

Präsenzübungen
Aufgabe 1:

- (a) ψ kann für hinreichend kleine $t > 0$ nicht reell sein: Für $t = 0$ sei $\psi(\vec{r}, t = 0)$ reell für alle \vec{r} . Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi. \quad (1)$$

Wenn $\hat{H}\psi$ für $t = 0$ nicht für alle \vec{r} verschwindet, so ist

$$\psi(\vec{r}, dt) = \psi(\vec{r}, 0) - \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi dt. \quad (2)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite ist imaginär und damit ist $\psi(\vec{r}, dt)$ komplex. Wenn $\hat{H}\psi$ für $t = 0$ für alle \vec{r} verschwindet, dann ist aber $d\psi/dt = 0$ und ψ bleibt reell, sogar für alle Zeiten $t > 0$. Die Behauptung aus der Aufgabe gilt also nur „im Allgemeinen“. Bemerkung: Ist $\hat{H}\psi = 0$ für alle \vec{r} , so ist ψ Eigenfunktion zu \hat{H} zum Eigenwert Null. Ein Energieeigenwert Null kann existieren, muss es aber nicht.

Ist $\int d^3r \psi(\vec{r}, t)$ erhalten?

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int d^3r \psi(\vec{r}, t) &= \int d^3r \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \underbrace{\int d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t)}_{=0} - \frac{i}{\hbar} \int d^3r V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Der erste Term verschwindet für quadratintegrale Funktionen unter Ausnutzung des Gaußschen Satzes. Der zweite Term ist höchstens für speziell gewählte $V(\vec{r})$ und $\psi(\vec{r}, t)$ Null, also nicht allgemein. So muss $V(\vec{r})$ das Vorzeichen wechseln, da $\psi(\vec{r}, 0) \geq 0$ nach Voraussetzung.

- (b) ρ_E ist reell:

$$\rho_E^* = -\frac{i\hbar}{2} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \right) = \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) = \rho_E. \quad (4)$$

Weiter gilt

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi, \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (\hat{H})^2 \psi, \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (\hat{H}^*)^2 \psi^*. \quad (7)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int d^3r \rho_E &= \frac{d}{dt} \int d^3r \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) \\
&= \frac{i\hbar}{2} \int d^3r \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} \psi \right) \\
&= -\frac{i}{2\hbar} \int d^3r (\psi^* (\hat{H})^2 \psi - \psi (\hat{H}^*)^2 \psi^*) \\
&= -\frac{i}{2\hbar} \int d^3r (\psi^* (\hat{H})^2 \psi - \psi^* (\hat{H})^2 \psi) = 0,
\end{aligned} \tag{8}$$

da $(\hat{H})^2$ hermitesch ist.

ρ_E lässt sich als Energiedichte interpretieren. Beachte

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \int d^3r \psi^* \hat{H} \psi = \frac{1}{2} \left[\int d^3r \psi^* \hat{H} \psi + \int d^3r \psi^* \hat{H} \psi \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[\int d^3r \psi \underbrace{\hat{H}^* \psi^*}_{-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}} + \int d^3r \psi^* \underbrace{\hat{H} \psi}_{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}} \right] \\
&= \int d^3r \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) = \int d^3r \rho_E.
\end{aligned} \tag{9}$$

Aufgabe 2:

(a) Es ist (Hinweis!)

$$\begin{aligned}
T(\vec{a}) \psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} + \vec{a}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n \psi(\vec{r}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\vec{a} \cdot \frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \right)^n \psi(\vec{r}) \\
&= \exp \left(\frac{i \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}}{\hbar} \right) \psi(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{10}$$

Dies gilt für alle beliebig oft differenzierbaren Funktionen $\psi(\vec{r})$, also folgt die Operatoridentität

$$T(\vec{a}) = \exp \left(\frac{i \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}}{\hbar} \right). \tag{11}$$

(b) *Lösung 1:* Für jede Funktion $\psi(\vec{r})$ gilt

$$\begin{aligned}
T(\vec{a}) \vec{r} T(\vec{a})^{-1} \psi(\vec{r}) &= T(\vec{a}) \vec{r} T(-\vec{a}) \psi(\vec{r}) \\
&= T(\vec{a}) \vec{r} \psi(\vec{r} - \vec{a}) = (\vec{r} + \vec{a}) \psi(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{12}$$

Lösung 2 (hier für eine Dimension, für drei Dimensionen analog): Für eine beliebige Funktion G des Impulsoperators gilt

$$[G(\hat{p}_x), x] = \frac{\hbar}{i} G'(\hat{p}_x). \tag{13}$$

Beweis: Sei $\tilde{\psi}(p_x)$ eine beliebige Funktion in Impulsdarstellung. Es gilt

$$\begin{aligned}
[G(\hat{p}_x), x] \tilde{\psi}(p_x) &= G(p_x) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp_x} \tilde{\psi}(p_x) \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp_x} G(p_x) \tilde{\psi}(p_x) \\
&= \frac{\hbar}{i} G'(\hat{p}_x) \tilde{\psi}(p_x).
\end{aligned} \tag{14}$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
T(a_x) \hat{x} T^{-1}(a_x) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \hat{x} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \\
&= \exp\left(\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \hat{x} + \left[\hat{x}, \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \right] \right) \\
&\stackrel{\text{Gl. (13)}}{=} \hat{x} + \exp\left(\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \left[a_x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a_x \hat{p}_x\right) \right] = \hat{x} + a_x.
\end{aligned} \tag{15}$$

Hausaufgaben

Aufgabe 3:

(a) Aus

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar} \tag{16}$$

und

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi \tag{17}$$

folgt

$$E\phi(x) e^{-iEt/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-iEt/\hbar} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V(x)\phi(x) e^{-iEt/\hbar} \tag{18}$$

$$\Rightarrow E\phi(x) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = V(x)\phi(x) \tag{19}$$

$$\Rightarrow V(x) = E + \frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \tag{20}$$

Die additive Konstante E ist physikalisch unerheblich.

(b) Für

$$\phi(x) = N e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{21}$$

ist

$$\begin{aligned}
V(x) &= E + e^{x^2/(2\sigma^2)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-x^2/(2\sigma^2)} \\
&= E + e^{x^2/(2\sigma^2)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{x}{\sigma^2} e^{-x^2/(2\sigma^2)} \right] \\
&= E + e^{x^2/(2\sigma^2)} \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{\sigma^2} e^{-x^2/(2\sigma^2)} + \frac{x^2}{\sigma^4} e^{-x^2/(2\sigma^2)} \right] \\
&= E - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sigma^2}}_{\text{const}} + \frac{\hbar^2}{2m\sigma^4} x^2,
\end{aligned} \tag{22}$$

also i. W. ein harmonischer Oszillator.

(c) Für

$$\phi(x) = N e^{-x/2l} \tag{23}$$

mit $N, l, x > 0$ ist

$$\begin{aligned}
V(x) &= E + \frac{1}{\phi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) \\
&= E + \frac{\hbar^2}{2m} e^{x/2l} \left(-\frac{1}{2l} \right)^2 e^{-x/2l} \\
&= E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4l^2} = E + \frac{\hbar^2}{8ml^2} = \text{const.}
\end{aligned} \tag{24}$$

Das ist ein konstantes Potential. Offenbar ist es mit einer exponentiell abfallenden Wellenfunktion kompatibel. Wir werden sehen, dass das in klassisch verbotenen Bereichen (d. h. mit $E < V = \text{const}$) tatsächlich der Fall und wichtig ist.

Aufgabe 4:

(a)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-L/2}^{L/2} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{1}{L} = 1 \quad (25)$$

(b)

$$\langle x \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi^*(x) x \psi(x) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{x}{L} = 0 \quad (26)$$

Das ist klar wegen der Symmetrie der Wellenfunktion: $\psi(x)$ ist gerade.

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi^*(x) x^2 \psi(x) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{x^2}{L} = \frac{1}{L} \left[\frac{x^3}{3} \right]_{-L/2}^{L/2} = \frac{L^2}{12} \quad (27)$$

Die Schwankung von x ist daher

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{L}{2\sqrt{3}} \quad (28)$$

(c)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{\sqrt{L}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \left[\frac{e^{-ipx/\hbar}}{-ip/\hbar} \right]_{-L/2}^{L/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{\hbar}{p} 2 \sin \frac{pL}{2\hbar} \end{aligned} \quad (29)$$

(d)

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{1}{L} \frac{\hbar^2}{p} \sin^2 \frac{pL}{2\hbar} = 0 \quad (30)$$

Das Integral ist null wegen der Symmetrie. Bemerkung: Es ist aber nur bedingt konvergent, da $\int_0^{\infty} dp \tilde{\psi}^* p \tilde{\psi}$ divergiert.

(e)

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{4\hbar^2}{L} \sin^2 \frac{pL}{2\hbar} = \infty \quad (31)$$

Der Erwartungswert $\langle p^2 \rangle$ divergiert, weil $\tilde{\psi}(p)$ nur schwach abfällt. Wir sehen an diesem Beispiel, dass eine quadratintegrale Funktion eine divergente Breite haben kann. Es folgt, dass auch Δp und $\Delta x \Delta p$ unendlich sind. Das Ergebnis ist konsistent mit der Heisenbergschen Orts-Impuls-Unschärferelation, weil $\Delta x \Delta p = \infty > \hbar/2$ ist.