgt

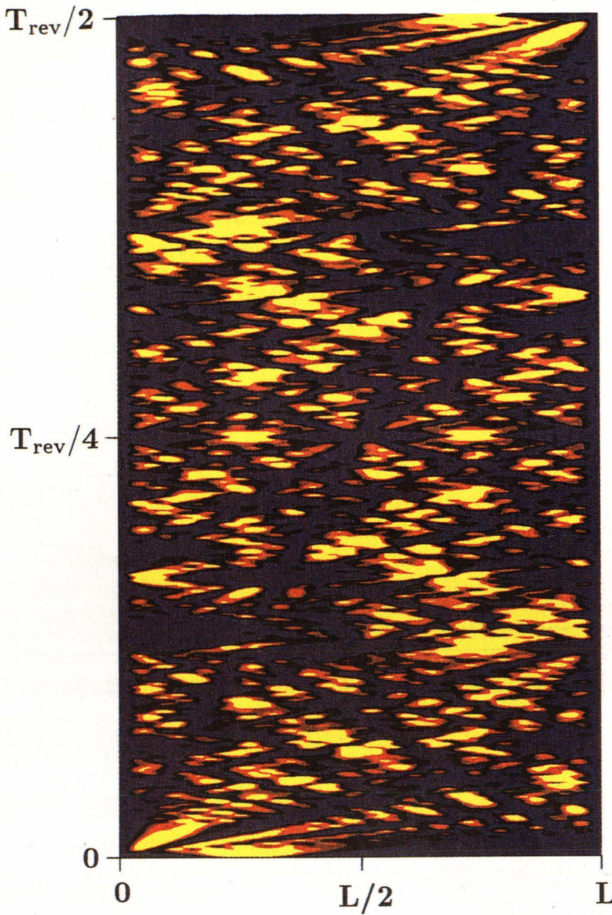


Abb. 5. Höhenlinien der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ für ein Wellenpaket in einem Kasten mit unendlich hohen und unendlich steilen Wänden. Das Anfangswellenpaket ist gaußförmig mit einem Startpunkt $\bar{x} = L/4$ und Impuls $\bar{p} = 0$. Der untersuchte Zeitraum erstreckt sich bis zur halben Revivalzeit T_{rev} . Aufgrund des verschwindenden Impulses $\bar{p} = 0$ treten nun auch Kanäle entlang von Geraden auf, die bei $\bar{x} = L/4$ und $L - \bar{x} = 3L/4$ senkrecht, bzw. mit Steigung $1/n$ starten. Betont sind hier große Steigungen 1, $1/2$, $1/3$. (Diese Effekte lassen sich am besten erkennen, wenn man die Abbildung etwas schräg gegen das Licht hält.)

$$I_{1,0} = -2 \sin \left(2 \frac{\bar{p} \chi_{1,0}(x, t)}{\hbar} \right) \cdot \exp \left[- \left(\frac{\chi_{1,0}(x, t)}{\Delta x} \right)^2 \right] \exp \left[- \left(\frac{p_1}{\Delta p} \right)^2 \right] \quad (20)$$

Somit liegt in nächster Nachbarschaft zur Geraden $\chi_{1,0}$ ein Minimum, das durch die Bedingung $2\bar{p}\chi_{1,0}/\hbar = -\pi/2$ gegeben ist, d.h. auf der Geraden

$$\frac{t}{T_{\text{rev}}/2} = \frac{x}{L} + \frac{p_1}{2\bar{p}} \quad (21)$$

liegt.

Bis jetzt haben wir Impulswerte $\bar{p} \gg \Delta p$ betrachtet. Wenn dieser mittlere Impuls sehr klein wird, d.h. für $\bar{p} \ll \Delta p$, übernehmen die Terme $G_{n,l}^{(\pm)}$ eine ähnliche Rolle wie die Interferenzterme $I_{n,l}$, weil sie nun auch nahe an der x -Achse liegen, und deshalb auch in diesen Termen nun kleine Impulswerte betont werden. Sie führen, wie in Abb. 5 erkennbar zu Höhenzügen und Tälern, die vom Ort \bar{x} des anfänglichen Wellenpaketes bzw. seinen Spiegelbildern $\pm \bar{x} \pm lL$ ausgehen. Höhenzüge ergeben sich für die Vorfaktoren $(-1)^{n \cdot l} = +1$ (z.B. für gerades l), wohingegen sich Täler für die Vorfaktoren $(-1)^n = -1$ ausbilden.

VI. Strukturen beim Molekül

Diese Herleitung zeigt klar, daß die Strukturen in der Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Raumzeit aus der antisymmetrischen Überlagerung ϕ der beiden Wellenpakete $\varphi(x)$ und $\varphi(-x)$ in (3) herrühren. Dies gibt einen Hinweis darauf, bei welchen Zuständen man ähnliche Strukturen bei anderen Potentialen findet. Zu diesem Zweck zeigen wir abschließend in Abb. 6 Höhenlinien eines im angeregten elektronischen Zustand $A(^1\Sigma_u^+)$ propagierenden Na_2 -Vibrationswellenpaketes, dessen Anfangszustand durch die Überlagerung

$$\psi(r, t = 0) = \varphi_0(r) - \varphi_0(r, t = \frac{T_{\text{vib}}}{2}) \quad (22)$$

gegeben ist. Hier bedeutet $\varphi_0(r)$ den Vibrationsgrundzustand im elektronischen Grundzustand $X(^1\Sigma_g^+)$ und $\varphi_0(r, t = \frac{T_{\text{vib}}}{2})$ denselben Zustand, nachdem er um eine halbe Schwingungsperiode T_{vib} im Potential $A(^1\Sigma_u^+)$ propagiert wurde [9]. Somit bilden sich in diesem Morse-ähnlichen Potential Strukturen, die aber jetzt nicht mehr entlang von Geraden verlaufen. Eine genauere Analyse dieser Strukturen soll jedoch nicht im Rahmen dieser Arbeit erfolgen.

VII. Zusammenfassung

Zusammenfassend stellen wir fest: Um das Verschwinden der Wellenfunktion an den Rändern eines unendlich hohen Kastens der Länge L zu garantieren, benötigt man nach Born eine $2L$ -periodische Anordnung von antisymmetrischen Wellenfunktionen ϕ . Letztere ist eine kohärente Überlagerung aus zwei Wellenpaketen $\varphi(x)$ und $\varphi(-x)$. Diese Überlagerung äußert sich in der Wigner-Funktion in

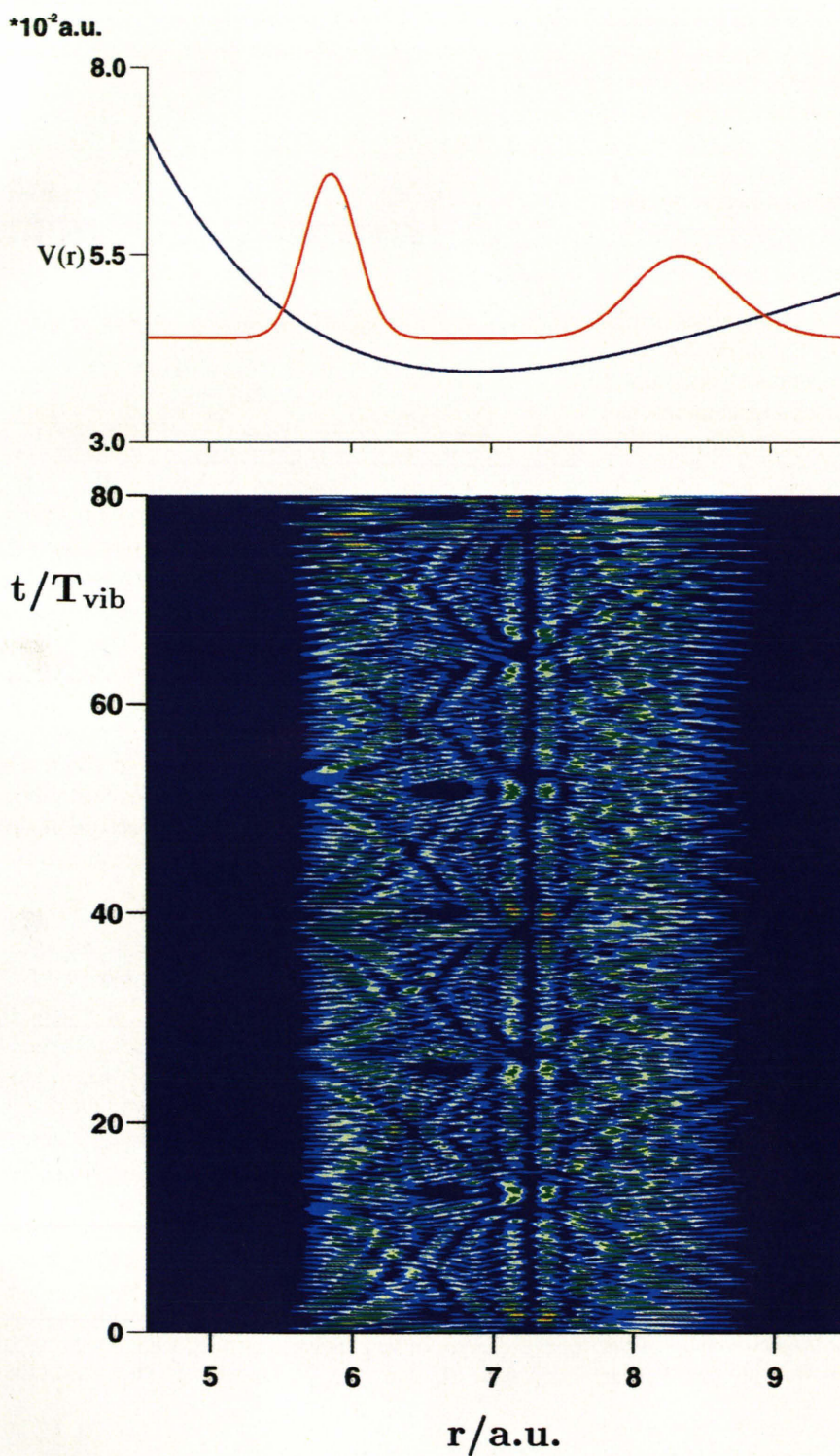


Abb. 6. Höhenlinien der numerisch berechneten quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte $P(r, t) = |\psi(r, t)|^2$ für ein Vibrationswellenpaket in Na_2 . Der Zeitbereich erstreckt sich über 80 Schwingungsperioden $T_{\text{vib}} \simeq 300 \text{ fsec}$. Dies entspricht in etwa einem Viertel der Revivalzeit T_{rev} . Das anfängliche Wellenpaket besteht aus einer Superposition zweier Wellenpakete, die an den beiden klassischen Umkehrpunkten lokalisiert sind und eine relative Phase von π haben. Wir danken M. Shapiro (Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel) für die Bereitstellung der Daten.

einem Interferenzterm der an den Wänden des Kastens und seinen Spiegelbildern entlang der x -Achse lokalisiert ist. Dieser Interferenzterm ist die Ursache für die Gebirge und Kanäle. Diese Herleitung und unser Beispiel des zweiatomigen Moleküls zeigen, daß das Phänomen der Kanäle und Gebirge in der Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Raumzeit von großer Allgemeinheit ist.

Danksagung

Wir danken M. V. Berry, I. Bialynicki-Birula, F. Großmann, A. Kaplan, W. E. Lamb, M. M. Nieto und J.-M. Rost für viele anregende Diskussionen. J. M. dankt der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die freundliche Unterstützung unter Vertrag DFG-Ste 241/7-2.

Appendix A: Wigner-Funktion des Anfangszustandes

In diesem Anhang berechnen wir die Wigner-Funktion des Anfangszustandes. Durch Einsetzen der Anfangswellenfunktion (2) in die Definitionsgleichung (4) der Wigner-Funktion finden wir den Ausdruck

$$W_\psi(x, p; t = 0) = \sum_{r,s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{ipy/\hbar} \cdot \phi(x - 2rL - y/2) \phi^*(x - 2sL + y/2), \quad (\text{A1})$$

der sich durch Einführung der Integrationsvariablen $\xi = y - 4sL$ und den Summationsindex $l = r + s$ in

$$W_\psi(x, p; t = 0) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2pL}{\pi\hbar} \right) s \right] \cdot \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\xi e^{ip\xi/\hbar} \phi(x - 2lL - \xi/2) \phi^*(x + \xi/2) \quad (\text{A2})$$

umformen läßt. Unter Benutzung der Beziehungen

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i \nu s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(n - \nu) \quad (\text{A3})$$

und $\delta(\alpha x) = \delta(x)/|\alpha|$ erhält man die quantisierten Impulse $p_n = n\pi\hbar/(2L)$. Mit der neuen Integrationsvariablen $y = \xi + 2lL$ folgt wegen $\exp(i2p_n l L/\hbar) = \exp(i\pi n l) = (-1)^{n \cdot l}$ schließlich

$$W_\psi(x, p; t = 0) = \frac{\pi\hbar}{2L} \sum_{n,l=-\infty}^{\infty} \delta(p - p_n) (-1)^{n \cdot l} \cdot W_\phi(x - lL, p_n), \quad (\text{A4})$$

wobei W_ϕ die Wigner-Funktion des Überlagerungszustandes $\phi, (3)$, ist.

- [1] W. Kinzel, Phys. Bl. **51**, 1190 (1995). Siehe auch die Titelseite dieses Heftes und die Kommentare von H. Genz und H.-M. Staudenmaier, Phys. Bl. **52**, 192 (1996).
- [2] Im Zusammenhang mit dem fraktalen Talbot-Effekt in der Optik hat M. V. Berry ebenfalls solche Kanäle und Gebirge beobachtet; siehe z. B. M. V. Berry, J. Phys. A **29**, 6617 (1996), und M. V. Berry u. S. Klein, J. Mod. Optics **43**, 2139 (1996).
- [3] Für einen Überblick über die Wigner-Funktion siehe M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully u. E. P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [4] Eine Erklärung der Kanäle aus der Energiedarstellung findet sich in F. Großmann, J.-M. Rost u. W. P. Schleich, J. Phys. A **30**, Heft 9, L277 (1997) und P. Stifter, J. Marklof, W. P. Schleich (in Vorbereitung), siehe auch J. Marklof, Limit Theorems for Theta Sums with Applications in Quantum Mechanics, Shaker Verlag, Aachen 1997.
- [5] Der Born-Einstein Dialog zu diesem Problem findet sich in Albert Einstein, Hedwig und Max Born, Briefwechsel 1916-1955 (Nymphenburger Verlagsanstalt, München, 1969), pp. 275; siehe auch M. Born, Kgl. danske Vidensk. Selsk. mat-fys. Medd. **30**, 2 (1955) und M. Born and W. Ludwig, Z. Phys. **150**, 106 (1958).
- [6] M. Born, Science **122**, 675 (1955), Phys. Bl. **11**, 49 (1955) und Z. Phys. **153**, 372 (1958).

- [7] Dieser Interferenzterm ist verantwortlich für alle nichtklassischen Eigenschaften von Schrödinger-Katzen, siehe auch W. P. Schleich, M. Pernigo und Fam Le Kien, *Phys. Rev. A* **44**, 2177 (1991). Diese sind inzwischen bei mechanischen Oszillatoren wie ein Ion in der Paulfalle [C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King u. D. J. Wineland, *Science* **272**, 1131 (1996)] oder einer Mode des elektromagnetischen Feldes in einem Resonator [M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J. M. Raimond u. S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996)] beobachtet worden.
- [8] P. Stifter, C. Leichtle, W. E. Lamb u. W. P. Schleich (in Vorbereitung). Die Diskussion asymptotischer Eigenschaften von Thetafunktionen findet sich auch zahlreich in der mathematischen Literatur, siehe z.B. G. H. Hardy und J. E. Littlewood, *Acta Math.* **37**, 193 (1914), H. Fiedler, W. Jurkat u. O. Körner, *Acta Arith.* **32**, 129 (1977), J. Marklof, Preprint (Princeton Univ., 1996) und die dort enthaltenen Referenzen.
- [9] Solche Zustände lassen sich mit kurzen Laserpulsen erzeugen, siehe M. W. Noel u. C. R. Stroud, Jr., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1913 (1996).