Michael Schrapp

Ferienkurs *Theoretische Quantenmechanik 2010*

Eindimensionale Probleme

1 1-dimensionales δ-Potential

Gegeben sei das eindimensionale δ-förmige Potential:

$$V(x) = -\lambda\delta(x) \quad (\lambda > 0). \tag{1}$$

1. Welchen Anschlussbedingungen muss die Wellenfunktion $\psi(x)$ und deren Ableitung bei $x = 0$ genügen?

   (Hinweis: Zeige, dass $\frac{d\psi}{dx}$ bei $x = 0$ unstetig ist, durch Integration der Schrödingergleichung über das infinitesimale Intervall $[-\varepsilon, \varepsilon]$.)

   ### Lösung

   Die stationäre Schrödingergleichung lautet:

   $$\hat{\mathcal{H}}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \lambda\delta(x)\right)\Psi(x,t) = E\psi(x)$$

   Notwendigerweise ist die Wellenfunktion stetig. Die Anschlussbedingung lautet:

   $$\psi(0^+) = \psi(0^-)$$

   Die Ableitung der Wellenfunktion ist aber in diesem Fall nicht stetig, da die 2. Ableitung einen unendlichen Sprung am Ursprung macht. Um dies mathematisch zu zeigen, integrieren wir die Schrödingergleichung über das Intervall$[-\epsilon; \epsilon]$.

   $$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \hat{\mathcal{H}}\psi(x,t)dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)dx - \lambda\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)\Psi(x,t)dx = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)dx$$

   $$\Leftrightarrow \frac{-\hbar}{2m}[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] - \lambda\psi(0) = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)dx$$

   Dann machen wir den Grenzübergang $\epsilon \to 0$:

   $$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{-\hbar}{2m}[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] - \lambda\psi(0)\right) = E \cdot 0 = 0$$

   $$\Rightarrow \frac{-\hbar}{2m}[\psi'(0^+) - \psi'(0^-)] = \lambda\psi(0)$$

   Da der linksseitige Grenzwert der ersten Ableitung bei x = 0 nicht mit dem rechtsseitigen übereinstimmt, ist die Ableitung an der Stelle unstetig.

2. Es existiert genau ein gebundener Zustand in diesem Potential. Bestimme seinen Energie-Eigenwert und die normierte Wellenfunktion.

Lösung

Für einen gebundenen Zustand darf die Energie außerhalb vom Ursprung nicht größer als Null sein, da sonst $E > V$ wäre, und damit kein gebundener Zustand vorliegt. Es gilt also: $E < 0$. In dem Bereich (also überall, außer am Ursprung) muss die Wellenfunktion bis ins Unendliche exponentiell abfallen. Wir nehmen also folgenden Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{bx} & \text{für } x < 0 \\ Be^{-bx} & \text{für } x > 0 \end{cases} \tag{2}$$

Wegen der Stetigkeit am Ursprung muss gelten:

$$Ae^{b\cdot 0} = Be^{-b\cdot 0} \Rightarrow A = B$$

Für $V = 0$ gilt (einsetzen in die Schördingergleichung):

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}Ae^{\pm bx} = \frac{-\hbar^2 A}{2m}b^2 e^{\pm bx} = EAe^{\pm bx}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 b^2}{2m}$$

Der Energie-Eigenwert ist also kleiner als Null, wie gefordert. Um aber das b zu ermitteln, betrachten wir die Stetigkeitsbedingung der Ableitung für diesen Fall:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[A(-b) - Ab] = \lambda A \Leftrightarrow b = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

Als Letztes fehlt die Normierung der Wellenfunktion:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \left(\int_{-\infty}^{0} e^{2bx} dx + \int_{0}^{\infty} e^{-2bx} dx \right) = A^2/b = 1$$

$$\Rightarrow A = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar}$$

3. Betrachte die Streuzustände (d.h. $E > 0$) in diesem Potential. Unter dem Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R(E)\, e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ T(E)\, e^{ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3}$$

berechne die Reflexionsamplitude $R(E)$, den Reflexionskoeffizienten $r(E) = |R(e)|^2$, die Transmissionsamplitude $T(E)$ und den Transmissionskoeffizienten $t(E) = |T(E)|^2$.

Lösung

Wir betrachten wieder die Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion und ihre Ableitung.

1. $$\psi(0^+) = \psi(0^-) \Leftrightarrow 1 + R = T$$

2. $$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$$
$$\Rightarrow ikT - ik(1 - R) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}T$$

Dieses Gleichungssystem lösen wir jeweils nach R und T auf:

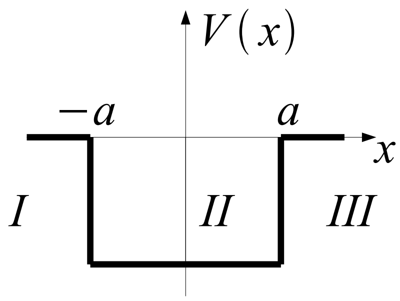
$$\Rightarrow R = \frac{-1}{1 + i\frac{k\hbar^2}{m\lambda}} \text{ sowie } T = \frac{1}{1 + \frac{m\lambda}{ik\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow r = \frac{1}{1 + \frac{k^2\hbar^4}{m^2\lambda^2}} \text{ sowie } t = \frac{1}{1 + \frac{m^2\lambda^2}{k^2\hbar^4}}$$

Für große E konvergiert t gegen 1 und r geht gegen 0. Für hohe Energien nimmt die Transmissionswahrscheinlichkeit zu: Ein hochenergetisches Teilchen, das von links kommt, kann also nur schwer von diesem Schlagloch zurückgeworfen werden. Nur für E gegen 0 konvergiert aber r gegen 1 und t geht gegen Null. Ein sehr niederenergetisches Teilchen kommt also kaum über das Schlagloch drüber.

2 Kastenpotential

Man leite die Eigenwertbedingungen für die Energieeigenwerte der gebunden Zustände eines Teilchens der Masse m im eindimensionalen Kastenpotential



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } |x| > a \end{cases} \tag{4}$$

her. Zeige in einer Skizze, wie die Energieeigenwerte graphisch bestimmt werden können.

Lösung

Da unser Potential symmetrisch ist $V(x) = V(-x)$ müsssen die Eigenfunktionen zu gebundenen Zuständen entweder gerade oder ungerade sein. Wir wählen daher als Ansatz für unsere Wellenfunktion nur gerade oder ungerade Funktionen.

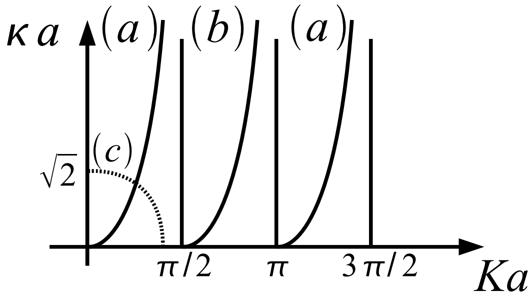


Abbildung 1: Skizze zu den geraden (a) und ungeraden (b) Eigenwertgleichungen

Für den Bereich II haben wir die DGL:

$$(\frac{d^2}{dx^2} + K^2)u(x) = 0, \quad K := \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$$

Für den Bereich I und III bekommen wir:

$$(\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2)u(x) = 0, \quad \kappa := \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Wir wählen folgende Lösungsansätze (gerader Ansatz):

$$u(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & \text{für } x < -a \\ C\cos(Kx) & \text{für } |x| < a \\ Be^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases} \tag{5}$$

Ebenso könnten wir eine Sinus Funktion verwenden, dann bekommen wir eine ungerade Lösung der Wellenfunktion. Wir beschränken uns hier auf den geraden Fall. Der ungerade ist analog zu behandeln.

Die in den Bereichen I und III im Unendlichen divergenten Partikularlösungen wurden gleich weggelassen, da u für x gegen unendlich nicht divergieren darf.
Die Stetigkeitsbedingungen liefern:

$$u(a^-) = u(a^+) \Rightarrow C\cos(Ka) = Be^{-\kappa a} \tag{6}$$

$$u'(a^-) = u'(a^+) \Rightarrow -CK\cos(Ka) = -B\kappa e^{-\kappa a} \tag{7}$$

Dies stellt ein lineares Gleichungssystem für B und C dar. Division der beiden Gleichungen und Multiplikation mit a liefert:

$$\kappa a = Ka\tan(Ka)$$

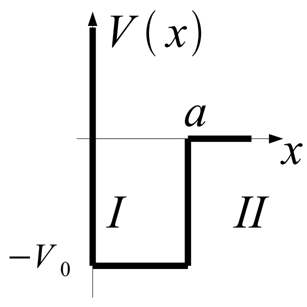
Aus den Definitionen von K und κ folgt zudem:

$$(Ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

Dies stellt eine Kreisgleichung zwischen den Variablen Ka und κa dar. (siehe Skizze) Der Schnittpunkt des Kreises mit der Tangenskurve liefert die lösung für Ka und κa und daraus kann die Energie E des gebundenen Zustandes bestimmt werden.

3 Potentiallandschaft

Gegeben sei die nebenstehende Potentiallandschaft. Für das Potential solle gelten $V_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$. Besitzt das System gebundene Zustände? Falls ja, gebe man die Eigenwerte an.



Lösung

Wir wählen ähnlich zur vorigen Aufgabe als Wellenfunktion für die Bereiche I und II:

$$u(x) = \begin{cases} A_1 e^{iKx} + B_1 e^{-iKx} & \text{für } 0 < x < a \\ B e^{-\kappa x} & \text{für } |x| < a \end{cases} \tag{8}$$

wobei K und κ wie in voriger Aufgabe definiert sind. Die für $x \to \pm\infty$ divergente Partikularlösung wurde bereits weggelassen.
Die Randbedingungen für x=0: $u(0) = 0 \Rightarrow A_1 + B_1 = 0$ bzw. mit $C = 2iA_1$ ergibt sich:

$$u(x) = \begin{cases} C \sin(Kx) & \text{für } 0 < x < a \\ B e^{-\kappa x} & \text{für } |x| < a \end{cases} \tag{9}$$

Dies ist analog zur vorigen Aufgabe. Auch die Anschlussbedingungen bei $x = a$ sind identisch. Man findet (ungerader Fall):

$$\kappa a = -Ka \cot(Ka)$$

$$(Ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$$

Die Abbildung in voriger Aufgabe zeigt die graphische Darstellung der beiden Funktionen, wobei der Viertelkreis gerade für den Fall von

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = 2 = (\sqrt{2})^2$$

gezeichnet ist.
Wie man daraus sieht, besitzt das gegebene Potential keinen gebundenen Zustand, da die Kurve (c) keinen der Äste der Kurvenschar (b) schneidet.

4 Wellenfunktion

Ein Teilchen der Masse m bewegt sich unter dem Einfluß des endlich tiefen Kastenpotentials

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < b \\ 0 & \text{für } |x| < b \end{cases} \tag{10}$$

wobei $V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{16mb^2}$ gilt. Gegeben ist zudem die folgende Wellenfunktion:

$$\psi(x) = A \begin{cases} \cos(k_1 x) & \text{für } |x| < b \\ \cos(k_1 b) e^{-\kappa_2(|x|-b)} & \text{für } |x| < b \end{cases} \tag{11}$$

Dabei ist

$$A = \sqrt{\frac{\pi}{(\pi + 4)b}}, \; k_1 = \kappa_2 = \frac{\pi}{4b}$$

1. Erfüllt die Wellenfunktion alle Stetigkeitsedingungen für eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung? Was muss für die Normierung gelten? (Integral muss nicht berechnet werden)

   ### Lösung

   Die Wellenfunktion und ihre Ableitung müssen bei $x = \pm b$ stetig sein, da dort höchstens die 2. Ableitung einen Sprung aufweisen darf. Da die Wellenfunktion gerade ist, also wegen $\psi(x) = \psi(-x)$, genügt es, die Stetigkeitsbedingungen bei $x = b$ nachzuprüfen. Einsetzen liefert sofort eine wahre Aussage.
   Für die Normierung muss $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ gelten. Dies ist hier erfüllt.

2. Zeigen Sie, dass die oben angegebene Wellenfunktion ein Energieeigenwert ist und berechnen Sie den Energieeigenwert.

Lösung

Für $|x| < b$ ist

$$H\psi(x) = A(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0)\cos(k_1 x) = -\frac{\hbar^2\pi}{32mb^2}A\cos(k_1 x) = E\psi(x)$$

Ebenso folgt für $|x| > b$, dass $H\psi(x) = E\psi(x)$. $\psi(x)$ ist also tatsächlich Eigenfunktion zum Eigenwert E.

3. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen außerhalb des Potentialtopfes aufhält?

Lösung

Es gilt:

$$P(|x| > b) = 2\int_b^\infty |\psi(x)|^2 = \int_b^\infty A^2 e^{-\frac{\pi}{2b}(x-b)} = \frac{2b}{\pi}A^2 = \frac{2}{\pi+4} = 28\%$$

5 Auf- und Absteigeoperatoren

Betrachte einen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator mit den Eigenzuständen n, wobei $\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \hbar\omega\,(n + 1/2)\,|n\rangle$, sowie die Auf- und Absteigeoperatoren aus der Vorlesung mit ihrer Kommutatorrelation $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$. Weiterhin ist der Teilchenzahloperator bekannt: $\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$. Bestimme die Normierungskonstante α in $|\psi\rangle = \hat{a}\,|n\rangle = \alpha\,|n-1\rangle$ und β in $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \beta\,|n+1\rangle$

Lösung

Es gilt $|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \alpha\,|n-1\rangle$ daraus erhalten wir:

$$|\alpha|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \left\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\right\rangle = n\,\langle n|n\rangle = n$$

$$\Rightarrow \hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

Für die Norm des Zustandes $|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \beta\,|n+1\rangle$ folgt analog:

$$|\beta|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \left\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\right\rangle = \left\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|n\right\rangle = n + 1$$

Dabei wurde Die Kommutatorrelation verwendet.

$$\Rightarrow \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

6 harmonischer Oszillator

Wir betrachten einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

mit den Eigenzuständen $|n\rangle$.
Zur Zeit $t = 0$ sei der Zustand durch

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}}\,|1\rangle$$

gegeben.

1. Man gebe die Zeitentwicklung $|\psi(t)\rangle$ an.

Lösung

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} |0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} |1\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{-i\omega t}{2}} |0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{3i}{2}} |1\rangle
\end{aligned}
$$

2. Mit welcher Wahrscheinlichkeit wird jeweils die Energie E_0, E_1 oder E_2 gemessen?

Lösung

$$
\begin{aligned}
P_0(t) &= |\langle 0|\psi(t)\rangle|^2 = 1/2 \\
P_1(t) &= |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = 1/2 \\
P_2(t) &= |\langle 2|\psi(t)\rangle|^2 = 0
\end{aligned}
$$

3. Berechnen Sie den Erwartungswert von x und p.
Hinweis: Überlegen Sie, welche Darstellung des Oszillators am besten geeignet ist, und welche Sätze für Erwartungswerte existieren.

Lösung

Wir lösen diese Aufgabe am besten mit der algebraischen Darstellung mit Vernichtern und Erzeugern. Es gilt für den Ortsoperator (siehe Vorlesung):

$$
\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})
$$

weiterhin gilt:

$$
\hat{a}\,|n = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle
$$

Zusammen mit der Orthonormiertheit ergibt dies:

$$
\langle x\rangle = \langle\psi(t)|\hat{x}\psi(t\rangle = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sin(\omega t)
$$

Um den Erwartungswert des Impulses zu berechnen, verwenden wir das Ehrenfest'sche Theorem.

$$
\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle
$$

Dies liefert:

$$
\langle p\rangle = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \cos(\omega t)
$$