Ferienkurs Quantenmechanik - Aufgaben
Sommersemester 2014

Fabian Jerzembeck und Christian Kathan
Fakultät für Physik
Technische Universität München

9. September 2014

Schrödingergleichung und Potentialprobleme

1 Zeitentwicklung und Schrödingergleichung

Aufgabe 1 (*)
Betrachten Sie die kräftefreie, eindimensionale Bewegung eines Teilchens der Masse m:

$$H = \frac{1}{2m}p^2$$

1. *Lösen Sie die Bewegungsgleichung für den Operator $q_H(t)$ und den Impulsoperator $p_H(t)$ im Heisenberg-Bild.*
2. *Berechnen Sie die Kommutatoren:*

$$[q_H(t_1), q_H(t_2)]; \qquad [p_H(t_1), p_H(t_2)]; \qquad [q_H(t_1), p_H(t_2)];$$

Lösung:
Es gilt

$$H = \frac{1}{2m}p^2; \qquad \frac{\partial H}{\partial t} = 0; \qquad \Rightarrow H_H = H$$

1) Bewegungsgleichung

$$i\hbar\dot{q}(t) = [q_H(t), H_H] = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}[q, H]e^{\frac{-i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

$[q, H] = \frac{1}{2m}[q, p^2] = \frac{1}{2m}(p[q,p] + [q,p]p) = \frac{i\hbar}{m}p$

$\Rightarrow \dot{q}_H(t) = \frac{1}{m}p_H(t),$

$i\hbar\dot{p}_H(t) = [p_H(t), H_H] = 0$

$\Rightarrow p_H(t) = \text{const} = p(0) = p$ Konstante der Bewegung

$\Rightarrow q_H(t) = q_H(0) + \frac{1}{2m}pt = q + \frac{p}{m}t$

2) Kommutatoren
$[q_H(t_1), q_H(t_2)] = [q + \frac{p}{m}t_1, q + \frac{p}{m}t_2] = [q,q] + \frac{1}{m^2}t_1t_2[p,p] + \frac{t_1}{m}[p,q] + \frac{t_2}{m}[q,p] = \frac{i\hbar}{m}(t_2 - t_1)$

$[p_H(t_1), p_H(t_2)] = [p,p] = 0$

$[q_H(t_1), p_H(t_2) = [q + \frac{p}{m}t_1, p] = [q.p] + \frac{t_1}{m}[p,p] = i\hbar$

Aufgabe 2 (**)
Zeigen Sie, dass für ein beliebiges eindimensionales Potential $V(x)$ eine normierbare Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung nur genau dann gefunden werden kann, falls die Energie E des Zustandes größer als das Minimum des Potentials ist.

Lösung:
Diese Aussage ist leicht einsichtig, wenn man die Schrödingergleichung etwas umformuliert. Schreibt man sie in der Form

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\Psi$$

auf, dann kann man recht leicht das Vorzeichen der zweiten Ableitung von Ψ in Abhängigkeit des Vorzeichens von Ψ untersuchen. Unter der Voraussetzung, dass die Energie stets kleiner ist als das Potential ist das Vorzeichen von $\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]$ stets positiv. Demnach sind für Lösungen Ψ der Schrödingergleichung stets das Vorzeichen der Funktion und ihrer zweiten Ableitung identisch.
Daraus erkennt man, dass die Wellenfunktion für positive Ψ stets konvex und für negative Ψ stets konkav ist. Umgangssprachlich ausgedrückt bewegen sich die Wellenfunktionen also stets von der x-Achse weg und können daher nicht mehr normierbar sein.

Aufgabe 3 (***)
Zeigen Sie, dass quantenmechanische Bindungszustände in einem eindimensionalen Potential $V(x)$ stets nicht-entartet sid. Nehmen Sie an, dass zwei Wellenfunktionen $\Psi_{1,2}(x)$ dieselbe Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

lösen.

Lösung:
Zunächst nehmen wir an, dass beide Wellenfunktionen $\Psi_{1,2}(x)$ unabhängige Lösungen der Schrödingergleichung zum gleichen Eigenwert E sind. Es gilt also

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_1''(x) + V(x)\Psi_1(x) = E\Psi_1(x) \qquad \text{und} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2''(x) + V(x)\Psi_2(x) = E\Psi_2(x)$$

Diese beiden Gleichungen können wir nun jeweils mit $\Psi_{2,1}(x)$ multiplizieren. Wir erhalten

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_1''(x)\Psi_2(x) + V(x)\Psi_1(x)\Psi_2(x) &= E\Psi_1(x)\Psi_2(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2''(x)\Psi_1(x) + V(x)\Psi_2(x)\Psi_1(x) &= E\Psi_2(x)\Psi_1(x) \end{aligned}$$

Diese beiden Gleichungen kann man nun voneinander abziehen, so dass sich einige Terme zu Null addieren. Man erhält

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi_1''(x)\Psi_2(x) - \Psi_2''(x)\Psi_1(x)\right] = 0$$

Diese Gleichung kann nun integriert werden. Die Integrationsgrenzen werden dabei so gewählt, dass man von $-\infty$ bis zu einem bestimmten Wert x integriert. Wir berechnen also

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{x} dy\,\left[\Psi_1''(y)\Psi_2(y) - \Psi_2''(y)\Psi_1(y)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{x} dy\,\partial_y\left[\Psi_1'(y)\Psi_2(y) - \Psi_2'(y)\Psi_1(y)\right] \\ &= \left[\Psi_1'(y)\Psi_2(y) - \Psi_2'(y)\Psi_1(y)\right]\Big|_{-\infty}^{x} = \Psi_1'(x)\Psi_2(x) - \Psi_2'(x)\Psi_1(x) \end{aligned}$$

Hierbei haben wir ausgenutzt, dass die Wellenfunktionen normierbar sein sollen und daher im Unendlichen verschwinden werden. Durch Umformung erhält man

$$\frac{\Psi_1'(x)}{\Psi_1(x)} = \frac{\Psi_2'(x)}{\Psi_2(x)} \qquad \Rightarrow \qquad \partial_x \log\left(\frac{\Psi_1(x)}{\Psi_2(x)}\right) = 0$$

Da also die Ableitung dieses Logarithmus verschwindet, muss der Logarithmus selbst und insbesondere sein Argument von x unabhängig sein. Dies kann aber nur genau dann der Fall sein, wenn die beiden Zustände $\Psi_{1,2}(x)$ linear abhängig sind, was einen Widerspruch zur Annahme darstellt.

2 Dichtematrix

Aufgabe 4 (*)
Prüfen Sie, ob die Dichtematrix

$$\rho = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

einen reinen Zustand beschreibt und berechnen Sie den Mittelwert der Observablen

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

in diesem Zustand.

Lösung:

$$\rho^2 = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathrm{Sp}\rho^2 = \frac{5}{9} < 1$$

Es ist also kein reiner Zustand

$$\rho A = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \Rightarrow \langle A \rangle = \mathrm{Sp}(\rho A) = 0$$

Aufgabe 5 (**)
Mit den Eigenzuständen von σ_z als VON-Basis sollen die Observablen A, B, C die folgende Matrixdarstellung besitzen:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}; \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 2i \\ -2i & 0 \end{pmatrix}$$

An einem Spinzustand wurden die folgenden Erwartungswerte gemessen:

$$\langle A \rangle = 2; \quad \langle B \rangle = 1/2; \quad \langle C \rangle = 0.$$

1. *Bestimmen Sie die Dichtematrix ρ des Spinzuständes.*
2. *Handelt es sich um einen reinen oder einen hemischten Spinzustand?*
3. *Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung in z-Richtung den Spinwert $+1$ (bzw. $+\hbar/2$ zu finden?*
4. *Berechnen Sie $\langle \sigma_x \rangle$, $\langle \sigma_y \rangle$, $\langle \sigma_z \rangle$*

Lösung:

1. ρ hermitisch, Sp $\rho = 1$

$$\Rightarrow \rho = \begin{pmatrix} a & b \\ b* & 1-a \end{pmatrix}; a = reell$$

$$\rho A = \begin{pmatrix} 3a & 0 \\ 0 & a-1 \end{pmatrix};$$

$$\rho B = \begin{pmatrix} a+b & 0 \\ 0 & b*+a-1 \end{pmatrix};$$

$$\rho C = \begin{pmatrix} -2ib & 0 \\ 0 & 2ib* \end{pmatrix};$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle A \rangle = \mathrm{Sp}(\rho A) = 4a - 1 = 2; \\ \langle B \rangle = \mathrm{Sp}(\rho B) = 2a + b + b* = 1/2; \\ \langle C \rangle = \mathrm{Sp}(\rho C) = 2i(b* - b) = 0 \\ \Rightarrow a = 3/4; b = b* = 0 \end{aligned}$$

$$\rho = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix};$$

2.

$$\mathrm{Sp}\rho^2 = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 9/16 & 0 \\ 0 & 1/16 \end{pmatrix} = 5/8 < 1 \Rightarrow \text{Gemischter Zustand}$$

3. Der Eigenwert $+1$ gehört zum Eigenzustand $|+\rangle$ der Observablen σ_z. Die Wahrscheinlichkeit ist also gerade das (1,1)-Element von ρ oder formal

$$w(+1) = \langle +|\rho|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9/16 & 0 \\ 0 & 1/16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 3/4$$

4.

$$\langle \sigma_x \rangle = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \mathrm{Sp} = \begin{pmatrix} 0 & 3/4 \\ 1/4 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

Und analog

$$\langle \sigma_y \rangle = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 0 & -3/4i \\ 1/4i & 0 \end{pmatrix} = 0$$
$$\langle \sigma_z \rangle = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 3/4 & 0i \\ 0 & -1/4 \end{pmatrix} = 1/2$$

3 Potentialprobleme

Aufgabe 6 *Ein Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf hat die anfängliche Wellenfunktion*

$$\Psi(x,0) = A\sin^3(\pi x/a) \qquad (0 \le x \le a)$$

Bestimmen Sie A, finden Sie $\Psi(x,t)$ und berechnen Sie $\langle x \rangle$ als eine Funktion der Zeit. Was ist der Erwartungswert der Energie?
Hinweis: *Die Eigenfunktionen und Eigenwerte des unendlich hohen Potentialtopfs sind*

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Hinweiß: $\sin[3\theta] = 3\sin[\theta] - 4\sin^3[\theta]$

Lösung:
Zur Lösung dieser Aufgabe soll zunächst die Anfangsbedingung $\Psi(x,0)$ durch statio-

näre Zustände des unendlich hohen Potentialtopfs ausgedrückt werden. Dazu kann man ein Additionstheorem anwenden

$$\sin 3\vartheta = 3\sin\vartheta - 4\sin^3\vartheta$$

Mit Hilfe dieses Additionstheoremes gelingt es, die dritte Potenz des Sinus in der Anfangsbedingung durch einfache Potenzen des Sinus zu schreiben

$$\sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{3}{4}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{1}{4}\left(3\frac{\pi x}{a}\right)$$

Demnach ist also die Anfangsbedingung

$$\Psi(x,0) = A\sqrt{\frac{a}{2}}\left[\frac{3}{4}\Phi_1(x) - \frac{1}{2}\Phi_3(x)\right]$$

wobei Φ_1 und Φ_3 jeweils der erste bzw. dritte stationäre Zustand des unendlich hohen Potentialtopfes sind. Die Normalisierungskonstante erhält man durch Berechnung des Betragsquadrates von Ψ. Zu beachten ist hierbei, dass die Eigenzustände des unendlich hohen Potentialtopfes orthonormal sind und Mischterme daher nicht berücksichtigt werden müssen.

$$|\Psi|^2 = |A|^2\frac{a}{2}\left(\frac{9}{16} + \frac{1}{16}\right) = \frac{5a}{16}|A|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Damit ist die Normierungskonstante gerade $A = 4/\sqrt{5a}$. Damit können wir nun das zeitliche Verhalten von Ψ bestimmen

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{10}}\left[2\Phi_1(x)e^{iE_1t/\hbar} - \Phi_3(x)e^{iE_3t/\hbar}\right]$$

Ferner können wir das Betragsquadrat dieser Funktion berechnen und erhalten

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{10}\left[0\Phi_1^2 + \Phi_3 - 6\Phi_1\Phi_3\cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right)\right]$$

Demnach ist der Erwartungswert von x gerade

$$\langle x\rangle = \int_0^a x|\Psi(x,t)|^2\,dx = \frac{9}{10}\langle x\rangle_1 + \frac{1}{10}\langle x\rangle_3 - \frac{3}{5}\cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right)\int_0^a x\Phi_1(x)\Phi_3(x)\,dx$$

Hierbei bezeichnet $\langle x\rangle_n$ den Erwartungswert bezüglich des n-ten stationären Zustandes. Dieser ist stets für alle n identisch $a/2$, wovon man sich leicht durch nachrechnen überzeugen kann. Das zu berechnende Integral ist

$$\frac{2}{a}\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\,dx = 0$$

Demnach ist auch der Ortserwartungswert dieser Wellenfunktion bei

$$\langle x \rangle = \frac{9}{10}\frac{a}{2} + \frac{1}{10}\frac{a}{2} = \frac{a}{2}$$

Aufgabe 7 (**)
Betrachten Sie das Potentialproblem

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq 0 \\ -V_0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$

mit $a, V_0 > 0$.

(a) *Zeichnen Sie die Potentiallandschaft.*

(b) *Geben Sie die Lösung der Schrödingergleichung für* $-V_0 < E < 0$ *in den zwei Bereichen I und II an.*

(c) *Formulieren Sie die Rand- und Anschlußbedingungen für das Problem.*

(d) *Ermitteln Sie eine Bestimmungsgleichung für die Energie-Eigenwerte der gebundenen Zustände. Lösen Sie diese graphisch.*

(e) *Vergleichen Sie die Lösungen mit denen des endlichen Potentialtopfes*

(f) *Wie groß muss* V_0 *sein, damit es mindestens einen gebundenen Zustand gibt?*

Lösung:
b) Wir machen den Ansatz

$$\Psi_I(x) = A\cos[kx] + B\sin[kx]$$

Aus der Schrödinger-Gleichung erhalten wir

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 + E \Rightarrow k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 + E)}$$

Für den Bereich II wählen wir

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x}$$

und finden mit der Schrödinger-Gleichung

$$\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$$

c) Randbedingungen

(i) $\Psi(x) = 0$ für $x \leq 0 \Rightarrow A = 0$

(ii) $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ stetig bei $x = a$
$\Rightarrow B\sin[ka] = Ce^{-\kappa a}$
$kB\cos[ka] = -\kappa Ce^{-\kappa a}$

d) Durch Division der beiden Gleichungen erhalten wir

$$\frac{1}{\kappa}\tan[ka] = -\frac{1}{\kappa}$$

oder

$$\cot[ka] = \frac{\kappa}{k} = \frac{\sqrt{\zeta^2 - (ka)^2}}{ka}, \qquad \zeta^2 = 2mV_0\frac{a^2}{\hbar^2}$$

e) Die Lösungen entsprechen den ungeraden Lösungen des symmetrischen Potentialtopfs. Mathematisch gesprochen zerfallen die Lösungen des symmetrischen Potentialtopfs wegen $[P, H] = 0$ in die Eigenfunktionen des Paritätsoperators mit positiven und negativen Eigenwerten. Die Symmetrie des Potentials wird in dieser Aufgabe gebrichen, wodurch nur noch die Menge der ungeraden Eigenfunktionen des symmetrischen Problems eine Lösung darstellt.

f) Wir sehen, dass ζ mindestens ka sein muss, da die Wurzel für eine Lösung größer gleich Null. In der Tat haben die linke und rechte Seite der Gleichung die Lösung Null für $\zeta = ka = \pi/2$, so das wir folgern, dass $\zeta > \pi/2$ sein muss. Dies ist äquivalent zu

$$V_0 \leq \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$$

Aufgabe 8 (**)
Betrachten Sie das Stufen Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \textit{für } x \leq 0 \\ V_0 & \textit{für} x > 0 \end{cases}$$

(i) *Berechnen Sie den Reflektionskoeffizienten R im Fall $E < V_0$ und diskutieren Sie das Ergebnis.*

(ii) *Berechnen Sie den Reflektionskoeffizienten R im Fall $E > V_0/$*

(iii) *Für ein derartiges Potential, das im Unendlichen nicht verschwindet, ist der Transmissionskoeffizient nicht einfach $|F|^2/|A|^2$ (A ist hierbei die Einfallsamplitude und F die transmittierte Amplitude), da sich die transmittierte Welle mit einer anderen Geschwindigkeit fortbewegt. Zeigen Sie, dass*

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

im Fall $E > V_0$.
Hinweis: *Betrachten Sie den Wahrscheinlichkeitsstrom j.*

(iv) *Berechnen Sie nun den Transmissionskoeffizienten explizit für den Fall $E > V_0$ und schlussfolgern Sie, dass $T + R = 1$*

Lösung:

(i): Eine einkommende Welle Ae^{ikx} der Energie $E < V_0$ wird an der Potentialbarriere sowohl reflektiert als auch transmittiert werden. In Folge der Reflektion wird sich links der Potentialbarriere eine Welle Be^{-ikx} in genau entgegengesetzter Richtung ausbreiten, während ein Teil der Welle $Fe^{-\kappa x}$ in die Potentialbarriere eindringen kann, da die Energie nicht zur weiteren Propagation ausreicht. Demnach lautet der allgemeine Ansatz

$$\Psi = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Fe^{-\kappa x} & (x > 0) \end{cases}$$

wobei wir die Größen $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ eingeführt haben. Der Reflektionskoeffizient ist zunächst definiert als das Betragsquadrat des Verhältnisses der Amplituden zwischen reflektierter Welle und einfallender Welle, sofern beide Wellen den gleichen Wellenvektor aufweisen.

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

Um dieses Amplitudenverhältnis zu berechnen, kann man nun die Anforderungen an die Wellenfunktion umsetzen. Wir fordern Stetigkeit von Ψ und Ψ' am Ursprung und erhalten damit die Gleichungen

$$\begin{aligned} \Psi: &\qquad A + B = F \\ \Psi': &\qquad ik(A - B) = -\kappa F \end{aligned}$$

Mit Hilfe dieser beiden Gleichungen kann man einen Zusammenhang zwischen den Amplituden A und B finden. Wir eliminieren dazu die Amplitude der transmittierten Welle F.

$$A + B = -\frac{ik}{\kappa}(A - B) \qquad \Rightarrow \qquad A\left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) = -B\left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right)$$

Damit ist nun der Reflektionskoeffizient

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\left|1 + \frac{ik}{\kappa}\right|^2}{\left|1 - \frac{ik}{\kappa}\right|^2} = 1$$

Eine eintreffende Welle der Energie $E < V_0$ wird also, obwohl sie teilweise in die Potentialbarriere eindringen kann, vollständig reflektiert.

(ii): Eine einkommende Welle Ae^{ikx} der Energie $E > V_0$ wird an der Potentialbarriere sowohl reflektiert als auch transmittiert werden. In Folge der Reflektion wird sich links der Potentialbarriere eine Welle Be^{-ikx} in genau entgegengesetzter Richtung ausbreiten, während ein Teil der Welle Fe^{ilx} die Potentialbarriere überwinden kann. Demnach lautet der allgemeine Ansatz

$$\Psi = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Fe^{ilx} & (x > 0) \end{cases}$$

wobei wir die Größen $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $l = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ eingeführt haben. Um den Reflektionskoeffizienten zu berechnen, kann man nun die Anforderungen an die Wellenfunktion umsetzen. Wir fordern Stetigkeit von Ψ und Ψ' am Ursprung und erhalten damit die Gleichungen

$$\begin{aligned} \Psi: &\qquad A + B = F \\ \Psi': &\qquad ik(A - B) = ilF \end{aligned}$$

Mit Hilfe dieser beiden Gleichungen kann man einen Zusammenhang zwischen den Amplituden A und B finden. Wir eliminieren dazu die Amplitude der transmittierten Welle F.

$$A + B = \frac{k}{l}(A - B) \qquad \Rightarrow \qquad A\left(1 - \frac{k}{l}\right) = -B\left(1 + \frac{k}{l}\right)$$

Damit ist nun der Reflektionskoeffizient

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\left|1-\frac{k}{l}\right|^2}{\left|1+\frac{k}{l}\right|^2} = \frac{(k-l)^2}{(k+l)^2} = \frac{(k-l)^4}{(k^2-l^2)^2}$$

Dieser Ausdruck kann nun vereinfach werden, indem man sich die Definition der Größen k und l in Erinnerung ruft. Es ist

$$k^2 - l^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - E + V_0) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 \qquad \text{und} \qquad k - l = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left[\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}\right]$$

Damit ist im Fall $E > V_0$ der Reflektionskoeffizient

$$R = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0})^4}{V_0^2}$$

(iii): Der Transmissionfskoeffizient ist das Verhältnis des transmittierten Wahrscheinlichkeitsstromes J_t zum einfallenden Wahrscheinlichkeitsstrom J_i. Diese beiden Ströme können berechnet werden durch

$$J_t = frac\hbar lm|F|^2 \qquad \text{und} \qquad J_i = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

An dieser Stelle wird ersichtlich, dass die Definition des Reflektionskoeffizienten zu dieser Definition analog ist. Der Transmissionskoeffizient ist nun

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \left|\frac{F}{A}\right|^2 \frac{l}{k} = \left|\frac{F}{A}\right|^2 \sqrt{\frac{E - V_0}{E}}$$

Wie man an diesem Ergebnis erkennen kann, gelten die Betrachtungen nur für den Fall $E > V_0$.

(iv): Für die explizite Berechnung des Transmissionskoeffizienten können wir den bereits in (ii) aufgestellten Ansatz heranziehen. Aus den Stetigkeitsbedingungen für Ψ und Ψ' folgern wird unter Elimination von B

$$F = A + B = A + A\frac{k-l}{k+l} = \frac{2k}{k+l}A$$

Damit kann nun der Transmissionskoeffizient berechnet werden

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 \frac{l}{k} = \left(\frac{2k}{k+l}\right)^2 \frac{l}{k} = \frac{4kl(k-l)^2}{(k^2-l^2)^2)}$$

Mit bereits berechneten Ausdrücken aus (iii) ergibt sich daher

$$T = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E-V_0}(\sqrt{E} - \sqrt{E-V_0})^2}{V_0^2}$$

Zu berechnen bleibt noch die Summe aus Reflexions- und Transmissionskoeffizient

$$T + R = \frac{4kl}{(k+l)^2} + \frac{(k-l)^2}{(k+l)^2} = \frac{4kl + k^2 - 2kl + l^2}{(k+l)^2} = \frac{(k+l)^2}{(k+l)^2} = 1$$

4 δ-Potential

Aufgabe 9 (**)
Berechnen Sie die Bindungsenergien und normierten Wellenfunktionen für ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m, das von einem eindimensionalen δ-Potential

$$V(x) = -\lambda\delta(x) \qquad \lambda > 0$$

angezogen wird. Leiten Sie zuerst aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung die Sprungbedingung für die Ableitung der Wellenfunktion am Ursprung her

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\left[\Psi'(\varepsilon) - \Psi'(-\varepsilon)\right] = \lambda\Psi(0)$$

Wie viele Bindungszustände mit $E < 0$ gibt es? Berechnen Sie für den Bindungszustand die Orts- und Impulsunschärfen Δx und Δp und üperprüfen Sie die Heisenberg'sche Unschärferelation $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$

Lösung:
Für $x \neq 0$ lautet die Schrödingergleichung für dieses Problem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x) \qquad \text{bzw.} \qquad \Psi''(x) = q^2\Psi(x)$$

Mit der Einführung des Parameters $q^2 = -2mE/\hbar$ sehen wir also, dass die zweite Ableitung der Wellenfunktion proportional zur Wellenfunktion selbst ist. Dabei ist $E < 0$ für einen Bindungszustand, die Wurzel ist also reell. Man wähle als Ansatz zuer Lösung

$$\Psi(x) = Ae^{-q|x|}$$

da dieser Ansatz im Gegensatz zur gewöhnlichen Exponentialfunktion der Symmetrie des Potentials entspricht. Um die Sprungbedingung zu erhalten, integriert man die Schrödingergleichung über das Intervall $(-\varepsilon, \varepsilon)$ und erhält

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) - \lambda\delta(x)\Psi(x) - E\Psi(x) \right] dx = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'(x)\Big|_{-\varepsilon}^{\epsilon} - \lambda\Psi(0) - \int_{-\varepsilon}^{\epsilon} = 0$$

Lässt man nun ε gegen Null gehen, so verschwindet der letzte Term, da $\Psi(x)$ beschränkt ist und man erhält die gewünschte Gleichung. Die Sprungbedingung bei $x = 0$ ergibt nun

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A(-q - q) = \lambda A \qquad \text{also} \qquad q = \frac{\lambda m}{\hbar^2}$$

Die Bindungsenergie ist damit

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

wobei wir nur genau einen Bindungszustand gefunden haben. Es scheint also nur genau diesen einen gebundenen Zustand für das attraktive Deltapotential zu geben. Die Konstante A berechnet sich durch die Normalisierung

$$1 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2q|x|} = 2 \cdot \frac{A^2}{2q}$$

also $A = \sqrt{q}$. Die Lösung ist also

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{\lambda m}}{\hbar} e^{-\frac{\lambda m}{\hbar^2}|x|}$$

Wir sehen nun, dass $\Psi(x)$ eine gerade Funktion ist, so dass sowohl $\langle x \rangle$ als auch $\langle p \rangle$ verschwinden. Zu berechnen bleibt

$$\left\langle x^2 \right\rangle = q \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-2q|x|} = 2q \frac{1}{8q^3} \underbrace{\int_{0}^{\infty} dy\, y^2 e^{-y}}_{=2} = \frac{1}{2q^2}$$

$$\left\langle p^2 \right\rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi(x)\Psi''(x) = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx (\Psi'(x))^2 = 2\hbar^2 q^3 \underbrace{\int_0^\infty dx\, e^{-2qx}}_{=1/2q} = \hbar^2 q^2$$

Damit ist also $\Delta x = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}\lambda m}$ und $\Delta p = \frac{\lambda m}{\hbar}$ und die Unschärfe ist

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{2}\frac{\hbar}{2} > \frac{\hbar}{2}$$

so dass die Unschärferelation erfüllt ist.

Aufgabe 10 (**)
In der Mitte eines unendlichen hohen Potentialtopfs der Breite $2a$ befindet sich eine δ-Barriere $V(x) = \lambda\delta(x)$ mit $\lambda > 0$.

(a) Zeichnen Sie den Potentialtopf

(b) Betrachten Sie den Ansatz

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

jeweils in den Gebieten links und rechts von der Barriere.

(c) Stellen Sie die Randbedingungen bei $x = \pm a$ und die Anschlussbedingung bei $x = 0$ auf.

(d) Bestimmen Sie die Koeffizienten der Wellenfunktion

(e) Leiten Sie die Bedingungen für die möglichen k-Werte ab.

(f) Welche Parität besitzen die Wellenfunktionen?

(g) Geben Sie die Normierung der Wellenfunktion an.

Lösung:
Die Schrödinger-Gleichung hat die Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \lambda\delta(x)\right]\psi(r) = E_n\psi(r)$$

Was uns zu der Form für das δ-Potential führt

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+}\left[\Psi'(\varepsilon) - \Psi'(-\varepsilon)\right] = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi(0)$$

Der Ansatz

$$\Psi(x)_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

führt mit der Randbedingung $\Psi_1(-a) = 0$ zu

$$B = -Ae^{-2ika}$$

Eliminnieren wir damit B, folgt

$$\Psi(x)_1 = A(e^{ikx} + e^{-2ika}e^{-ikx}) = Ae^{-ika}(e^{ikx}e^{ika} + e^{-ika}e^{-ikx}) = 2iAe^{ika}\sin[k(x+a)] \to A'\sin[k(x+a$$

Analog kommt aus der Wellenfunktion für den Bereich II und der Randbedingung $\Psi_2(a) = 0$

$$D = -Ce^{2ika} \qquad \text{und} \qquad \Psi(x)_2 = 2iCe^{ika}\sin[k(x-a)] \to C'\sin[k(x-a)]$$

Bei $x = 0$ muss gelten $\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \iff A'\sin[ka] = -C'\sin[ka]$ und durch die Bedingung für Ψ'

$$kC'\cos[ka] - kA'\cos[ka] = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}A'\sin[ka]$$

Ist nun $ka = n\pi$, so folgt $A' = C'$ und man erhällt eine antisymmetrische Lösung

$$\Psi(x) = A(-1)^n \begin{cases} \sin[kx] & \text{für } x \leq 0 \\ \sin[kx] & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

Falls $ka \neq n\pi$, ist $a' = -C'$ und man erhällt eine symmetrische Lösung

$$\Psi(x) = \begin{cases} A\sin[k(x+a)] & \text{für } x \leq 0 \\ -A\sin[k(x-a)] & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

Die Normierung ist für den symmetrischen und den antisymmetrischen Fall

$$A = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a - \frac{\sin[2ka]}{2k}}} & \text{symmetrisch} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} & \text{antisymmetrisch } x > 0 \end{cases}$$

5 Harmonischer Oszillator

Aufgabe 11 **(*)** *Zeigen Sie: Wenn Ψ_ν Eigenfunktion von $n = a^\dagger a$ zum Eigenwert ν ist, so ist $a^\dagger\Psi_\nu$ Eigenfunktion von n mit Eigenwert $\nu + 1$.*

Lösung:
Um diese Aussage zu zeigen, kann man den Kommutator der beiden Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a betrachten. Wie man durch Nachrechnen verifizieren kann, gilt

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Damit kann man nun auch den Kommutator des Teilchenzahloperators mit dem Aufsteigeoperator bestimmen. Es ist

$$[n, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} = a^\dagger$$

Mit dieser Aussage folgt unmittelbar

$$n a^\dagger \Psi_\nu = (a^\dagger n + a^\dagger)\Psi_\nu = a^\dagger(\nu + 1)\Psi_\nu = (\nu + 1)a^\dagger \Psi_\nu$$

womit die Behauptung gezeigt ist.

Aufgabe 12 (**)
Wir berachten einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit den 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.*

(2) Mit welcher Wahrscheinlichleit wird jeweils die Energie E_0, E_1 *oder* E_2 *gemessen?*

(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:
1) Die Zeitentwicklung lautet

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

2)

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

3) Am besten löst man diese Aufgabe mit der algebraischen Methode. Der Ortsoperator lautet dann

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

und weiter gilt

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

Damit folgt für den Erwartungswert

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

und für den Impuls

$$\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\cos[\omega t]$$

Aufgabe 13 (***)
Ein Teilchen befindet sich im Grundzustand eines harmonischen Oszillators mit der Frequenz ω, wobei sich plötzlich die Federkonstante vervierfacht, so dass $\omega' = 2\omega$. Während dieses unendlich schnellen Vorganges ändert sich die Wellenfunktion des Teilchen nicht. Wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit bei einer Energiemessung den Wert $\hbar\omega/2$ ($\hbar\omega$) zu erhalten?

Lösung:
Die Energien, die nun nach der Vervierfachung der Federkonstante erlaubt sind, sind folgende

$$E'_n = \hbar\omega'\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\,(2n+1) = \hbar\omega, 3\hbar\omega, 5\hbar\omega, \ldots$$

Demnach ist die Wahrscheinlichkeit, den Wert $\hbar\omega/2$ gleich Null. Um die Wahrscheinlichkeit für den Energiewert $\hbar\omega$ zu berechnen, muss man die Wellenfunktion des Teilchens, also den Grundzustand des alten Systems, auf den Grundzustand des neuen Systems projizieren, da diese Energie gerade dem Grundzustand des neuen Systems entspricht. Die Wahrscheinlichkeit ist also $P_0 = |c_0|^2$, wobei

$$c_0 = \int \Psi(x,0)\Psi'\,dx$$

wobei $\Psi(x,0)$ den Grundzustand des alten Systems indiziert und Ψ' der Grundzustand des neuen Systems ist.

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad \text{und} \qquad \Psi'_0(x) = \left(\frac{2m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{2m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Damit ist

$$c_0 = 2^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3m\omega}{2\hbar}x^2}\,dx = 2^{1/4}\sqrt{\frac{2}{3}}$$

Die Wahrscheinlichkeit ist damit $P_0 = \sqrt(2)2/3 \approx 0.9428$