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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 6

Abgabe der mit (∗) markierten Aufgaben: Dienstag, 23. November, Anfang der Vorlesung

16. November 2021

Aufgabe P5: Zwei-Minuten-Fragen

1. Skizzieren Sie den Transmissionskoeffizienten T als Funktion der Energie einer einlaufenden ebenen Welle, die an einer Potentialstufe streut. Diskutieren Sie qualitativ, wie sich T ändert, wenn die Potentialstufe eine endliche Potentialbarriere ist.

2. Wie sähen die Transmissionskoeffizienten aus 1. für klassische Teilchen aus?

3. Bei der Betrachtung verschiedener quantenmechanischer Probleme sind Ihnen ebene Wellen als Lösungen der Schrödingergleichung begegnet. Kommentieren Sie dies unter Berücksichtigung der Definition des Hilbertraums.

4. Berechnen Sie $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger$.

5. Zeigen Sie, dass $\langle \widehat{A}^\dagger \rangle = \langle \widehat{A} \rangle^*$. Erwartungswerte sind gegeben durch $\langle \widehat{A} \rangle = (\psi, \widehat{A}\psi)$.

6. Betrachten Sie $\widehat{A} = \exp\left(ic\frac{\partial}{\partial x}\right)$, wobei c eine Konstante ist. Berechnen Sie den adjungierten Operator $\widehat{A}^\dagger$. Benutzen Sie hierfür die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion.

Aufgabe H13: Potenzreihenansatz (7 Punkte) (∗)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in dem Potential ($\kappa > \lambda > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0\,, \\ -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}e^{-\kappa x} & x \geqslant 0\,. \end{cases} \tag{1}$$

1. Betrachten Sie die Schrödinger-Gleichung für einen gebundenen Zustand mit Energie $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Zeigen Sie, dass sich die Schrödinger-Gleichung mit der Substitution $z = (\lambda/\kappa)^2 e^{-\kappa x}$ schreiben lässt für $x \geqslant 0$ als

$$\left(z\partial_z + z^2\partial_z^2 + z - \frac{k^2}{\kappa^2}\right)\phi(z) = 0\,. \tag{2}$$

LÖSUNG: Für die Transformation berechnen wir

$$
\begin{aligned}
&\frac{dz}{dx} = -\kappa z \\
\Rightarrow\ &\partial_x = \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z} = -\kappa z \partial_z \\
\Rightarrow\ &\partial_x^2 = \partial_x(-\kappa z \partial_z) = (-\kappa z \partial_z)(-\kappa z \partial_z) = \kappa^2 z \partial_z + (\kappa z)^2 \partial_z^2\,,
\end{aligned}
\tag{3}
$$

wobei partielle und totale Ableitung identisch sind. Zudem ist für $x \geqslant 0$

$$
V(x) = -z(x)\kappa^2 \frac{\hbar^2}{2m}\,. \tag{4}
$$

Damit folgt aus der Schroedingergleichung für positive x (die Wellenfunktion verschwindet sonst):

$$
\begin{aligned}
(\widehat{H} - E)\Psi(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x) - E\right)\Psi(x) = 0 \\
\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\kappa^2 z \partial_z + (\kappa z)^2 \partial_z^2 + z\kappa^2 - k^2\right)\Psi(z) &= 0 \\
\Rightarrow \left(z\partial_z + z^2\partial_z^2 + z - \left(\frac{k}{\kappa}\right)^2\right)\Psi(z) &= 0\,.
\end{aligned}
\tag{5}
$$

2. Nehmen Sie als Ansatz eine Potenzreihe $\phi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{n+\rho}$ und zeigen Sie, dass die folgenden Beziehungen gelten:

$$
(\rho\kappa)^2 = k^2\,, \quad c_n = -\frac{c_{n-1}}{n^2 + 2n\rho} \quad \text{für} \quad n > 0\,. \tag{6}
$$

LÖSUNG: Wir berechnen

$$
\partial_z \phi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+\rho) c_n z^{n+\rho-1}\,, \tag{7}
$$

$$
\partial_z^2 \phi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+\rho)(n+\rho-1) c_n z^{n+\rho-2}\,, \tag{8}
$$

und setzen in die transformierte Schrödingergleichung ein, wobei wir die Summe zur Übersicht heraus gezogen haben:

$$
\begin{aligned}
0 &= \sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+\rho)c_n z^{n+\rho} + (n+\rho)(n+\rho-1)c_n z^{n+\rho} + c_n z^{n+\rho+1} - \frac{k^2}{\kappa^2}c_n z^{n+\rho}\right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} A_n z^{\rho+n} + c_n z^{\rho+n+1} \text{ mit } A_n = c_n\left[(n+\rho)^2 - k^2/\kappa^2\right].
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Für $z < 1$ handelt es sich um zwei absolut konvergente Reihen, wir dürfen also auch mit Hilfe der Definition $c_{-1} := 0$ schreiben:

$$
0 = \sum_{n=0}^{\infty} (A_n + c_{n-1}) z^{\rho+n}\,. \tag{10}
$$

Da die Summe für alle z (mit $0 < z < 1$) verschwindet, folgern wir, dass jeder einzelne Summand verschwindet. Wir erhalten also insbesondere

$$0 = A_0 + c_{-1} = A_0 \,. \tag{11}$$

Somit folgt für $c_0 \neq 0$

$$0 = \rho^2 - k^2/\kappa^2 \,, \tag{12}$$

was die erste geforderte Beziehung liefert. Die Iterationsvorschrift folgt dann für $n > 0$ aus

$$c_n(n^2 + 2n\rho) = A_n = -c_{n-1} \Rightarrow c_n = -\frac{c_{n-1}}{n^2 + 2n\rho} \,, \tag{13}$$

was zu zeigen war.

3. Wie lautet die Quantisierungsbedingung für k (bzw. ρ)?

Lösung: Die Wellenfunktion muss auf Grund der Form des Potentials an der Stelle $x = 0$ [und damit bei $z = (\lambda/\kappa)^2$] verschwinden:

$$\Psi(x = 0) \stackrel{!}{=} 0 \,. \tag{14}$$

Aus dieser Forderung erhält man dann (numerisch) die Quantisierungsbedingung von ρ. Aus der Quantisierungsbedingung von ρ folgen damit die Energieeigenwerte $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2\rho^2}{2m}$.

Aufgabe H14: Ehrenfestsches Theorem (3 Punkte) $(*)$

Der Erwartungswert einer zeitunabhängigen Observablen $\widehat{A}$ in einem stationären Zustand mit $\psi_n(\boldsymbol{r}, t) = e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(\boldsymbol{r})$ ist auch zeitunabhängig. Das liegt daran, dass die Zeitabhängigkeit von stationären Zuständen eine reine Phase ist, die in dem Erwartungswert $\langle\widehat{A}\rangle$ herausfällt.

1. Zeigen Sie, dass im allgemeinen Fall, falls kein stationärer Zustand vorliegt und falls der Operator $\widehat{A}(t)$ explizit zeitabhängig ist, das Ehrenfestsche Theorem gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\widehat{A}(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\widehat{H}, \widehat{A}(t)]\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial t}\widehat{A}(t)\rangle \,, \tag{15}$$

wobei $[\widehat{A}, \widehat{B}] \equiv \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$ der Kommutator ist.

Lösung: Ausgehend von

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\widehat{A}(t)|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\right)\widehat{A}(t)\,|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle + \tag{16}$$

$$+ \langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\,\widehat{A}(t)\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle + \langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\left(\frac{\partial}{\partial t}\widehat{A}(t)\right)|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle \tag{17}$$

setzen wir die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ψ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle = \widehat{H}\,|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle \tag{18}$$

bzw.

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle\psi(\boldsymbol{r},t)\right| = (\left\langle\psi(\boldsymbol{r},t)\right|\widehat{H}^\dagger) \tag{19}$$

in obiges Differential ein und erhalten

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\widehat{A}(t)|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\widehat{H}^\dagger\widehat{A}(t)|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\widehat{A}(t)\widehat{H}|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial t}\widehat{A}(t)\rangle\,. \tag{20}$$

Da $\widehat{H}^\dagger \equiv \widehat{H}$ lässt sich dies auch zu

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|\widehat{A}(t)|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle(\widehat{H}\widehat{A}(t) - \widehat{A}(t)\widehat{H})\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial t}\widehat{A}(t)\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle[\widehat{H},\widehat{A}(t)]\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial t}\widehat{A}(t)\rangle\,.\end{aligned} \tag{21}$$

umschreiben, was zu zeigen war. Analog zu diesem Resultat wurde dies bereits in der Mechanik für die Poisson-Klammer (hier nun mit Vorfaktor $i/\hbar$) behandelt.

2. Was bedeutet das für den Spezialfall zeitunabhängiger Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator $\widehat{H}$ vertauschen?

LÖSUNG: Die Erwartungswerte sind zeitlich konstant.

Aufgabe H15: Anwendung des Ehrenfestschen Theorems

Wenden Sie das Ehrenfestsche Theorem aus H14 unter Verwendung von

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \widehat{V}(\widehat{\boldsymbol{r}}) \tag{22}$$

auf die Operatoren $\widehat{\boldsymbol{r}}$ und $\widehat{\boldsymbol{p}}$ an und zeigen Sie, dass folgende Relation gilt:

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\widehat{\boldsymbol{r}}\rangle = -\langle\boldsymbol{\nabla}\widehat{V}(\widehat{\boldsymbol{r}})\rangle\,. \tag{23}$$

Inwiefern unterscheidet sich diese Gleichung von der analogen klassischen Gleichung?

HINWEIS: Verwenden Sie für die Berechnung der auftretenden Kommutatoren die aus der Vorlesung bekannte Impulsoperator-Darstellung $\widehat{p}_i = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r_i}$ und wenden Sie den Kommutator auf eine Testfunktion $f(\boldsymbol{r})$ an.

LÖSUNG: Zur Berechnung des auftretenden Kommutators $[p_i^2, r_j]$ wenden wir diesen auf eine Testfunktion $f(\boldsymbol{r})$ an:

$$[\widehat{p}_i^2,\widehat{r}_j]f(\boldsymbol{r}) = \left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r_i}\right)^2, r_j\right]f(\boldsymbol{r}) \tag{24}$$

$$= -2\hbar^2\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial r_i}f(\boldsymbol{r}) \tag{25}$$

$$= \frac{2\hbar}{i}\delta_{ij}\widehat{p}_j f(\boldsymbol{r})\,. \tag{26}$$

Damit ist

$$[\widehat{H}, \widehat{r}_j] = \left[\sum_i \frac{\widehat{p}_i^2}{2m}, \widehat{r}_j\right] = \frac{\hbar \widehat{p}_j}{im} \,. \tag{27}$$

Außerdem ist

$$[\widehat{H}, \widehat{p}_j] = \left[V(\boldsymbol{r}), \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r_j}\right] = i\hbar \frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial r_j} \,. \tag{28}$$

Unter Berücksichtigung, dass sowohl $\widehat{\boldsymbol{r}}$ als auch $\widehat{\boldsymbol{p}}$ nicht explizit zeitabhängig sind, ergeben sich dann durch Anwendung des Ehrenfestschen Theorems

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \widehat{\boldsymbol{r}} \rangle = \frac{1}{m}\langle \widehat{\boldsymbol{p}} \rangle \tag{29}$$

und

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \widehat{\boldsymbol{p}} \rangle = -\langle \boldsymbol{\nabla} \widehat{V}(\widehat{\boldsymbol{r}}) \rangle \,. \tag{30}$$

Ineinander Einsetzen liefert

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \widehat{\boldsymbol{r}} \rangle = -\langle \boldsymbol{\nabla} \widehat{V}(\widehat{\boldsymbol{r}}) \rangle \,. \tag{31}$$

Diese Gleichung ähnelt der Grundgleichung der Mechanik,

$$\boldsymbol{F} = m\frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} \,, \tag{32}$$

wenn man die Ersetzung $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla} V(\boldsymbol{r})$ vornimmt. Sie unterscheidet sich jedoch in zweierlei Hinsicht von dieser: Zum einen ist Gl. (31) eine Gleichung für Erwartungswerte (eines quantenmechanischen Systems), während die klassische Gleichung an jedem Ort gilt. Zum anderen enthält die quantenmechanische Version den Erwartungswert der Kraft und nicht etwa die Kraft am Erwartungswert des Ortes, was dem klassischen Fall entsprechen würde.