Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 3

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

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

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

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

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?

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

Der erste Term verschwindet für quadratintegrable 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 $\psi(\vec{t}, 0) \geq 0$ nach Voraussetzung.

(b) ρ_E ist reell:

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

Weiter gilt

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

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

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

Damit folgt

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

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 jeden 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

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

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

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

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

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

Weil man immer eine Konstante zum Potential addieren kann, sind $V(x) = E + \frac{1}{\phi(x)}\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$ und $\tilde{V}(x) = \frac{1}{\phi(x)}\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$ gleichwertig.

(b) Für

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

ist

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

also i. W. ein harmonischer Oszillator.

(c) Für

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

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)

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

(b)

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

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

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

Die Schwankung von x ist daher

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

(c)

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

(d)

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

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)

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \frac{4\hbar^2}{L}\, \sin^2 \frac{pL}{2\hbar} = \infty \tag{31}$$

Der Erwartungswert $\langle p^2 \rangle$ divergiert, weil $\tilde{\psi}(p)$ nur schwach abfällt. Wir sehen an diesem Beispiel, dass eine quadratintegrable 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.