Universität Zürich[UZH]

Quantenmechanik I
Musterlösung 3.

HS 2019
Prof. Thomas Gehrmann

Übung 1. *[Ehrenfest-Theorem]*

In der Vorlesung wurde für den Erwartungswert eines hermiteschen Operators A die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \tag{1}$$

hergeleitet, wobei $H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$ der Hamilton-Operator mit einem Potential V ist. In dieser Aufgabe werden wir zeigen, dass der Erwartungswert des Ortsoperators die klassische Newton'sche Bewegungsgleichung erfüllt.

a) *Aus dem Resultat der Aufgabe 3 von Serie 2 (oder direkt), zeige*

$$[\vec{x}, \vec{p}^n] = ni\hbar\vec{p}^{n-1} \tag{2}$$
$$[\vec{p}, f(\vec{x})] = -i\hbar\vec{\nabla} f(\vec{x}) \tag{3}$$

für eine natürliche Zahl n und eine differenzierbare Funktion f.

b) *Aus Gleichung (1) und den Resultaten von Teilaufgabe a), zeige*

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{x}\rangle = \left\langle \vec{F}(\vec{x})\right\rangle = -\left\langle \vec{\nabla} V(\vec{x})\right\rangle, \tag{4}$$

wobei $\vec{F}(\vec{x})$ die Kraft aus dem Potential $V(\vec{x})$ ist.

Lösung.

a) Zuerst berechnen wir die kanonischen Kommutationsrelationen für Orts- und Impulsoperator. Für zwei Komponenten i und j gilt mit einer Testfunktion $\psi(\vec{x})$:

$$\begin{aligned}[x_i, p_j]\psi &= x_i(-i\hbar)\partial_j\psi + i\hbar\partial_j(x_i\psi) && \text{(L.1)}\\ &= \cancel{-i\hbar x_i\partial_j\psi + i\hbar x_i\partial_j\psi} + i\hbar(\partial_j x_i)\psi && \text{(L.2)}\\ &= i\hbar\delta_{ij}\psi. && \text{(L.3)}\end{aligned}$$

Somit gilt $[x_i, p_i] = i\hbar$ und analog für Vektoren $[\vec{x}, \vec{p}] = i\hbar$.

Für die erste Identität kann man rekursiv mit dem Resultat aus Ausgabe 3 von Serie 2 vorgehen:

$$\begin{aligned}[\vec{x}, \vec{p}^n] &= \vec{p}[\vec{x}, \vec{p}^{n-1}] + [\vec{x}, \vec{p}]\vec{p}^{n-1}\\ &= \vec{p}^2[\vec{x}, \vec{p}^{n-2}] + \vec{p}[\vec{x}, \vec{p}]\vec{p}^{n-2} + i\hbar\vec{p}^{n-1}\\ &= \vec{p}^2[\vec{x}, \vec{p}^{n-2}] + 2i\hbar\vec{p}^{n-1}\\ &= \vec{p}^3[\vec{x}, \vec{p}^{n-3}] + 3i\hbar\vec{p}^{n-1}\\ &\overset{\dots}{=} \vec{p}^{n-1}[\vec{x}, \vec{p}] + (n-1)i\hbar\vec{p}^{n-1}\\ &= ni\hbar\vec{p}^{n-1}\end{aligned}$$

Die zweite Identität kann mit der Ortsdarstellung der Operatoren direkt bewiesen werden:

$$\begin{aligned}[\vec{p}, f(\vec{x})]\psi(\vec{x}) &= (-i\hbar)\vec{\nabla}(f(\vec{x})\psi(\vec{x})) + i\hbar f(\vec{x})\vec{\nabla}\psi(\vec{x})\\ &= -i\hbar\vec{\nabla} f(\vec{x})\psi(\vec{x}) - \cancel{i\hbar\psi(\vec{x})\vec{\nabla} f(\vec{x}) + i\hbar f(\vec{x})\vec{\nabla}\psi(\vec{x})}\\ &= -i\hbar\vec{\nabla} f(\vec{x})\psi(\vec{x}).\end{aligned}$$

Somit $[\vec{p}, f(\vec{x})] = -i\hbar\vec{\nabla} f(\vec{x})$.

b) Unter Verwendung des Ehrefest'schen Theorems gilt für die Ableitung des Orts- bzw. Impulsoperators:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{x}, H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\vec{x}, \frac{\vec{p}^2}{2m}]\right\rangle$$
$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{p}, H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{p}, V(\vec{x})]\rangle$$

Die beiden Kommutatoren haben wir in der vorigen Teilaufgabe schon berechnet (mit $n = 2$ und $f = V$):

$$[\vec{x}, \frac{\vec{p}^2}{2m}] = \frac{i\hbar}{m}\vec{p}$$
$$[\vec{p}, V(\vec{x})] = -i\hbar\vec{\nabla} V(\vec{x})$$

Daraus folgt:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = -\left\langle\vec{\nabla} V(\vec{x})\right\rangle$$
$$\Longrightarrow \qquad m\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{x}\rangle = -\left\langle\vec{\nabla} V(\vec{x})\right\rangle = \left\langle\vec{F}(\vec{x})\right\rangle$$

Übung 2. *[Zeitentwicklung der Wellenfunktion]*

Seien $\psi_a(x)$ und $\psi_b(x)$ zwei orthonormale Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für ein gegebenes Potential mit den Energieeigenwerten E_a und E_b. Nimm an, dass das System zum Zeitpunkt $t = 0$ sich im Zustand

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(x) + \psi_b(x))$$

befindet. Finde die Wahrscheinlichkeitsdichte zu einem späteren Zeitpunkt t. Welche Grössenordnung hat die Oszillationszeit des Interferenzterms, falls die Energien E_a und E_b zwei Energieniveaus in der Lyman-Serie des Wasserstoffatoms entsprechen ?

Lösung. Die Zeitentwicklung der einzelnen Wellenfunktionen ist gegeben durch:

$$\psi_i(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}\psi_i(x).$$

Da wir gebundene Zustände betrachten, können die Wellenfunktionen reell gewählt werden (die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist eine reelle DGL). Für die Wahrscheinlichkeitsdichte folgt dann:

$$\begin{aligned} w(x, t) =& |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2}\left(\psi_a(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_a t} + \psi_b(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_b t}\right)\left(\psi_a(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t} + \psi_b(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_b t}\right) \\ =& \frac{1}{2}\left(|\psi_a(x)|^2 + |\psi_b(x)|^2 + 2\psi_a(x)\psi_b(x)\cos\left(\frac{(E_a - E_b)t}{\hbar}\right)\right). \end{aligned}$$

Der Interferenzterm verschwindet für Zeiten $t = \frac{(2k+1)\hbar\pi}{2(E_a - E_b)}$, mit $k \in \mathbb{N}$. Die Oszillationszeit ist $T = \frac{2\pi\hbar}{E_a - E_b}$ und für $E_a - E_b \propto \hbar\omega$ folgt $T \propto 1/\omega$. Für Licht im Ultraviolettspektrum (Lyman-Serie) ist das $10^{-14} - 10^{-16}\text{s} = 0.1 - 10\text{fs}$,

Übung 3. *[Teilchen im eindimensionalen Kastenpotential]*

Gegeben sei ein Teilchen der Masse m in einem Kastenpotential der Form

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad |x| < a \\ 0 & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} \tag{5}$$

mit $V_0 > 0$. Gesucht sind die Energien und Wellenfunktionen der gebundenen Zustände.

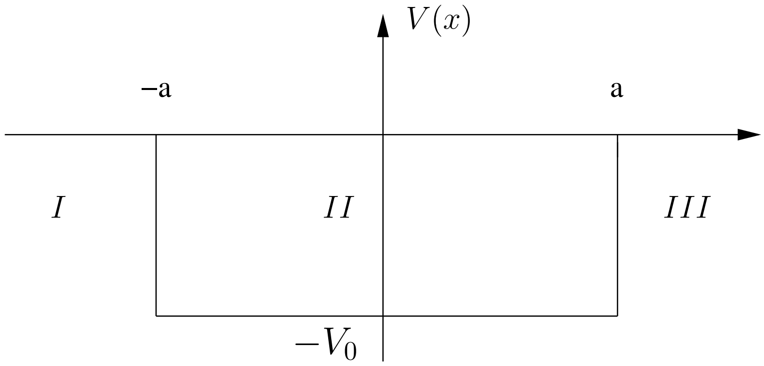
a) *Berechne die Eigenfunktion innerhalb und ausserhalb des Kastens zunächst getrennt, und setze dann diese Lösung bei $x = \pm a$ stetig differenzierbar aneinander.*
Unterscheide die Lösungen nach ihrer Parität.

b) *Man erhält eine transzendente Gleichung für die Energie E in Abhängigkeit von der Potentialtiefe V_0. Löse diese Gleichung graphisch. Wie viele gebundenen Zustände gibt es, und welche Energie haben sie wenn $V_0 \gg E$?*

c) *Was passiert im Fall $a \to 0$ mit $aV_0 = \alpha = const$?*

Lösung.

a) Suche nach gebundenen Zuständen, d.h. $-V_0 < E < 0$.
Ansatz für die Wellenfunktionen:



$$\psi_I(x) = B_1 e^{k'x} + B_1' e^{-k'x} \tag{L.4}$$
$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} \tag{L.5}$$
$$\psi_{III}(x) = B_3 e^{k'x} + B_3' e^{-k'x} \tag{L.6}$$

Da $|\psi|^2$ im Bereich I beschränkt sein muss, gilt: $B_1' = 0$. Wegen der gleichen Argumentation gilt $B_3 = 0$ im Bereich III. Die Schrödinger-gleichung lautet

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi(x) = 0. \tag{L.7}$$

Einsetzen ergibt:

$$\psi_I : \quad (V = 0) \quad k'^2 B_1 e^{-k'x} + \frac{2m}{\hbar^2} E B_1 e^{-k'x} = 0 \quad \Rightarrow \quad k' = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E} \tag{L.8}$$

$$\psi_{II} : \quad -k^2 \psi_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_{II}(x) = 0 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)} \tag{L.9}$$

Um die Lösungen stetig differenzierbar aneinanderzusetzen, muss gelten:

$$\psi_1(-a) \stackrel{!}{=} \psi_{II}(-a),\ \psi_{II}(a) \stackrel{!}{=} \psi_{III}(a) \tag{L.10}$$

$$\psi'_I(-a) \stackrel{!}{=} \psi'_{II}(-a),\ \psi'_{II}(a) \stackrel{!}{=} \psi'_{III}(a) \tag{L.11}$$

Die Grenzbedingungen bei $x = -a$ ergeben

$$B_1 = e^{k'a}\left(A_2 e^{-ika} + A'_2 e^{ika}\right) \tag{L.12}$$

$$B_1 = \frac{ik}{k'} e^{k'a}\left(A_2 e^{-ika} - A'_2 e^{ika}\right) \tag{L.13}$$

$$\Longrightarrow A_2 = A'_2 e^{2ika}\frac{k'+ik}{k'-ik} \tag{L.14}$$

Die Bedingungen an der Stelle $x = a$ ergeben

$$B'_3 = e^{k'a}\left(A_2 e^{ika} + A'_2 e^{-ika}\right) \tag{L.15}$$

$$B'_3 = -\frac{ik}{k'} e^{k'a}\left(A_2 e^{ika} - A'_2 e^{-ika}\right) \tag{L.16}$$

$$\Longrightarrow A_2 = A'_2 e^{-2ika}\frac{k'-ik}{k'+ik} \tag{L.17}$$

Daraus folgt:

$$\left(\frac{k'-ik}{k'+ik}\right)^2 = e^{4ika} \tag{L.18}$$

Es sind somit also zwei Fälle möglich. Einerseits

$$\frac{k'-ik}{k'+ik} = -e^{2ika} \tag{L.19}$$

Setzt man diesen Zusammenhang in den Ansatz für die Wellenfunktionen ein, findet man, dass $B'_3 = -B_1$ und $A_2 = -A'_2$. Damit ist $\psi(-x) = -\psi(x)$, die Wellenfunktion ist also gerade. Gleichung (L.19) lässt sich in die Form $\frac{k'}{k} = \tan(ka)$ umschreiben:

$$k' - ik = -e^{2ika}(k' + ik) \tag{L.20}$$

$$\Longleftrightarrow k'(1 + e^{2ika}) = -ik(e^{2ika} - 1) \tag{L.21}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{k'}{k} = -i\left(\frac{e^{2ika}-1}{e^{2ika}+1}\right) \tag{L.22}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{k'}{k} = -i^2\frac{e^{ika}}{e^{ika}}\left(\frac{\frac{e^{ika}-e^{-ika}}{2i}}{\frac{e^{ika}+e^{-ika}}{2}}\right) \tag{L.23}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{k'}{k} = \tan(ka). \tag{L.24}$$

Wenn man nun $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + k'^2}$ definiert, erhält man

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{2ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{2ka}{2}\right) = \frac{k^2 + k'^2}{k^2} = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \tag{L.25}$$

Die 1. Möglichkeit kann man also durch die zwei Gleichungen

$$|\cos(ka)| = \frac{k}{k_0} \tag{L.26}$$

$$\tan(ka) > 0 \tag{L.27}$$

beschreiben. Die 2. Möglichkeit ist

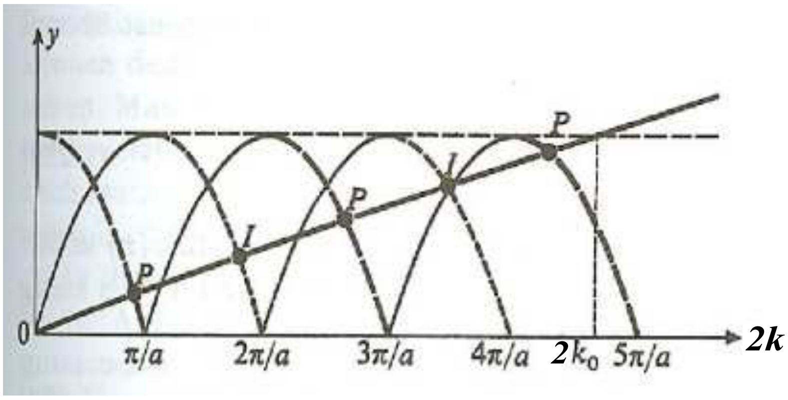
$$\frac{k' - ik}{k' + ik} = e^{2ika} \tag{L.28}$$

Eine analoge Vorgehensweise wie im 1. Fall liefert das Gleichungssystem

$$|\sin(ka)| = \frac{k}{k_0} \tag{L.29}$$

$$\tan(ka) < 0. \tag{L.30}$$

Durch Einsetzen von Gleichung (L.28) in den Ansatz für die Wellenfunktion sieht man, dass $A_2 = A_2'$ und $B_3' = B_1$ und die Wellenfunktion gerade ist, $\psi(-x) = \psi(x)$.



b) Die Funktion k/k_0 trifft die horizontale Konstante 1 gerade bei k_0. Die Anzahl Lösungen wird dann von der Anzahl Schnittpunkte von k/k_0 und $|\cos(ka)|$ oder $|\sin(ka)|$ zwischen 0 und k_0 gegeben. Man kann dem Schaubild nun ablesen, dass die Anzahl der gebundenen Zustände für grosse k_0 die nächste natürliche Zahl ist, die grösser als $\frac{k_0 a}{\pi}$ ist, denn wegen der Bedingung $\tan(ka) < 0$ oder $\tan(ka) > 0$ sind nur die Hälfte der Schnittpunkte wahre Lösungen. Wenn k_0 sehr gross ist, treten die Schnittpunkte in der Nähe von $2k\pi/2a$ (ungerade Lösungen) und $(2k+1)\pi/2a$ (gerade Lösungen) auf. Somit sind die Energien der gebundenen Zustände

$$E_n + V_0 \approx \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2m(2a)^2} \tag{L.31}$$

mit $n \in \mathbb{N}$. Diese Energien entsprechen einem unendlichen Topfpotential der Breite $2a$.

c) Was im Grenzwert $a \to 0$ passiert, lässt sich am einfachsten am Schaubild ablesen. Geht a gegen Null, wandern die Nullstellen immer weiter nach rechts auf der k-Achse. Im Grenzfall bleibt nur noch der Schnittpunkt mit der ersten Kosinus-kurve. Es gibt dann also eine gerade Lösung.

Übung 4. *[Reflektionsloses Potential]*

Betrachte das unten abgebildete eindimensionale Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 a^2}{m} \operatorname{sech}^2(ax) \tag{6}$$

mit der positiven Konstante $a > 0$.

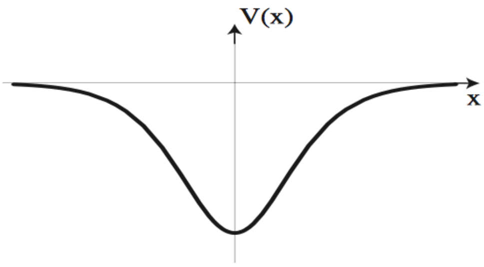


Abbildung 1: Form des Potentials für Aufgabe 4.

a) Zeige, dass der (Grund)zustand dieses Potentials mit der Wellenfunktion

$$\psi_0(x) = A\,\mathrm{sech}(ax) \tag{7}$$

beschrieben werden kann. Normiere ψ_0 und finde seine Energie.

b) Zeige, dass die Wellenfunktion

$$\psi_k(x) = A\left(\frac{ik - a\tanh(ax)}{ik + a}\right)e^{ikx} \tag{8}$$

mit $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung für beliebige energie $E > 0$ ist.

c) Berechne Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für diese Wellenfunktion in den Limiten $x \to \pm\infty$ und zeige, dass diese Lösung eine von links einfallende, reflektionslose ebene Welle beschreibt.

Lösung.

a) Die Grundzustand-Wellenfunktion muss die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung erfüllen:

$$H\psi_0 = E\psi_0 \tag{L.32}$$

mit $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$. Die Ableitungen der Wellenfunktion sind

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x} = -Aa\frac{\sinh(ax)}{\cosh^2(x)} = -Aa\,\mathrm{sech}(ax)\tanh(ax) \tag{L.33}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_0}{\mathrm{d}x^2} = -Aa^2\left(\mathrm{sech}(ax)\tanh^2(ax) + \mathrm{sech}^3(ax).\right) \tag{L.34}$$

Die linke Seite der Schrödinger-Gleichung ist somit

$$\begin{aligned}
H\psi_0 &= \frac{\hbar^2 Aa^2}{2m}\left(-\mathrm{sech}(ax)\tanh^2(ax) + \mathrm{sech}^3(ax) - 2\mathrm{sech}^3(ax)\right) && \text{(L.35)}\\
&= -\frac{\hbar^2 Aa^2}{2m}\mathrm{sech}(ax)\left(\tanh^2(ax) + \mathrm{sech}^2(ax)\right) && \text{(L.36)}\\
&= -\frac{\hbar^2 Aa^2}{2m}\mathrm{sech}(ax)\left(\frac{\sinh^2(ax) + 1}{\cosh^2(ax)}\right) && \text{(L.37)}\\
&= -\frac{\hbar^2 Aa^2}{2m}\mathrm{sech}(ax)\left(\frac{\cosh^2(ax)}{\cosh^2(ax)}\right) && \text{(L.38)}\\
&= -\frac{\hbar^2 Aa^2}{2m}\mathrm{sech}(ax) && \text{(L.39)}\\
&= -\frac{\hbar^2 a^2}{2m}\psi_0 && \text{(L.40)}
\end{aligned}$$

Die Schrödinger-Gleichung ist also mit der Energie $E = -\frac{\hbar^2 a^2}{2m}$ erfüllt. Normierung liefert

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^2(ax)\mathrm{d}x = |A|^2 \frac{1}{a} \tanh(ax)\Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{2}{a}|A|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad \Longrightarrow \quad A = \sqrt{a/2}. \tag{L.41}$$

b) Wir müssen erneut die Schrödinger-Gleichung prüfen. Die Ableitungen der Wellenfunktion sind

$$\frac{\mathrm{d}\psi_k}{\mathrm{d}x} = \frac{A}{ik+a}\left[(ik - a\tanh(ax))ik - \frac{a^2}{\cosh^2(ax)}\right] e^{ikx} \tag{L.42}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_k}{\mathrm{d}x^2} = \frac{A}{ik+a}\left[ik\left[(ik - a\tanh(ax))ik - \frac{a^2}{\cosh^2(ax)}\right] - \frac{a^2 ik}{\cosh^2(ax)} + 2a^3\frac{\tanh(ax)}{\cosh^2(ax)}\right] e^{ikx}. \tag{L.43}$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung liefert

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_k}{\mathrm{d}x^2} + V\psi_k &= -\frac{A\hbar^2}{2m(ik+a)}\left[ik\left[(ik - a\tanh(ax))ik - \cancel{\frac{a^2}{\cosh^2(ax)}}\right] - \cancel{\frac{a^2 ik}{\cosh^2(ax)}} + \right. \\
&\quad \left. + \cancel{2a^3\frac{\tanh(ax)}{\cosh^2(ax)}} + \cancel{ik\frac{2a^2}{\cosh^2(ax)}} - \cancel{2a^3\frac{\tanh(ax)}{\cosh^2(ax)}}\right] e^{ikx} && \text{(L.44)} \\
&= \frac{A\hbar^2 k^2}{2m}\left[\frac{ik - a\tanh(ax)}{ik+a}\right] e^{ikx} && \text{(L.45)} \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi_k && \text{(L.46)} \\
&= E\psi_k && \text{(L.47)}
\end{aligned}$$

mit der Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

c) Um die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion zu verstehen, betrachten wir die Lösung für die zwei Grenzfälle $x \to \pm\infty$:

$$\tanh(ax) \stackrel{x\to-\infty}{\longrightarrow} -1 \quad \Longrightarrow \quad \psi_k(x) \stackrel{x\to-\infty}{\longrightarrow} Ae^{ikx} \tag{L.48}$$

$$\tanh(ax) \stackrel{x\to+\infty}{\longrightarrow} +1 \quad \Longrightarrow \quad \psi_k(x) \stackrel{x\to+\infty}{\longrightarrow} A\left(\frac{ik-a}{ik+a}\right) e^{ikx}. \tag{L.49}$$

Die Wellenfunktion links vom Potential hat die Form einer reinen ebenen Welle (da wir keine e^{-ikx} Komponente haben) ohne reflektierten Anteil. Danach trifft sie auf das Potential, streut und wird nach rechts transmittiert, so dass sie beim grossen Abstand wieder die Form eine ebene Welle mit einer geänderten Amplitude hat. Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sind dann

$$R = 0 \tag{L.50}$$

$$T = \frac{|A|^2\left|\frac{ik-a}{ik+a}\right|^2}{|A|^2} = \frac{k^2+a^2}{k^2+a^2} = 1 \tag{L.51}$$

und das Potential ist tatsächlich reflektionslos.