Kai Hebeler, Jan Hoppe, Lars Zurek
Achim Schwenk
Institut für Kernphysik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

# Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 3

Abgabe der mit (∗) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 2. November, Anfang der Vorlesung

26. Oktober 2021

## Aufgabe P2: Zwei-Minuten-Fragen

1. Was würde man erwarten, wenn sich der photoelektrische Effekt klassisch (d.h. ohne Quantenmechanik) erklären ließe?

2. Weshalb hatten wir im Doppelspaltexperiment angenommen, dass die Breite eines Spalts viel kleiner ist als die de-Broglie-Wellenlänge der Teilchen?

3. In welchem Fall ist das in der Vorlesung besprochene Wellenpaket eine Gauß-Funktion im Ortsraum? In welchem Fall ist es eine ebene Welle?

4. Beweisen Sie die in Übungsblatt 1 eingeführte Parseval-Gleichung für die Fourier-Transformation
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |f(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, |\tilde{f}(k)|^2.$$

5. Wie lauten Orts- und Impulsoperator sowohl im Ortsraum als auch im Impulsraum?

## Aufgabe H4: Der Paritätsoperator (5 Punkte) (∗)

Der Paritätsoperator $\widehat{\mathcal{P}}$ wirkt auf eine Wellenfunktion $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ wie
$$\widehat{\mathcal{P}}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(-\boldsymbol{r}, t)\,. \tag{1}$$

1. Zeigen Sie, dass $\widehat{\mathcal{P}}$ die Eigenwerte $\pm 1$ besitzt.

Lösung: Betrachte
$$\widehat{\mathcal{P}}^2\psi(\boldsymbol{r}) = \widehat{\mathcal{P}}(\widehat{\mathcal{P}}\psi(\boldsymbol{r})) = \widehat{\mathcal{P}}\psi(-\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}) \;\Leftrightarrow\; \widehat{\mathcal{P}}^2 \equiv 1, \tag{2}$$
was sich auch als
$$\widehat{\mathcal{P}} = \widehat{\mathcal{P}}^{-1} \tag{3}$$
schreiben lässt.
Für Eigenwerte $P$ und Eigenfunktionen $\phi(\boldsymbol{r})$ gilt $\widehat{\mathcal{P}}\phi(\boldsymbol{r}) = P\phi(\boldsymbol{r})$ und somit $\widehat{\mathcal{P}}^2\phi(\boldsymbol{r}) = P^2\phi(\boldsymbol{r})$. Zusammen mit (2) ist demnach $P^2 = 1 \Leftrightarrow P = \pm 1$.

2. Zeigen Sie, dass die Operatoren

$$\widehat{\Pi}_{\pm} \equiv \frac{1}{2}\left(1 \pm \widehat{\mathcal{P}}\right) \tag{4}$$

Projektoren sind, d.h. dass $\widehat{\Pi}_{\pm}^2 = \widehat{\Pi}_{\pm}$ gilt. Zeigen Sie auch, dass $\widehat{\Pi}_{+}\widehat{\Pi}_{-} = \widehat{\Pi}_{-}\widehat{\Pi}_{+} = 0$ (d.h. die Projektoren sind orthogonal), dass $\widehat{\Pi}_{+} + \widehat{\Pi}_{-} = 1$, und dass $\widehat{\Pi}_{\pm}$ die Wellenfunktion auf gerade Funktionen für „+"(positive Parität) und ungerade Funktionen für „−"(negative Parität) projiziert.

Lösung: Der Operator

$$\widehat{\Pi}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \widehat{\mathcal{P}}) \tag{5}$$

ist ein Projektionsoperator, denn der (lineare) Operator erfüllt

$$\widehat{\Pi}_{\pm}^2 = \frac{1}{4}(1 \pm \widehat{\mathcal{P}})^2 = \frac{1}{4}(1^2 \pm \widehat{\mathcal{P}} \pm \widehat{\mathcal{P}} + \widehat{\mathcal{P}}^2) \overset{\widehat{\mathcal{P}}^2=1}{=} \frac{1}{4}(1^2 + 1^2 \pm 2\widehat{\mathcal{P}}) = \frac{1}{2}(1 \pm \widehat{\mathcal{P}}) \Rightarrow \widehat{\Pi}_{\pm}^2 = \widehat{\Pi}_{\pm}. \tag{6}$$

Außerdem ist

$$\widehat{\Pi}_{\pm}\widehat{\Pi}_{\mp} = \frac{1}{4}(1 \pm \widehat{\mathcal{P}} \mp \widehat{\mathcal{P}} - \widehat{\mathcal{P}}^2) = 0 \tag{7}$$

und

$$\widehat{\Pi}_{+} + \widehat{\Pi}_{-} = \frac{1}{2}((1 + \widehat{\mathcal{P}}) + (1 - \widehat{\mathcal{P}})) = 1. \tag{8}$$

Es ist

$$\widehat{\Pi}_{+}\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\left(\psi(\boldsymbol{r}) + \widehat{\mathcal{P}}\psi(\boldsymbol{r})\right) = \frac{1}{2}\left(\psi(\boldsymbol{r}) + \psi(-\boldsymbol{r})\right) \tag{9}$$

eine gerade Funktion und

$$\widehat{\Pi}_{-}\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\left(\psi(\boldsymbol{r}) - \widehat{\mathcal{P}}\psi(\boldsymbol{r})\right) = \frac{1}{2}\left(\psi(\boldsymbol{r}) - \psi(-\boldsymbol{r})\right) \tag{10}$$

eine ungerade Funktion. Damit projiziert $\widehat{\Pi}_{+}$ auf gerade und $\widehat{\Pi}_{-}$ auf ungerade Funktionen.

3. Betrachten Sie nun den Paritätsoperator in einer Dimension. Berechnen Sie den Erwartungswert der Projektion auf negative Parität $\widehat{\Pi}_{-}$, wenn die Wellenfunktion des Zustands durch ein Gaußsches Wellenpaket,

$$\psi(x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x - x_0}{a}\right)^2\right] \tag{11}$$

gegeben ist. Das Resultat gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, eine negative Parität des Zustands zu messen.

Hinweis: Für $a \in \mathbb{R}$ gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) = \sqrt{\pi a^2}\,. \tag{12}$$

Lösung: Wir spalten die Wellenfunktion in Terme positiver und negativer Parität auf

$$\psi(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x)\,, \tag{13}$$

wobei die jeweiligen Terme mit Hilfe des Projektionsoperators gegeben sind durch

$$\psi_+(x) = \widehat{\Pi}_+ \psi(x)\,, \tag{14}$$
$$\psi_-(x) = \widehat{\Pi}_- \psi(x)\,. \tag{15}$$

Für den Anteil negativer Parität ergibt sich

$$\psi_-(x) = \frac{1}{2(\pi a^2)^{1/4}} \left( \exp\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x - x_0}{a} \right)^2 \right] - \exp\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x + x_0}{a} \right)^2 \right] \right)\,. \tag{16}$$

Wir berechnen den Erwartungswert der Projektion auf negative Parität

$$\langle \widehat{\Pi}_- \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \widehat{\Pi}_- \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \psi_-(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x |\psi_-(x)|^2\,, \tag{17}$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass $\psi_+^*(x)\psi_-(x)$ eine ungerade Funktion ist.

Einsetzen der Wellenfunktion aus Gl. (16) liefert

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{\Pi}_- \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{4(\pi a^2)^{1/2}} \left( \exp\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x - x_0}{a} \right)^2 \right] - \exp\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x + x_0}{a} \right)^2 \right] \right)^2 \\
&= \frac{1}{4(\pi a^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left( \exp\left[ -\left( \frac{x - x_0}{a} \right)^2 \right] - 2\exp\left[ -\left( \frac{x^2 + x_0^2}{a^2} \right) \right] + \exp\left[ -\left( \frac{x + x_0}{a} \right)^2 \right] \right) \\
&= \frac{1}{4(\pi a^2)^{1/2}} \left( \sqrt{\pi a^2} - 2\sqrt{\pi a^2} \exp\left( -\frac{x_0^2}{a^2} \right) + \sqrt{\pi a^2} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left( 1 - \exp\left( -\frac{x_0^2}{a^2} \right) \right)\,.
\end{aligned} \tag{18}$$

## Aufgabe H5: Superposition stationärer Zustände (5 Punkte) (∗)

Betrachten Sie ein System, das sich in einer Überlagerung stationärer Zustände befindet, d.h. betrachten Sie

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i a_i \psi_i(\boldsymbol{r}) \exp\left( -\mathrm{i} \frac{E_i t}{\hbar} \right)\,, \tag{19}$$

wobei die Zustände orthonormiert seien. Es gelte also

$$\int \mathrm{d}^3 r\, \psi_i^*(\boldsymbol{r}) \psi_j(\boldsymbol{r}) = \delta_{ij}\,. \tag{20}$$

Für die Besetzungszahlen $a_i \in \mathbb{R}$ gilt $\sum_i a_i^2 = 1$.

Anmerkung: Zur Bearbeitung dieser Aufgabe muss die zeitunabhängige Schrödingergleichung verwendet werden. Diese wird voraussichtlich am Donnerstag, den 28.10., in der Vorlesung behandelt.

1. Der Erwartungswert des Hamiltonoperators berechnet sich nach

$$E = \langle \widehat{H} \rangle = \int \mathrm{d}^3r \, \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \widehat{H} \psi(\boldsymbol{r}, t) \,. \tag{21}$$

Zeigen Sie, dass

$$\langle \widehat{H} \rangle = \sum_i a_i^2 E_i \tag{22}$$

gilt.

---

LÖSUNG: Einsetzen gibt

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \mathrm{d}^3r \left( \sum_i a_i \psi_i^*(\boldsymbol{r}) \exp\left( \mathrm{i} \frac{E_i t}{\hbar} \right) \right) \widehat{H} \left( \sum_j a_j \psi_j(\boldsymbol{r}) \exp\left( -\mathrm{i} \frac{E_j t}{\hbar} \right) \right) \tag{23}$$

$$= \sum_{i,j} a_i a_j \exp\left( \mathrm{i} \frac{E_i - E_j}{\hbar} t \right) \int \mathrm{d}^3r \, \psi_i^*(\boldsymbol{r}) E_j \psi_j(\boldsymbol{r}) \tag{24}$$

$$= \sum_{i,j} a_i a_j \exp\left( \mathrm{i} \frac{E_i - E_j}{\hbar} t \right) E_j \delta_{ij} = \sum_i a_i^2 E_i. \tag{25}$$

---

2. Berechnen Sie die Varianz der Energie $(\Delta E)^2 = \langle \widehat{H}^2 \rangle - E^2$. Zeigen Sie dann für den Fall gleichbesetzter Zustände verschiedener Energien,

$$a_i = \begin{cases} a & 1 \leqslant i \leqslant N \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} , \tag{26}$$

dass $\Delta E$ von Null verschieden ist.

---

LÖSUNG: Analog zu oben ist

$$\langle \widehat{H}^2 \rangle = \sum_{i,j} a_i a_j \exp\left( \mathrm{i} \frac{E_i - E_j}{\hbar} t \right) \int \mathrm{d}^3r \, \psi_i^*(\boldsymbol{r}) E_j^2 \psi_j(\boldsymbol{r}) = \sum_i a_i^2 E_i^2. \tag{27}$$

Damit ist

$$(\Delta E)^2 = \sum_i a_i^2 E_i^2 - \left( \sum_i a_i^2 E_i \right)^2 . \tag{28}$$

Im Fall gleichbesetzter Zustände ist

$$1 = \sum_i a_i^2 = \sum_{i=1}^N a^2 \;\Leftrightarrow\; a^2 = \frac{1}{N}. \tag{29}$$

Aus Gleichung (28) folgt für diesen Fall

$$(\Delta E)^2 = a^2 \sum_{i=1}^{N} E_i^2 - a^4 \left( \sum_{i=1}^{N} E_i \right)^2 \tag{30}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E_i^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} E_i E_j \tag{31}$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} E_i^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} E_i E_j \tag{32}$$

$$= \frac{1}{2N^2} \sum_{i,j=1}^{N} \left( E_i^2 + E_j^2 - 2E_i E_j \right) \tag{33}$$

$$= \frac{1}{2N^2} \sum_{i,j=1}^{N} (E_i - E_j)^2 \,. \tag{34}$$

Für verschiedene Energien gilt daher $\Delta E > 0$.

**Aufgabe H6: Weshalb die Wellenfunktion stetig sein muss**
Betrachten Sie die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \begin{cases} N & -\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{35}$$

in einer Dimension. Zunächst sieht diese physikalisch aus: Sie ist normierbar, die Ortsunsicherheit $\Delta x$ ist endlich, die Fourier-Transformierte existiert. Andererseits zeigt sie Unstetigkeiten bei $x = \pm a/2$, wodurch die Anwendung des Impulsoperators im Ortsraum $\widehat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ zu Divergenzen führt.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante $N$ sowie die Ortsunsicherheit $\Delta x$.

LÖSUNG: Zunächst bestimmen wir $N$,

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, |\psi(x)|^2 = N^2 \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x = N^2 a \;\Rightarrow\; N = \frac{1}{\sqrt{a}} \,. \tag{36}$$

Damit können wir $\langle x \rangle$ und $\langle x^2 \rangle$ bestimmen,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \psi^*(x) x \psi(x) = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x \, x = 0 \,, \tag{37}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \psi^*(x) x^2 \psi(x) = \frac{a^2}{12} \,. \tag{38}$$

Damit erhalten wir für die Unsicherheit

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2\sqrt{3}} \,. \tag{39}$$

2. Bestimmen Sie $\langle \widehat{p} \rangle$ und $\langle \widehat{p}^2 \rangle$ mittels Fourier-Transformation. Ihr Ergebnis für $\langle \widehat{p}^2 \rangle$ wird divergieren! Wie muss sich die Fourier-Transformierte $\tilde{\psi}(k)$ für große $k$ verhalten, damit $\langle \widehat{p}^2 \rangle$ endlich bleibt?

LÖSUNG: Die Fourier-Transformation ergibt,

$$\tilde{\psi}(k) = N \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x \, e^{-ikx} = \frac{2}{\sqrt{a}} \frac{\sin(ka/2)}{k} \,, \tag{40}$$

wobei $N = 1/\sqrt{a}$ verwendet wurde. Aufgrund der Symmetrie folgt sofort, dass $\langle \widehat{p} \rangle = 0$ (analog zu $\langle x \rangle$). Zudem ist

$$\langle \widehat{p}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \tilde{\psi}^*(k) \hbar^2 k^2 \tilde{\psi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{4\hbar^2}{a} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \to \infty \,. \tag{41}$$

Für ein endliches $\langle \widehat{p}^2 \rangle$ muss das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \tilde{\psi}^*(k) \hbar^2 k^2 \tilde{\psi}(k)$ konvergieren. Da der Integrand positiv ist, muss für große $k$ die Bedingung

$$k^2 |\tilde{\psi}(k)|^2 \leqslant \frac{C^2}{k^{1+\epsilon}} \tag{42}$$

mit Konstanten $C \geqslant 0$ und $\epsilon > 0$ erfüllt sein, damit das Integral konvergiert (siehe Analysis). Für die Wellenfunktion muss also für große $k$ gelten,

$$|\tilde{\psi}(k)| \leqslant \frac{C}{k^{\frac{3+\epsilon}{2}}} \,. \tag{43}$$

3. Was ist die physikalische Interpretation dieser Divergenz?

LÖSUNG: Um eine unstetige Funktion als Superposition von harmonischen Schwingungen darzustellen, werden unendlich viele, beliebig große Fourier-Komponenten vergleichbarer Größe benötigt.

Physikalisch gesehen lässt sich jede Welle einem Impuls zuordnen. Daher benötigt eine unstetige Wellenfunktion unendlich viele, beliebig große Impulsmoden.