Repetitorium Theoretische Quantenmechanik, WS 08/09

1. (Freie und gebundene Zustände des δ-Potentials)

   Gegeben sei das Potential

   $$V(x) = -F\delta(x) \qquad F > 0,\ x \in \mathbb{R}$$

   (a) Suchen Sie die gebundenen Lösungen ($E < 0$), die an dem δ-förmigen Potential lokalisiert sind.

   (b) Betrachten Sie nun ungebundene Zustände ($E > 0$). Untersuchen Sie die Streuung einer von $-\infty$ in Richtung $+\infty$ laufenden ebenen Welle an diesem Potential indem Sie den Reflexion- und Transmissionskoeffizienten bestimmen.

   Lösung:

   (a) Sei

   $$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

   die Fouriertransformierte von $\psi(x)$.
   Dann gilt nach Fouriertransformation der Schrödingergleichung:

   $$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 \phi(k) - \frac{F}{\sqrt{2\pi}} \psi(0) = E\phi(k)$$
   $$\phi(k) = \frac{2mF\psi(0)}{\hbar^2 \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{k^2 + \left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)}$$

   Für gebundene Zustände gilt: $E < 0$ und wir können somit folgendermaßen abkürzen:

   $$\alpha^2 := -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \qquad \text{mit} \quad \alpha > 0$$

   $$\psi(x) = \frac{mF\psi(0)}{\hbar^2 \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2 + \alpha^2} dk$$

   Wir berechen

   $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2 + \alpha^2} dk$$

   in dem wir in die komplexe k-Ebene übergehen. Für $x > 0$ führen wir das Integral über die positive Halbebene mit $\mathrm{Im}(k) > 0$ aus:

   $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2 + \alpha^2} dk = 2\pi i \mathrm{Res}_{i\alpha} \left(\frac{e^{ikx}}{k^2 + \alpha^2} \right) = 2\pi i \frac{e^{-\alpha x}}{2i\alpha} = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\alpha x}$$

Analog erhält man für $x < 0$ nach einer Integration über die negative Halbebene

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2+\alpha^2} dk = -2\pi i \mathrm{Res}_{-i\alpha}\left(\frac{e^{ikx}}{k^2+\alpha^2}\right) = -2\pi i \frac{e^{\alpha x}}{-2i\alpha} = \frac{\pi}{\alpha} e^{+\alpha x}$$

Also erhalten wir insgesamt

$$\psi(x) = \frac{mF\psi(0)}{\hbar^2 \alpha} e^{-\alpha|x|}$$

Setzt man $x = 0$ ein, so erhält man

$$1 = \frac{mF}{\hbar^2\alpha} = \frac{mF}{\hbar^2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}} \qquad \Rightarrow \alpha = \frac{mF}{\hbar^2} \quad \Rightarrow E = -\frac{mF^2}{2\hbar^2}$$

Also hat die Wellenfunktion folgende Form:

$$\psi(x) = \psi(0)e^{-\alpha|x|}$$

Wir berechnen $\psi(0)$ aus der Normierungsbedingung:

$$1 = \psi(0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} dx = 2\psi(0)^2 \frac{1}{2\alpha} \qquad \Rightarrow |\psi(0)| = \sqrt{\alpha} = \frac{\sqrt{mF}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{mF}}{\hbar} e^{-\frac{mF}{\hbar^2}|x|}$$

Alternativ: Wir integrierern die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - F\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

über das Intervall $(-\varepsilon, \varepsilon)$ und bilden dann $\lim_{\varepsilon\to 0}$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi''(x) - F\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x) &= E\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0}(\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)) - F\psi(0) &= 0 \end{aligned}$$

Wir erhalten für die Sprunghöhe der Ableitung der Wellenfunktion.

$$\lim_{\varepsilon\to 0}(\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)) = -\frac{2mF}{\hbar^2}\psi(0) \tag{1}$$

Für $x \neq 0$ erhalten wir für einen gebundenen Zustand:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \qquad E < 0$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \qquad \text{mit} \qquad \alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}$$

Wir teilen nun $\mathbb{R}$ in Bereiche I (mit $x < 0$) und II (mit $x > 0$) auf und bestimmen für jeden Bereich separat die Lösung. Aufgrund der Normierbarkeit muss gelten:

$$\psi_I(x) = Ae^{\alpha x} \qquad \psi_{II}(x) = Be^{-\alpha x}$$

Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad \Rightarrow A = B$$

Aus der Sprunghöhe der Ableitung

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -\alpha A - \alpha A$$

Mit Gleichung (1) erhalten wir

$$-2\alpha A = -\frac{2mF}{\hbar^2}A \qquad \Rightarrow \alpha = \frac{2mF}{\hbar^2} \qquad \Rightarrow E = -\frac{mF^2}{2\hbar^2}$$

Aus der Normierungsbedingung

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|}dx = 2|A|^2\frac{1}{2\alpha} \qquad \Rightarrow |A| = \sqrt{\alpha} = \frac{\sqrt{mF}}{\hbar}$$

Die endgültige Lösung lautet somit

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{mF}}{\hbar}e^{-\frac{mF}{\hbar^2}|x|}$$

(b) Wir betrachten nun den Fall $E > 0$. In diesem Fall sind Lösungen der Schrödingergleichung mit $x \neq 0$:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{mit} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}$$

Wir teilen nun $\mathbb{R}$ wieder in Bereiche I (mit $x < 0$) und II (mit $x > 0$) auf und betrachten jeden Bereich separat. Unter der Voraussetzung, dass wir eine von links einlaufenden Welle haben, folgt analog zur Aufgabe 1.2:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\\ \psi_{II}(x) &= Ce^{ikx}\end{aligned}$$

Da die Wellenfunktion nicht nach unserer Standartkonvention für lokalisierte Teilchen normierbar sind, betrachten wir nur Verhältnisse von Reflexion und Transmission relativ zum einfallenden Strahl. Wir können somit ansetzen:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= e^{ikx} + Re^{-ikx}\\ \psi_{II}(x) &= Te^{ikx}\end{aligned}$$

Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad \Rightarrow 1 + R = T$$

Aus der Sprunghöhe der Ableitung

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -\frac{2mF}{\hbar^2}T \qquad \Rightarrow ik(T - 1 + B) = -\frac{2mF}{\hbar^2}T$$

Die Lösung des Gleichungssystems in R und T ist gegeben durch:

$$R = \frac{-\frac{2mF}{\hbar^2}}{\frac{2mF}{\hbar^2} + 2ik} \qquad T = \frac{2ik}{\frac{2mF}{\hbar^2} + 2ik}$$

Nach Aufgabe 1.1 ist für ein Teilchen mit Wellenfunktion

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx}$$

die Stromdichte gegeben durch

$$j(x) = \pm|A|^2\frac{\hbar k}{m}$$

So erhalten wir

$$\frac{j_{ref}}{j_{inc}} = |R|^2 = \frac{m^2F^2}{m^2F^2 + \hbar^4k^2} \qquad \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = |T|^2 = \frac{\hbar^4k^2}{m^2F^2 + \hbar^4k^2}$$

2. (Gestörter Potentialtopf)

Gegeben sei ein unendlich hoher, eindimensionaler Potentialtopf mit

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in [0, a] \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

(a) Berechnen Sie die Energieeigenwerte und die Wellenfunktionen der Eigenzustände von $\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m}p^2 + V(x)$

(b) Nun wird $\mathcal{H}_0$ durch eine δ-förmiges Störung der Form

$$\mathcal{H}' = b\delta(x - a/2)$$

gestört. Berechnen Sie die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie und begründen Sie, warum die Energieeigenwerte mit geradem n nicht durch die Störung beeinflusst werden.

Lösung:

(a) Für $x < 0$ und $x > a$ erhalten wir $\psi = 0$. Wir betrachten den Bereich $x \in [0, a]$: es gilt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \qquad E > 0$$

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \in \mathbb{R}$$

Stetigkeitsbedingung bei $x = 0$:

$$0 = \psi(0) = A\cos(0) + B\sin(0) \qquad \Rightarrow A = 0$$

Stetigkeitsbedingung bei $x = a$:

$$0 = \psi(a) = B\sin(ka)$$

Da B nicht verschwinden darf, muss $B\sin(ka) = 0$ gelten. Somit erhalten wir nur für die Wellenzahl nur diskrete Werte k_n mit

$$k_na = n\pi \qquad E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Nach der Normierung

$$1 = B\sin(ka)|B|^2\sin^2(k_nx)dx = |B|^2\int_0^a \frac{1}{2}\left[1 - \cos(\frac{2n\pi}{a}x)\right]dx = |B|^2\frac{a}{2}$$

erhalten wir die endgültige Wellenfunktion:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

(b) Wir verwenden die Abkürzung $|n_0\rangle := |\psi_n\rangle$ wobei $|\psi_n\rangle$ die Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators $\mathcal{H}_0$ sind. Die Energiekorrekturen 1. Ordnung sind gegeben durch:

$$E_n^{(1)} = \langle n_0|H_1|n_0\rangle = \frac{2}{a}b\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)dx = \frac{2b}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

Es gilt

$$E_n^{(1)} = \frac{2b}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} 0 & \text{falls } n \text{ gerade} \\ \frac{2b}{a} & \text{falls } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

Für gerade n sind also in erster Ordnung Störungstheorie die Energieeigenwerte unbeeinflusst. Dies lässt sich dadurch erklären, dass für gerade n die Wellenfunktion an der Stelle $x = a/2$ den Wert 0 annimmt. Das heißt, dass das Teilchen dort die Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0 hat und somit vom Störoperator nichts „spürt“.

3. Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{n} p_i^2 + V(x_1, ..., x_n)$$

4. (Kommutatoren)

Gegeben sei der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{n} p_i^2 + V(x_1, ..., x_n)$$

(a) Berechnen Sie den Kommutator $[\mathcal{H}, x_k]$ mit $k \in \{1, ..., n\}$.

(b) Berechnen Sie den Kommutator $[\mathcal{H}, p_k]$ mit $k \in \{1, ..., n\}$.

Lösung:

(a) Wir verwenden die Kommutatorbeziehungen: $[x_k, x_j] = 0$, $[p_k, p_j] = 0$ und $[x_k, p_j] = i\hbar\delta_{kj}$ sowie die Rechenregel

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

Es gilt

$$[\mathcal{H}, x_k] = \left[\sum_{j=0}^{n}\frac{1}{2m}p_j^2, x_k\right] = \sum_{j=0}^{n}\frac{1}{2m}\left(p_j\underbrace{[p_j, x_k]}_{-i\hbar\delta_{jk}} + [p_j, x_k]\,p_j\right) = -\frac{i\hbar}{m}p_k$$

(b) Sei f eine differenzierbare Funktion, ψ eine beliebige Versuchswellenfunktion. Dann gilt

$$\begin{aligned}
[f(x), p]\psi &= f(x)(-i\hbar\partial_x)\psi - (-i\hbar\partial_x)\left(f(x)\psi\right) \\
&= f(x)(-i\hbar\partial_x)\psi - f(x)(-i\hbar\partial_x)\psi + i\hbar(\partial_x f(x))\psi \\
&= i\hbar(\partial_x f(x))\psi
\end{aligned}$$

Also $[f(x), p_x] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$

Daraus folgt:

$$[\mathcal{H}, p_k] = [V(x_{1,}..., x_n), p_k] = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x_k}$$