TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2019

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 4

Präsenzübungen

Aufgabe 1:

(a) $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ auf $\left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]$ mit den Randbedingungen (Funktion glatt bei $\pm L/2$!)

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right) \quad \text{und} \quad \psi'\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi'\left(\frac{L}{2}\right). \tag{1}$$

(b) $-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) = E\psi(x)$. Ansatz:

$$\psi(x) = C\cos kx + D\sin kx. \tag{2}$$

Gleichung erfüllt für $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.
Randbedingungen:

$$C\cos\frac{kL}{2} - D\sin\frac{kL}{2} = C\cos\frac{kL}{2} + D\sin\frac{kL}{2}, \tag{3}$$

$$Ck\sin\frac{kL}{2} + Dk\cos\frac{kL}{2} = -Ck\sin\frac{kL}{2} + Dk\cos\frac{kL}{2}. \tag{4}$$

Es folgt

$$D\sin\frac{kL}{2} = 0 \quad \text{und} \quad Ck\sin\frac{kL}{2} = 0. \tag{5}$$

Angenommen, $k \neq 0$. Da nicht $C = D = 0$, folgt $\sin\frac{kL}{2} = 0$ und damit

$$\frac{kL}{2} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3\dots \tag{6}$$

$$\Rightarrow \quad k = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, 3\dots \tag{7}$$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{L}\right)^2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}\,n^2. \tag{8}$$

Für jedes $n = 1, 2, 3, \dots$ existieren zwei linear unabhängige Lösungen (zweifache Entartung) proportional zu

$$\cos\left(\frac{2\pi n}{L}\,x\right) \quad \text{und} \quad \sin\left(\frac{2\pi n}{L}\,x\right). \tag{9}$$

Außerdem existiert eine Lösung für $k = 0$:

$$\psi_0 = \text{const} \neq 0,$$
$$E_0 = 0.$$

Aufgabe 2:

(a)Es ist zu zeigen, dass p_A positiv semidefinit und vollständig ist. Die Eigenschaft der positiv semidefinit ist per Konstruktion gegeben. Die Vollständigkeit von p_A kann wie folgt gezeigt werden:

$$\begin{aligned}\sum_A p_A &= \sum_A |\langle\varphi_a,\psi\rangle|^2 \\ &= \sum_A \langle\psi,\varphi_a\rangle\langle\varphi_a,\psi\rangle \\ &= \sum_A \int d^3r\ \psi^*(\vec{r})\psi_A(\vec{r}) \int d^3r'\ \psi_A^*(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\end{aligned} \tag{10}$$

Nun nutzen wir die Vollständigkeit der Eigenfunktionen

$$\sum_A \psi_A(\vec{r})\psi_A^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{11}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}\sum_A p_A &= \int d^3r \int d^3r' \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}')\delta(\vec{r}-\vec{r}) \\ &= \int d^3r \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = 1\end{aligned} \tag{12}$$

(b) p'_A ist ebenfalls positiv semidefinite. Aber

$$p'_A = |\langle\varphi_a,\psi\rangle| \geq |\langle\varphi_a,\psi\rangle|^2 = p_A, \tag{13}$$

i.e. p'_A ist größer oder gleich p_A, da $|\langle\varphi_a,\psi\rangle| \in [0,1]$ und $p'_A = p_A$, wenn $|\langle\varphi_a,\psi\rangle|= 0$ oder 1. Sobald also $0 < |\langle\varphi_a,\psi\rangle| < 1$, (d.h. weder ausgeschlossen noch sicher eintretend), ist

$$\sum_A p'_A > 1 \tag{14}$$

(c)Der Fall für p_A wird im Spript am Ende von Abschnitt 5.6 diskutiert. Wenn die Wahrscheinlichkeiten von Messwerten propotional zu $|\langle\varphi_A,\psi\rangle|$ wären, würden ferne Lichtquellen heller erscheinen als sie es in der realen Welt tun. Bei gleichmäßig verteilten Lichtquellen (z.B. Sternen) nimmt deren Zahl mit r^2 zu, dann tragen fernere Lichtquellen immer mehr zur Helligkeit bei, vermutlich heller Nachthimmel.

Aufgabe 3:

Es ist $\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\lambda}}\, e^{-|x|/2\lambda}$.

(a)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = \frac{1}{2\lambda}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-|x|/\lambda} = \frac{1}{\lambda}\int_0^{\infty} dx\, e^{-x/\lambda} = \frac{1}{\lambda}\left[-\lambda e^{-x/\lambda}\right]_0^{\infty} = 1 \tag{15}$$

(b)

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)x\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{x}{2\lambda}e^{-|x|/\lambda} = 0 \tag{16}$$

weil der Integrand eine ungerade Funktion von x ist.

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)x^2\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{x^2}{2\lambda}e^{-|x|/\lambda} \\ &= \frac{1}{\lambda}\int_0^{\infty} dx\, x^2 e^{-x/\lambda} = 2\lambda^2\end{aligned} \tag{17}$$

(c)

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx}\, \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx-|x|/2\lambda} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \int_{-\infty}^{0} dx\, e^{-ikx+x/2\lambda} + \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \int_{0}^{\infty} dx\, e^{-ikx-x/2\lambda} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \left[\frac{e^{-ikx+x/2\lambda}}{-ik+1/2\lambda} \right]_{-\infty}^{0} + \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \left[\frac{e^{-ikx-x/2\lambda}}{-ik-1/2\lambda} \right]_{0}^{\infty} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \frac{1}{-ik+1/(2\lambda)} - \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \frac{1}{-ik-1/(2\lambda)} = \frac{2\sqrt{2\lambda}}{1+4k^2\lambda^2} \qquad (18)
\end{aligned}
$$

(d)

$$
\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \hbar k\, |\tilde{\psi}(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \hbar k \left(\frac{2\sqrt{2\lambda}}{1+4k^2\lambda^2} \right)^2 = 0 \qquad (19)
$$

weil der Integrand eine ungerade Funktion von k ist.

$$
\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \hbar^2 k^2\, |\tilde{\psi}(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \hbar^2 k^2 \left(\frac{2\sqrt{2\lambda}}{1+4k^2\lambda^2} \right)^2 \\
&\overset{q=2\lambda k}{=} \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{q^2}{(1+q^2)^2} = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \qquad (20)
\end{aligned}
$$

Es folgt

$$
\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{2}\lambda, \qquad (21)
$$

$$
\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{2\lambda} \qquad (22)
$$

und damit

$$
\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}. \qquad (23)
$$

Die Heisenbergsche Unschärferelation ist also erfüllt, aber nicht ausgeschöpft – $\Delta x \Delta p$ ist größer als durch die Unschärferelation erzwungen.

Hausaufgaben

Aufgabe 4:

(a) Integriere die Schrödinger-Gleichung über das infinitesimale Intervall $[-\epsilon, \epsilon]$:

$$
\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, [-\eta\delta(x) - E]\, \psi(x) \qquad (24)
$$

$$
\Rightarrow \quad \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2}\, \eta\, \psi(0) \qquad (25)
$$

(b) Für $x < 0$ und $x > 0$ ist $V(x) = 0$, es folgt $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Wir betrachten o. B. d. A. eine von links einlaufende Welle. Die von rechts einlaufende Lösung zu derselben Energie lässt sich analog finden und führt auf dieselben Koeffizienten. Ansatz:

$$
\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für } x < 0, \\ Fe^{ikx} & \text{für } x > 0. \end{cases} \qquad (26)
$$

$\psi(x)$ ist stetig bei $x = 0$, also können beide Ausdrücke bei $x = 0$ stetig fortgesetzt werden und müssen den gleichen Funktionswert ergeben. Es folgt

$$
F = A + B. \qquad (27)
$$

Für die Ableitung folgt aus Teil (a)

$$ikF - ik\,(A - B) = -\frac{2m\eta}{\hbar^2}\,(A + B). \tag{28}$$

Aus den beiden Gleichungen folgt

$$F = \frac{1}{1 - i\frac{m\eta}{\hbar^2 k}}\,A \quad \text{und} \quad B = \frac{i\frac{m\eta}{\hbar^2 k}}{1 - i\frac{m\eta}{\hbar^2 k}}\,A. \tag{29}$$

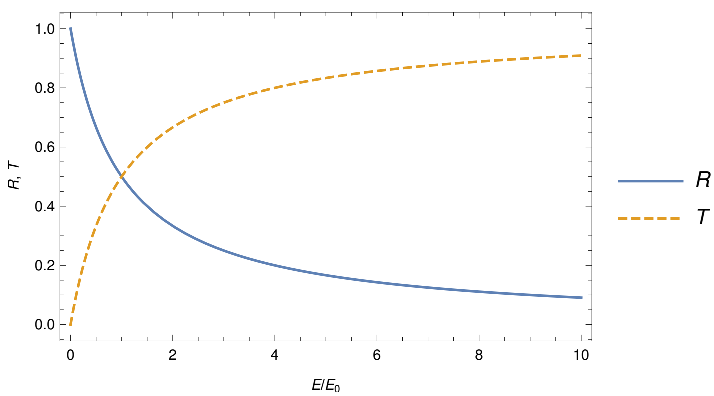
Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sind, unter Verwendung von $k^2 = 2mE/\hbar^2$,

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{2E\hbar^2}{m\eta^2}} \tag{30}$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{m\eta^2}{2E\hbar^2}}. \tag{31}$$

Wir finden also keine Oszillationen. Probe:

$$R + T = \frac{1 + \frac{m\eta^2}{2E\hbar^2} + 1 + \frac{2E\hbar^2}{m\eta^2}}{\left(1 + \frac{2E\hbar^2}{m\eta^2}\right)\left(1 + \frac{m\eta^2}{2E\hbar^2}\right)} = \frac{2 + \frac{m\eta^2}{2E\hbar^2} + \frac{2E\hbar^2}{m\eta^2}}{2 + \frac{m\eta^2}{2E\hbar^2} + \frac{2E\hbar^2}{m\eta^2}} = 1. \tag{32}$$



(c) Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & \text{für } x < 0 \\ Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \tag{33}$$

mit $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$. Beschränkte Lösungen für $x \to \pm\infty$ erfordern $A = 0$ und $G = 0$. $\psi(x)$ ist stetig bei $x = 0$, also $F = B$. Es folgt

$$\psi(x) = Be^{-\kappa|x|} \tag{34}$$

Für die Ableitung folgt aus Teil (a)

$$-2B\kappa = -\frac{2m\eta}{\hbar^2}\,B. \tag{35}$$

Es folgt für die Energie

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\eta^2}{2\hbar^2}. \tag{36}$$

Es gibt also genau einen gebundenen Zustand.

Aufgabe 5:

(a) Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\,\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\,\psi_n(x)\,\exp\left(-i\,\frac{n^2\pi^2\hbar}{2mL^2}\,t\right). \tag{37}$$

Mit der gegebenen Wiederkehrzeit T ist

$$\frac{n^2\pi^2\hbar}{2mL^2}\,T = \frac{n^2\pi^2\hbar}{2mL^2}\,\frac{4mL^2}{\pi\hbar} = 2\pi n^2. \tag{38}$$

Es folgt

$$\exp\left(-i\,\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,(t+T)\right) = \exp\left(-i\,\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,t\right) e^{-i\,2\pi n^2} \tag{39}$$

und $e^{-i\,2\pi n^2} = 1$, weil n^2 eine ganze Zahl ist. Es folgt $\psi(t+T) = \psi(T)$. Für das Ergebnis ist notwendig, dass alle Eigenenergien (Eigenfrequenzen) ganzzahlige Vielfache der Grundzustandsenergie (Grundfrequenz) sind.

(b) Die klassische Wiederkehrzeit ist $T_c = 2L/v$. Die Geschwindigkeit erhalten wir aus

$$E = \frac{1}{2}\,mv^2 \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2E}{m}}. \tag{40}$$

Es folgt

$$T_c = L\,\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{41}$$

(c) Die beiden Wiederkehrzeiten sind gleich, wenn

$$\frac{4mL^2}{\pi\hbar} = L\,\sqrt{\frac{2m}{E}}, \tag{42}$$

also für

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}. \tag{43}$$

Beachte, dass die Grundzustandsenergie für den Kasten

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \tag{44}$$

beträgt. Die Energie E, bei der klassische und quantenmechanische Wiederkehrzeit übereinstimmen, liegt also unterhalb der Grundzustandsenergie und damit außerhalb des Spektrums. Da T_c mit wachsender Energie abnimmt, folgt, dass die reale (d.h. quantenmechanische) Wiederkehrzeit immer länger ist als das klassische Ergebnis.

Die klassische Wiederkehrzeit bei den quantenmechanischen Eigenenergien ist

$$T_c(E_n) = L\,\sqrt{\frac{2m}{E_n}} = \frac{2mL^2}{\pi\hbar}\,\frac{1}{n} = \frac{4mL^2}{h}\,\frac{1}{n} \tag{45}$$

im Vergleich zu den "Eigenperioden" der quantenmechanischen Bewegungen,

$$T_n = \frac{h}{E_n} = h\,\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} = \frac{8mL^2}{h}\,\frac{1}{n^2}. \tag{46}$$

Die quantenmechanische Wiederkehrzeit ist laut Aufgabe

$$T = \frac{4mL^2}{\pi\hbar} = \frac{8mL^2}{h} = T_1. \tag{47}$$