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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 4

Abgabe der mit ($*$) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 9. November, Anfang der Vorlesung

2. November 2021

Aufgabe P3: Zwei-Minuten-Fragen

1. Wie wird der Erwartungswert eines Operators $\widehat{A}$ im Allgemeinen ausgerechnet? Welchen Erwartungswert hat der Operator $\widehat{A} = \Theta(\widehat{x} - a)\Theta(b - \widehat{x})$ für $a < b$ und welche Observable beschreibt er?

2. Zeigen Sie, dass $\langle(\widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle)(\widehat{B} - \langle\widehat{B}\rangle)\rangle = \langle\widehat{A}\widehat{B}\rangle - \langle\widehat{A}\rangle\langle\widehat{B}\rangle$ gilt.

3. Ist die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung eine Lösung der zeitabhängigen?

4. Für welche Zustände (Wellenfunktionen ψ) gilt $\Delta E = 0$? Kennen Sie Beispiele für Zustände mit $\Delta E \neq 0$?

5. Für ein stetiges Potential muss die Wellenfunktion ψ und ihre Ableitung ψ' stetig sein. Was folgt dann für die zweite Ableitung?

6. Was ändert sich bezüglich der Stetigkeit von ψ und ψ', wenn das Potential eine endliche oder eine unendliche Sprungstelle bei $x = x_0$ hat?

Aufgabe H7: Eindimensionale stationäre Schrödingergleichung (10 Punkte) ($*$)

Ein Teilchen mit Masse m und der Energie E befinde sich in folgendem Potential:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -L_2 \leqslant x \leqslant -L_1\,, & \text{(I)} \\ V_0 & -L_1 < x < L_1\,, & \text{(II)} \\ 0 & L_1 \leqslant x \leqslant L_2\,, & \text{(III)} \\ \infty & \text{sonst}\,. & \text{(IV)} \end{cases} \tag{1}$$

Es seien $0 < E < V_0$ und $L_1 < L_2$.

1. Skizzieren Sie das Potential und geben Sie einen Ansatz der Wellenfunktion für die Lösung der stationären Schrödingergleichung in den Bereichen (I), (II), (III), und (IV) an.

LÖSUNG:

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\,, \tag{2}$$
$$\psi_{II}(x) = Ge^{qx} + Fe^{-qx}\,, \tag{3}$$
$$\psi_{III}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}\,, \tag{4}$$
$$\psi_{IV}(x) = 0\,. \tag{5}$$

Dabei ergibt sich durch Einsetzen in die Schrödingergleichung direkt

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0\,, \tag{6}$$
$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0\,. \tag{7}$$

2. Welche Randbedingungen muss die Lösung bei $x = -L_2$, $x = -L_1$, $x = L_1$ und $x = L_2$ erfüllen? Bestimmen Sie mit Hilfe dieser Anschlussbedingungen in den Bereichen (I)-(IV) die Parameter der Wellenfunktion. Sie müssen die Wellenfunktion nicht normieren, das heißt, Sie können einen Parameter unbestimmt lassen.

   HINWEIS: Es bietet sich an, die Abkürzungen $u = e^{ikL_1}$, $v = e^{ik(2L_2-L_1)}$ und $w = e^{qL_1}$ einzuführen, wobei $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $q = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$.

LÖSUNG: An allen Sprungstellen des Potentials muss die Wellenfunktion stetig sein, d.h.

$$\psi_I(-L_2) = \psi_{IV}(-L_2) = 0\,, \tag{8}$$
$$\psi_I(-L_1) = \psi_{II}(-L_1)\,, \tag{9}$$
$$\psi_{II}(L_1) = \psi_{III}(L_1)\,, \tag{10}$$
$$\psi_{III}(L_2) = \psi_{IV}(L_2) = 0\,. \tag{11}$$

An endlichen Sprungstellen muss auch die erste Ableitung stetig sein, also

$$\psi'_I(-L_1) = \psi'_{II}(-L_1)\,, \tag{12}$$
$$\psi'_{II}(L_1) = \psi'_{III}(L_1)\,. \tag{13}$$

Aus Gleichungen (8, 11) folgt direkt

$$A = -Be^{2ikL_2}\,, \tag{14}$$
$$D = -Ce^{2ikL_2}\,. \tag{15}$$

Die verbliebenen Gleichungen (9, 10, 12, 13) lauten dann unter Verwendung der Abkürzungen $u = e^{ikL_1}$, $v = e^{ik(2L_2-L_1)}$ und $w = e^{qL_1}$:

$$B(u - v) = Gw^{-1} + Fw\,, \tag{16}$$
$$C(u - v) = Gw + Fw^{-1}\,, \tag{17}$$
$$-ikB(u + v) = q(Gw^{-1} - Fw)\,, \tag{18}$$
$$ikC(u + v) = q(Gw - Fw^{-1})\,. \tag{19}$$

Durch Gleichsetzen der Quotienten (16)/(17) und (18)/(19) erhält man

$$\frac{Gw^{-1} + Fw}{Gw + Fw^{-1}} = \frac{B}{C} = -\frac{Gw^{-1} - Fw}{Gw - Fw^{-1}} \,. \tag{20}$$

Multiplizieren der Gleichung mit den beiden Nennern und anschließendes Auflösen ergibt $G^2 = F^2$ beziehungsweise

$$F = \pm G \,. \tag{21}$$

Einsetzen in Gl. (20) gibt dann

$$C = \pm B \,. \tag{22}$$

Mit Gl. (16) erhält man schließlich

$$B = G\frac{w^{-1} \pm w}{u - v} \,, \tag{23}$$

Zusammengefasst sind somit A, B, C, D, F mittels Gln. (14, 15, 21, 22, 23) über G und die Energie bestimmt.

Anmerkung: Anhand von Gleichungen (14, 15, 21, 22) kann man erkennen, dass alle Lösungen gerade (jeweils oberes Vorzeichen) oder ungerade (unteres Vorzeichen) Funktionen sind.

3. Zeigen Sie, dass sich folgende Bestimmungsgleichung für die Energie ergibt:

$$\frac{k}{q} = i\frac{u - v}{u + v}\frac{w^{-1} \mp w}{w^{-1} \pm w} \,. \tag{24}$$

Das obere Vorzeichen gilt dabei jeweils für gerade Wellenfunktionen, das untere für ungerade.

Lösung: Aus dem Quotienten (18)/(16) erhält man durch Einsetzen der in H7.2 gefundenen Parameter-Beziehungen direkt Gl. (24).

4. Was passiert mit den Energien von geraden und ungeraden Zuständen für $V_0 \to \infty$? Argumentieren Sie zudem, was mit den Energien für $L_1 \to 0$ passiert.

Lösung: Im Fall $V_0 \to \infty$ gilt $w = e^{qL_1} \to \infty$ und somit wird aus Gl. (24)

$$\frac{k}{q} \to -i\frac{u - v}{u + v} \tag{25}$$

ohne Fallunterscheidung. Das bedeutet, dass für $V_0 \to \infty$ für jeden geraden Zustand ein ungerader Zustand mit gleicher Energie existiert, während sich die Energien für $V_0 < \infty$ im Allgemeinen unterscheiden.

Im Fall $L_1 \to 0$ verschwindet Bereich (II) und es verbleibt ein unendlicher Potentialtopf. Also nehmen die Energien die aus der Vorlesung bekannten Werte an:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8mL_2^2} \,. \tag{26}$$

Aufgabe H8: Schrödinger-Gleichung im Impulsraum

1. Bestimmen Sie durch Fourier-Transformation die Impulsraumdarstellung der Schrödinger-Gleichung,
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\boldsymbol{x},t)\right)\psi(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{27}$$

LÖSUNG: Wir setzen die Fourier-Transformierten der Wellenfunktion und des Potentials, also

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \tag{28}$$
$$V(\boldsymbol{x}) = \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,\widetilde{V}(\boldsymbol{k})\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \tag{29}$$

in die Schrödinger-Gleichung ein. Durch Vertauschen von Ableitung und Integration erhalten wir schließlich

$$\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{\hbar k^2}{2m}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(\boldsymbol{k})\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}',t)\,e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\,. \tag{30}$$

Durch die Substitution $\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k'}$ kann das Doppelintegral nach

$$\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(\boldsymbol{k})\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}',t)\,e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}} = \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}',t)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{31}$$

umgeschrieben werden. Nun projizieren wir auf die einzelnen Fourierkoeffizienten indem wir alle Terme mit $e^{-i\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{x}}$ multiplizieren und über $\boldsymbol{x}$ integrieren, also z.B.:

$$\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t)\,e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'')\cdot\boldsymbol{x}} = \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t)\,(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'') = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}'',t) \tag{32}$$

und analog für die anderen Terme. Somit erhalten wir

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t) = \frac{\hbar k^2}{2m}\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k},t) + \int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}',t)\,, \tag{33}$$

wobei wir $\boldsymbol{k}''\to\boldsymbol{k}$ ersetzt haben.

2. Zeigen Sie, dass die Schrödinger-Gleichung im Impulsraum für reelle, zeitunabhängige Potentiale V invariant unter Zeitumkehr $t\to -t$ ist und dass $\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{p},-t)$ die zeitumgekehrte Lösung bezüglich $\widetilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$ ist.

LÖSUNG: Wir zeigen dass $\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k},-t)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Impulsraum ist:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k},-t) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}(-\boldsymbol{k},-t)\right)^* = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\widetilde{\psi}(-\boldsymbol{k},t')|_{t'=-t}\frac{\partial(-t)}{\partial t}\right)^*\,. \tag{34}$$

Aus der Schrödinger-Gleichung für $\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}, t)$ folgt nun

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k}, -t) = \left(\frac{\hbar k^2}{2m}\widetilde{\psi}(-\boldsymbol{k}, -t) + \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(-\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')\widetilde{\psi}(\boldsymbol{k}', -t)\right)^* \tag{35}$$

$$= \frac{\hbar k^2}{2m}\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k}, -t) + \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k''}}{(2\pi)^3}\widetilde{V}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'')\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k}'', -t)\,. \tag{36}$$

Im letzten Schritt wurde im Integral $\boldsymbol{k''} = -\boldsymbol{k'}$ substituiert und verwendet, dass $\widetilde{V}^*(-\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k''}) = \widetilde{V}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k''})$, da das Potential als reell und invariant unter Zeitumkehr angenommen wurde. Damit folgt, dass die Schrödinger-Gleichung im Impulsraum invariant unter Zeitumkehr ist und dass $\widetilde{\psi}^*(-\boldsymbol{k}, -t)$ die dazugehörige Lösung ist.

Aufgabe H9: Quantisierung der Energie

In dieser Aufgabe wollen wir eine intuitive Argumentation für die Quantisierung der Energie in der Quantenmechanik geben. Wir betrachten dafür exemplarisch Zustände im eindimensionalen harmonischen Oszillator

$$V(x) = \alpha\, x^2 \quad \text{mit} \quad \alpha > 0\,. \tag{37}$$

Dabei wollen wir nur die symmetrische Lösung betrachten und schränken uns deshalb auf $x > 0$ ein.

1. Betrachten Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für Zustände der Energie E und zeigen Sie, dass die Wellenfunktion $\psi(x)$ einen Wendepunkt bei $x_0 = \sqrt{\frac{E}{\alpha}}$ aufweist.

Lösung: Mit der zeitunabhängigen Schrödingergleichung folgt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \alpha x^2\psi = E\psi \tag{38}$$

und somit

$$-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \epsilon\psi \quad \text{mit} \quad \epsilon = \frac{E - \alpha x^2}{\hbar^2}2m\,. \tag{39}$$

Da ϵ sein Vorzeichen bei $x_0 = \sqrt{\frac{E}{\alpha}}$ wechselt, hat ψ dort einen Wendepunkt.

2. Zeigen Sie, dass das Vorzeichen der Wellenfunktion

$$\operatorname{sign}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) = -\operatorname{sign}(\psi) \quad \text{für} \quad 0 < x < x_0\,, \tag{40}$$

$$\operatorname{sign}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) = \operatorname{sign}(\psi) \quad \text{für} \quad x_0 < x \tag{41}$$

erfüllt. Was bedeutet das qualitativ für das Verhalten der Wellenfunktion in den beiden Bereichen und für $x \to \infty$?

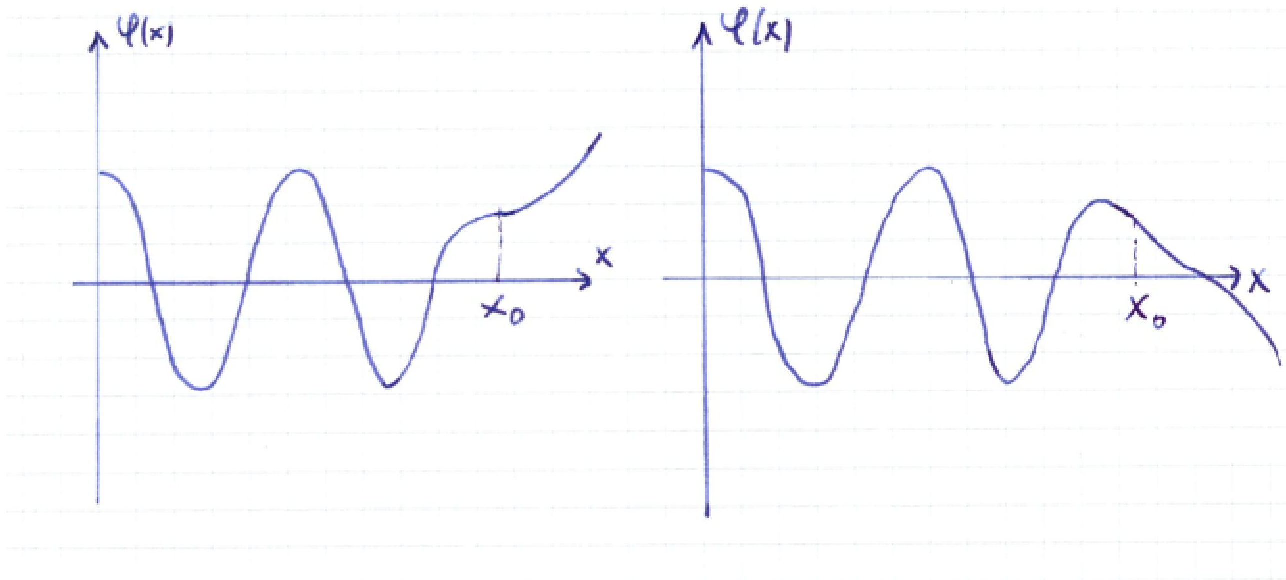

Abbildung 1: Krümmung der Wellenfunktion.

Lösung: Die beiden Eigenschaften folgen unmittelbar aus Gl. (39). Die Wellenfunktion ist somit für $x < x_0$ zur x-Achse hin gekrümmt und für $x > x_0$ von der x-Achse weg gekrümmt. Das qualitative Verhalten der Wellenfunktion ist in Abb. 1 dargestellt.

3. Physikalische Wellenfunktionen müssen normierbar sein, insbesondere muss $\psi(x) \xrightarrow{x\to\infty} 0$ gelten. Warum folgt daraus, dass nur bestimmte diskrete Energien E auftreten können?

Lösung: Wie in Abb. 1 angedeutet, ist die Wellenfunktion im Allgemeinen für große x von der Achse weg gekrümmt. Um normierbar zu sein, muss sie allerdings im Unendlichen verschwinden. Das ist nur möglich, wenn die Energie E (und somit die Position des Wendepunkts) genau so gewählt ist, wie in Abb. 2 dargestellt ist.

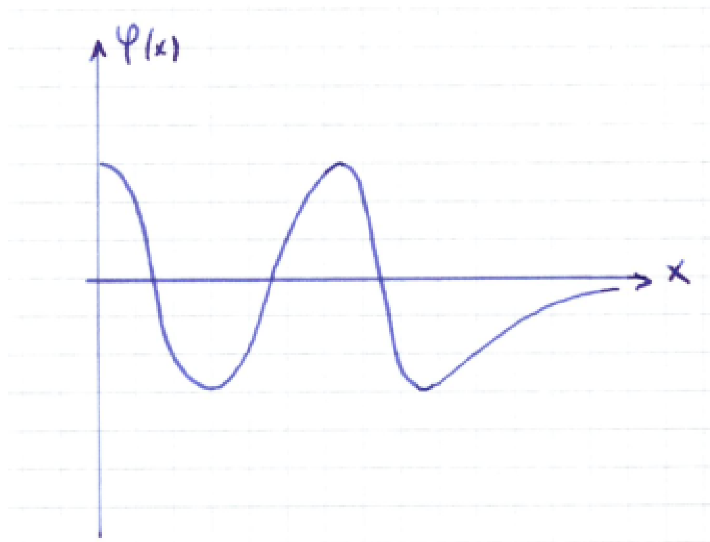

Abbildung 2: Die Energie E (oder x_0) ist so angepasst, dass die Wellenfunktion im Unendlichen verschwindet.