

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.2

Aufgabe 11

a.)

Noch in den Anfangsjahren der Quantenmechanik gab es hin und wieder heiße Debatten zwischen den Physikern Einstein und Bohr über die philosophischen Gesichtspunkte der Quantenmechanik. Einsteins Ausspruch „Gott würfelt nicht!“ hat seine Meinung erkennbar zum Ausdruck gebracht; er konnte sich mit der Wahrscheinlichkeitsnatur der Quantenmechanik überhaupt nicht anfreunden. Im Zuge dessen dachte sich Einstein sehr ausgeklügelte Gedankenexperimente aus, um mit diesen einen inneren Widerspruch der Quantenmechanik aufzuzeigen. (Ein Gedankenexperiment ist ein im Prinzip durchführbares Experiment, das jedoch oft an die Grenzen der praktischen Durchführung stößt.) Bohr setzte sich ausgiebig mit diesen Gedankenexperimenten auseinander und schaffte es, Einsteins Beweisführungen zu widerlegen.

Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation

Die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation zwischen Impuls p und Ort x besagt, dass keine gleichzeitige Messung von p und x mit beliebiger Genauigkeit durchgeführt werden kann. Für die Unbestimmtheiten von Impuls und Orts, also Δp und Δx gilt dann:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1)$$

Dies bedeutet, dass bei sehr genauer Ortsbestimmung (also kleinem Δx) die Messung des Impulses mit einer großen Unbestimmtheit belastet ist und umgekehrt. Eine analoge Unbestimmtheitsrelation gibt es zwischen den Größen der Energie E und der Zeit t :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2)$$

Möchte man die Energie E eines physikalischen Systems sehr genau messen (so dass ΔE klein ist), so muss man lange messen (so dass Δt groß ist). Bei kurzer Messung (also kleinem Δt) ist die Energie wiederum mit großer Unbestimmtheit behaftet.

b.)

Modifiziertes Doppelspaltexperiment

Schickt man Elektronen auf einen Doppelspalt, so entsteht auf diesem ein Interferenzmuster, zuerst entgegen allem Verständnis, dass Elektronen Teilchen und keine Wellen sind. Dieses Muster wird zerstört, sofern man Messungen an den Elektronen vornimmt, wenn man also feststellen möchte, durch welchen der beiden Spalte das Elektron tatsächlich fliegt (Kollaps der Wellenfunktion). Dies ist eine Folge der quantenmechanischen Beschreibung der Elektronen durch eine Wellenfunktion (Wahrscheinlichkeitswelle).

Einstein wollte nun dieses bekannte Doppelspaltexperiment so abändern, dass vor den Doppelspalt zusätzlich ein beweglicher Einzelspalt geschoben wird. Trifft nun ein einlaufendes Elektron auf den Einzelspalt, wechselwirkt es mit diesem und wird etwas nach oben oder nach unten abgelenkt. Aufgrund von Impulserhaltung wird dann der Einzelspalt in die jeweils entgegengesetzte Richtung abgelenkt werden. Misst man die Ablenkung des Einzelspalts, so kann man also sagen, ob das Elektron durch den oberen oder durch den unteren Spalt des Doppelspalts auf den Schirm gelangt. Damit ist dessen eingeschlagener Weg bestimmbar, ohne dass man das Interferenzmuster auf dem Schirm zerstört, weil man ja keine Messung direkt am Elektron durchgeführt hat. Das Ganze würde dann nicht im Einklang mit der Quantenmechanik sein, weil man ja die Flugbahn des Elektrons feststellen könnte, ohne das Interferenzmuster zu zerstören.

Das Ganze lässt sich jedoch wie folgt auflösen. Die Impulsmessung des Einzelspalts muss sehr genau erfolgen, damit man wissen kann, welchen Weg das Elektron einschlägt. Nach der Orts-Impuls-Unbestimmtheitsrelation ist dann jedoch der Ort des Einzelspaltes mit einer starken Unsicherheit belastet. Dies wirkt sich wiederum auf die Phasendifferenz der beiden Wege aus, welche das Elektron durch den Doppelspalt nehmen kann. Damit wird das Beugungsmuster auf dem Schirm verwaschen bzw. vollständig zerstört.

Einsteins Schachtel

Einstein betrachtet eine Schachtel mit einem radioaktiven Präparat (welches γ -Strahlung, also Photonen) aussendet. Die Schachtel besitze ein Loch mit einem zeitgesteuertem Verschluss. Der Verschluss kann beliebig lange geöffnet werden, wodurch Photonen nach außen treten können. Wie lange dieser geöffnet bleibt, wird mittels einer gekoppelten Uhr gemessen. Nehmen wir an, dass der Verschluss für einen Zeitraum Δt geöffnet wird und in dieser Zeit gerade ein einziges Photon die Schachtel verlässt. Nach Einsteins Masse-Energie-Äquivalenz $E = m \cdot c^2$ entspricht die Energie des Photons der Massedifferenz der gesamten Schachtel, wenn man die vor und nach Verlassen des Photons wiegt. So kann die Energie für ein endliches Zeitintervall Δt mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden und das Produkt $\Delta E \cdot \Delta t$ wäre kleiner als $\hbar/2$.

Das Problem hierbei ist jedoch die Messung der Massendifferenz der Schachtel vor und nach dem Aus-treten des Photons. Sie könnte im Schwerfeld der Erde bestimmt werden, wenn man die Schachtel an eine Feder hängt. An der Schachtel selbst könnte ein Zeiger angebracht sein, welcher deren Position im Schwerfeld der Erde anzeigt und man könnte anhand der Position des Zeigers die Masse der Schachtel bestimmen. Man führt jedoch dann eine Messung der Position der Schachtel durch und diese ist selbst wieder mit einer Unbestimmtheit Δx behaftet, welche aus der Impuls-Orts-Unbestimmtheitsrelation folgt (Δp ist klein, weil der Zeiger der Schachtel möglichst stillstehen sollte). Diese Unsicherheit in der Bestimmung des Orts führt zu einer Unbestimmtheit bei der Massendifferenz der Schachtel und somit zu einer Unsicherheit bezüglich der Energie des Photons. Mit dieser Argumentationsführung kann man Einstein also widerlegen. Man kann die Zeit und die Energie durch dieses Experiment nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmen.

c.)

Die Kopenhagener Deutung wurde von den Physikern Niels Bohr und Werner Heisenberg vertreten. Diese Interpretation wurde von ihnen entwickelt, während sie in Kopenhagen zusammenarbeiteten.

Die Kopenhagener Deutung spricht für den Wahrscheinlichkeitscharakter der Quantenmechanik in dem Sinne, dass sie Naturvorgänge als nicht-bestimmbar ansieht (Nicht-Determinismus der Quantenmechanik). Sie sieht experimentelle Messungen als die einzige Realität an, während beispielsweise der Wellenfunktion keinerlei physikalische Bedeutung zukommt, sondern nur als mathematische Hilfsgröße dient.

Aufgabe 14

Zuerst eine kleine Zusammenfassung der notwendigen Eigenschaften der Wellenfunktion ψ :

1.) Eindeutigkeit:

Die Wellenfunktion $\psi(x)$ darf am selben Ort nicht unterschiedliche Werte annehmen. Dann wäre auch das Betragsquadrat am selben Ort nicht eindeutig und physikalisch kann es nicht sein, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte an einem Punkt im Raum unterschiedliche Werte annimmt.

2.) Quadratintegrabilität:

Das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx, \quad (3)$$

muss existieren, darf also nicht unendlich sein. Dies hat damit zu tun, dass man die Wellenfunktion auf den Wert 1 normieren können muss.

3.) Stetigkeit: Die Wellenfunktion darf keinen Sprung machen. Das würde den Grundsatz der Erhaltung der Wahrscheinlichkeit (Unitarität) verletzen.

4.) Stetige Differenzierbarkeit: Die Wellenfunktion darf keinen Knick aufweisen; deren Ableitung muss also stetig sein.

Bemerkung: Die Bedingungen (1), (2) und (3) sind grundlegend und unbedingt zu erfüllen. Bedingung (4) kann unter bestimmten Umständen gelockert werden, beispielsweise wenn das Potential $V(x)$ an bestimmten Stellen einen unendlich großen Wert annimmt (wie das in dieser Aufgabe der Fall ist).

Anmerkung: Es gibt sogar sehr wenige Ausnahmefälle, in denen Bedingung (2) und (3) nicht erfüllt sind ((2): bei einer ebenen Welle $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$, (3): Projektion einer zur Mittelsenkrechten achsensymmetrischen Wellenfunktion im unendlichen Potentialtopf auf die linke bzw. rechte Hälfte bei einer Ortsmessung). Diese Ausnahmefälle sind jedoch theoretischer Natur und kommen so in der Praxis nicht vor. Das Ganze dient nur zur Information, lasst euch dadurch nicht verwirren. Für euch ist es ausreichend, wenn ihr die Bedingungen (1) bis (4) verstanden habt und anwenden könnt.

a.)

Es ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$E\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x), \tag{4}$$

für das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < a \\ \infty & \text{für } x \leq 0 \text{ und } x \geq a \end{cases}, \tag{5}$$

zu erfüllen. Dabei handelt es sich um das Eigenwertproblem zum Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \tag{6}$$

wobei die Energie E die Eigenwerte und die Wellenfunktion $\psi(x)$ für die Eigenfunktionen steht. Zur Lösung der Schrödingergleichung müssen wir zwischen den beiden charakteristischen Bereichen des Potentials unterscheiden. Im Bereich (1) verschwindet das Potential und die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}. \tag{7}$$

Dies ist eine Differentialgleichung 2.Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Deren allgemeine Lösung ist aus der Mathematikvorlesung bekannt und gegeben durch eine Linearkombination von Sinus- und Kosinusfunktion:

$$\psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \tag{8}$$

Äquivalent dazu ist die Darstellung mit komplexen Exponentialfunktionen

$$\psi_1(x) = C \exp(jkx) + D \exp(-jkx), \tag{9}$$

wir werden jedoch die Form (8) verwenden. Dabei sind A , B und k zunächst noch unbestimmte Konstanten. Im Bereich (2) besitzt das Potential einen unendlich hohen Wert. Ein Elektron kann sich deshalb hier nicht aufhalten, womit die Wahrscheinlichkeit und auch die Wellenfunktion verschwinden müssen: $\psi_2(x) = 0$. Aus der Forderung, dass die Wellenfunktion stetig sein muss, folgen die Randbedingungen $\psi_1(0) = \psi_1(a) \stackrel{!}{=} 0$. Zu der ersten Randbedingung:

$$\psi_1(0) = B \cos(k \cdot 0) = B \stackrel{!}{=} 0, \tag{10}$$

also muss die Konstante B verschwinden. Werten wir die zweite Randbedingung aus:

$$\psi_1(a) = A \sin(ka) \stackrel{!}{=} 0, \tag{11}$$

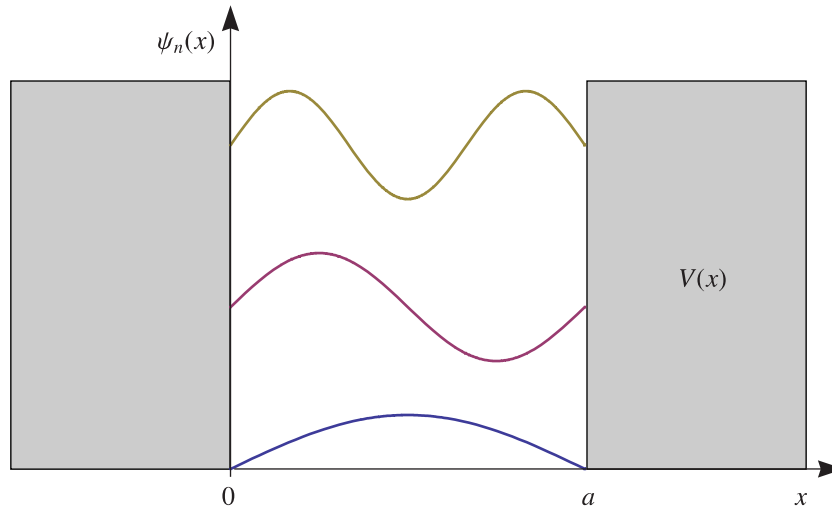
was auf den ersten Blick mit $A = 0$ erfüllt werden kann. Dann wäre jedoch die Wellenfunktion für alle x gleich Null. Diese Lösung ist zwar mathematisch richtig, aber physikalisch vollkommen uninteressant, entspricht sie nämlich dem leeren Potentialtopf ohne Teilchen. Das ist jedoch kein Problem, weil wir schließlich noch die Konstante k zur Verfügung haben. Wir können ausnutzen, dass der Sinus für ganzzahlige Vielfache von π verschwindet und dies stellt eine Bedingung an k :

$$ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{12}$$

Die Lösung der Schrödingergleichung für den unendlich hohen Potentialtopf lautet damit:

$$\boxed{\psi(x) = \begin{cases} A \sin(n\pi x/a) & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{für } x \leq 0 \text{ und } x \geq a \end{cases}, \quad n \in \mathbb{Z},} \tag{13}$$

mit einer freien Konstanten A .



Zur Bestimmung der Energie setzen wir die erhaltene Lösung in die Schrödingergleichung ein. Zweimaliges Ableiten der Sinusfunktion ergibt dann:

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \psi(x), \quad (14)$$

also gilt:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2. \quad (15)$$

Die Energie ist im Gegensatz zu physikalischen Problemen der klassischen Mechanik und Elektrodynamik nicht kontinuierlich, sondern nimmt diskrete Werte an (ganze Zahl n). Man spricht von einer Quantelung der Energie oder verschiedenen Energieniveaus. Der Grundzustand ist der mit der niedrigsten Energie $E \neq 0$ (hier gegeben durch $n = 1$). Bei den nächst höheren Energien spricht man von angeregten Zuständen. Der erste angeregte Zustand ist der mit $n = 2$:

$$E_2 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{ma}. \quad (16)$$

b.)

Um Wahrscheinlichkeiten ausrechnen zu können, müssen wir die Wellenfunktion zuerst auf 1 normieren. Dazu dient die freie Konstante A , die uns noch zur Verfügung steht:

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx. \quad (17)$$

Zur Berechnung des Integrals formen wir den Integranden um. Unter Verwendung von

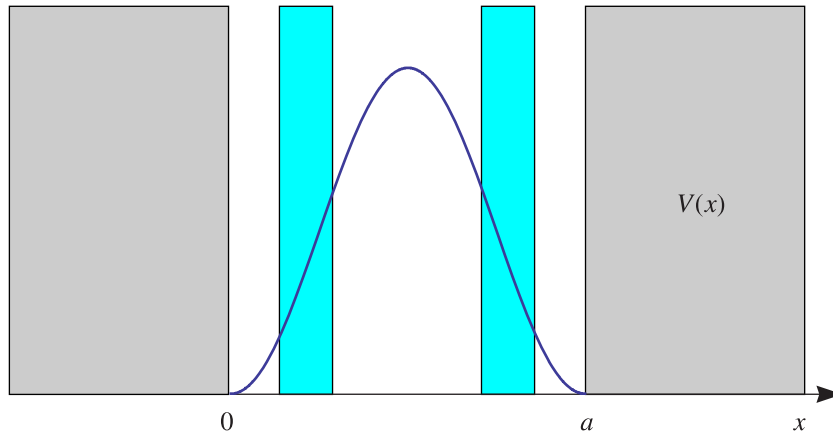
$$\cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x, \quad \cos^2 x + \sin^2 x = 1, \quad (18)$$

ergibt sich:

$$\cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x = \cos^2 x + \sin^2 x - 2\sin^2 x = 1 - 2\sin^2 x \Leftrightarrow \sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos(2x)), \quad (19)$$

und damit:

$$1 \stackrel{!}{=} \frac{A^2}{2} \cdot \left[x - \frac{a}{4\pi} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \right]_0^a = \frac{A^2 a}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (20)$$

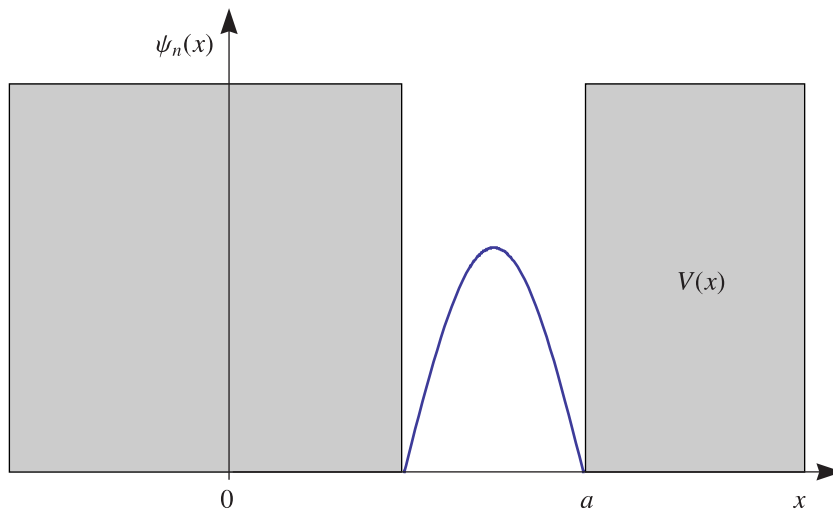


Damit ist die Wellenfunktion normiert und wir können die Wahrscheinlichkeit berechnen, das Teilchen im Intervall $[a/6, 2a/6]$ oder im Intervall $[4a/6, 5a/6]$ zu finden. Aufgrund der Symmetrie der Wellenfunktion in Bezug auf die Mittelsenkrechte des Potentialtopfes sind beide Wahrscheinlichkeiten gleich groß. Es reicht also aus, eine zu berechnen und diese zu verdoppeln:

$$\varrho = 2 \int_{a/6}^{2a/6} |\psi(x)|^2 dx = \frac{4}{a} \int_{a/6}^{2a/6} \sin^2 \left(\frac{4\pi x}{a} \right) dx = \frac{2}{a} \left[x - \frac{a}{4\pi} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right]_{a/6}^{2a/6} = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2} \approx 0,55. \quad (21)$$

c.)

Das Einschleiben der undurchdringlichen Potentialwand sorgt im Wesentlichen dafür, dass der Potentialtopf halbiert wird. Das Elektron kann sich nur noch in der rechten Hälfte des ursprünglichen Topfes aufhalten und die Wellenfunktion muss in der linken Hälfte verschwinden.



Aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion, muss diese bei $x = a/2$ auf den Wert Null abfallen. Für die rechte Seite müssen wir die Wellenfunktion aus Aufgabenteil (a) nehmen und die Breite a des Potentialtopfes durch die neue Breite $a/2$ ersetzen. Damit gilt:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x < a/2 \\ C \sin(2\pi x/a) & \text{für } a/2 \leq x < a \end{cases}. \quad (22)$$

Die Normierungskonstante C muss neu bestimmt werden:

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = C^2 \int_{a/2}^a \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx = \frac{C^2}{2} \left[x - \frac{a}{4\pi} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right]_{a/2}^a = \frac{C^2 a}{4} \Rightarrow C = \sqrt{\frac{4}{a}}. \quad (23)$$

Damit gilt:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x < a/2 \\ \sqrt{4/a} \sin(2\pi x/a) & \text{für } a/2 \leq x < a \end{cases}. \quad (24)$$

Aufgabe 15

a.)

Man soll recherchieren, wie die Energieeigenwerte W_n und die Eigenfunktionen ψ_n des quantenmechanischen eindimensionalen harmonischen Oszillators aussehen, welcher der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$W_n \psi_n(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_n(x), \quad (25)$$

genügen. m ist die Masse und ω die Eigenfrequenz des harmonischen Oszillators. Auf www.wikipedia.de findet man

$$\psi_n(x) = C_n H_n(bx) \exp\left(-\frac{1}{2} b^2 x^2\right), \quad C_n = \frac{\sqrt{b}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}, \quad b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (26)$$

Hier ist C_n der Normierungsfaktor und H_n sind die sogenannten Hermiteschen Polynome, welche über die Formel

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2), \quad (27)$$

berechnet werden können. Ein paar Beispiele:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 1, \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x, \quad \dots \quad (28)$$

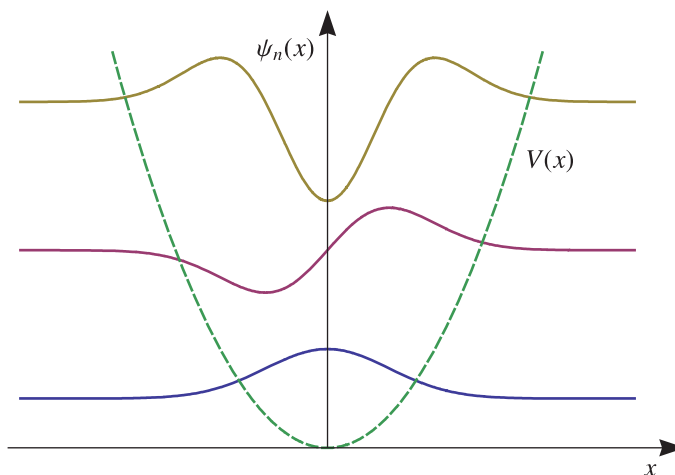
Die Exponentialfunktion mit negativen Argument in der Eigenfunktion $\psi_n(x)$ sorgt dafür, dass $\psi_n(x)$ im Unendlichen genügend schnell abfällt, so dass die Quadratintegrierbarkeit gewährleistet ist!

Wir finden auch die zugehörigen Energieeigenwerte:

$$W_n(x) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (29)$$

Wie beim eindimensionalen unendlichen Potentialtopf sind wiederum keine kontinuierlichen Energien möglich, sondern nur bestimmte diskrete Werte, gekennzeichnet durch $n \in \mathbb{Z}$.

Zum Schluss wollen wir uns die Eigenfunktionen noch graphisch anschauen:



b.)

Zu den Gemeinsamkeiten: Es gibt sowohl beim Potentialtopf als auch beim harmonischen Oszillator gerade und ungerade Eigenfunktionen (also solche, welche achsensymmetrisch zur y -Achse oder punktsymmetrisch zum Ursprung sind). Beide quantenmechanische Systeme weisen diskrete Energieniveaus auf; die Energien sind also gequantelt.

Die Unterschiede stellt man am besten in einer Tabelle gegenüber:

	Unendlicher Potentialtopf	Harmonischer Oszillator
Eigenfunktionen $\psi_n(x)$	<p>Diese fallen an den Stellen, wo das Potential beginnt, auf Null ab. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen im Potential ist daher gleich Null.</p> <p>Die Eigenfunktionen setzen sich ausschließlich aus trigonometrischen Funktionen zusammen. Die Quadratintegrabilität ist dadurch gewährleistet, dass die Eigenfunktion nur innerhalb des Potentialtopfes ungleich Null ist.</p>	<p>Es gibt eine gewisse nichtverschwindende Eindringtiefe der Wellenfunktion in das quadratische Potential. Somit gibt es eine gewisse Wahrscheinlichkeit, Teilchen innerhalb des Potentials anzutreffen.</p> <p>Hier setzt sich die Wellenfunktion aus einem Polynom und einer abfallenden Exponentialfunktion zusammen. Die Exponentialfunktion sorgt dafür, dass $\psi_n(x)$ quadratintegrabel ist.</p>
Eigenwerte W_n	<p>Der niedrigste Eigenwert ist $W_0 = 0$. Diese Lösung ist jedoch physikalisch uninteressant, entspricht sie nämlich einem leeren Potentialtopf.</p> <p>Die W_n hängen quadratisch von n ab, womit die Abständen zwischen verschiedenen Eigenwerten zunehmen.</p>	<p>Hier ist die niedrigste Energie $W_0 = 1/2\hbar\omega \neq 0$. Man spricht von der Nullpunktsenergie des harmonischen Oszillators.</p> <p>Die Abstände zwischen verschiedenen Eigenwerten ist gleich; diese sind also äquidistant.</p>

c.)

Dass

$$\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right), \quad \psi_1(x) = 2C_1x \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right), \quad b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad (30)$$

die Schrödingergleichung tatsächlich lösen, zeigen wir durch Einsetzen. Wir berechnen zunächst die zweiten Ortsableitungen:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2} &= C_0 \frac{d}{dx} \left[-b^2x \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) \right] = \\ &= -C_0b^2 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) + C_0b^4x^2 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) = (-b^2 + b^4x^2)\psi_0(x). \end{aligned} \quad (31)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi_0(x) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi_0(x) = \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \psi_0(x) = W_0\psi_0(x). \quad \checkmark \end{aligned} \quad (32)$$

Für $\psi_1(x)$ gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} &= C_1 \frac{d}{dx} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) - b^2x^2 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) \right] = \\ &= C_1 \left[-b^2x \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) - 2b^2x \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) + b^4x^3 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right) \right] = \\ &= (-3b^2 + b^4x^2)\psi_1(x), \end{aligned} \quad (33)$$

und damit:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_1(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi_1(x) = \left(\frac{3\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi_1(x) = \\ &= \frac{3}{2}\hbar\omega\psi_1(x) = W_1\psi_1(x). \quad \checkmark \end{aligned} \quad (34)$$

d.)

Zur quantenmechanischen Beschreibung von experimentell beobachtbaren Größen (wie beispielsweise der Energie oder des Drehimpulses) dienen Operatoren; beobachtbare Größen bezeichnet man als Observablen. Ganz allgemein ist der Erwartungswert eines Operators \mathcal{O} in der Quantenmechanik definiert über:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \mathcal{O}(x) \psi(x) dx. \quad (35)$$

Dies entspricht der Berechnung des Erwartungswertes im sogenannten Ortsraum, weil der Operator und die Wellenfunktion ψ in Abhängigkeit von der Ortsvariablen x gegeben ist und die Integration über x durchgeführt wird. Es gibt jedoch eine ganz analoge Beschreibung des Ganzen im sogenannten Impulsraum, bei der alle Operatoren vom Impuls p abhängen und über diesen integriert wird.

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\mathcal{O}}(p) \psi(p) dp. \quad (36)$$

Hier ist $\tilde{\psi}(p)$ die Wellenfunktion und $\tilde{\mathcal{O}}(p)$ der Operator im Impulsraum. Es besteht nun die Frage, wie man vom Orts- zum Impulsraum gelangt. Dies geschieht über die altbekannte Fouriertransformation. Bekannt ist ja, dass beispielsweise die Fouriertransformation einer Schallwelle, die sich entlang des Ortes x ausbreitet, das Frequenzspektrum (und indirekt damit Wellenlängen λ , Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ und damit Impulse $p = \hbar k$) liefert. In der Musterlösung wird der Erwartungswert der kinetischen Energie im Ortsraum berechnet. Dazu wird der klassische Ausdruck für die kinetische Energie

$$W_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}, \quad (37)$$

in einen quantenmechanischen Operator übersetzt. Im Ortsraum lautet dieses Übersetzungsvorschrift

$$p \mapsto \hat{p} = -i\hbar d/dx \Rightarrow W_{\text{kin}} \mapsto \widehat{W}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (38)$$

Jetzt kann der Operator nach (35) berechnet werden. Die Rechnung findet sich in der Musterlösung und soll hier nicht mehr wiederholt werden ;-). Statt dessen führen wir alles im Impulsraum durch mit der Übersetzungsvorschrift

$$p \mapsto \hat{p} = p \Rightarrow W_{\text{kin}} \mapsto \widehat{W}_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}. \quad (39)$$

Wir haben somit erst einmal keine Ableitungen zu berechnen! Der Nachteil ist jetzt jedoch, dass man die Fouriertransformation der Wellenfunktion vom Orts- in den Impulsraum bestimmen muss. Da verwenden wir doch aber einfach die Ergebnisse aus Aufgabe 8 zur Fouriertransformation einer Gauß-Funktion $f(x) = \exp(-ax^2)$:-). Diese lautet:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \exp\left(-\frac{k^2}{4a}\right). \quad (40)$$

Die Fouriertransformation einer Gaußfunktion ist also wieder eine Gaußfunktion. Angewendet auf unsere Wellenfunktion $\psi_0(x)$, welche den Grundzustand beschreibt

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{b}}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}b^2 x^2\right), \quad (41)$$

ergibt sich:

$$\tilde{\psi}_0(k) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{b}} \exp\left(-\frac{1}{2b^2}k^2\right). \quad (42)$$

Damit folgt:

$$\langle W_{\text{kin}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}_0(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}_0(k) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\pi}b} \int_{-\infty}^{+\infty} dk k^2 \exp\left(-\frac{k^2}{b^2}\right). \quad (43)$$

Um dieses Integral zu lösen, gibt es einen coolen Trick, nämlich die Parameterdifferentiation. Dazu benennen wir $1/b^2$ in a um und können folgendes machen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk k^2 \exp(-ak^2) = -\frac{d}{da} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(-ak^2) = -\frac{d}{da} \left(\sqrt{\frac{\pi}{a}} \right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{a^{\frac{3}{2}}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} b^3. \quad (44)$$

Damit gilt dann letztendlich:

$$\langle W_{\text{kin}} \rangle = \frac{\hbar^2 b^2}{4m} = \boxed{\frac{1}{4} \hbar \omega}. \quad (45)$$

e.)

Die Gesamtenergie des Grundzustandes folgt durch Lösen der Schrödingergleichung oder durch Nachschauen bei [wikipedia](#) wie wir es in Aufgabenteil (a) gemacht haben ;-). Diese ist als Eigenwert des Hamiltonoperators auch Erwartungswert für die Gesamtenergie:

$$\langle W_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0^*(x) \hat{H} \psi_0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0^*(x) W_0 \psi_0(x) = W_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0^*(x) \psi_0(x) = W_0. \quad (46)$$

Die Gesamtenergie setzt sich aus den Erwartungswerten der kinetischen und potentiellen Energie zusammen:

$$\langle W_0 \rangle = \langle W_{\text{kin}} \rangle + \langle W_{\text{pot}} \rangle \Rightarrow \langle W_{\text{pot}} \rangle = \langle W_0 \rangle - \langle W_{\text{kin}} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{1}{4} \hbar \omega = \boxed{\frac{1}{4} \hbar \omega}. \quad (47)$$

Aufgabe 16

Die Wellenfunktionen in der Quantenmechanik sind Elemente eines sogenannten **Hilbertraums** \mathcal{H} . Dabei handelt es sich um den komplexen Vektorraum (über dem Körper K der komplexen Zahlen \mathbb{C}) der quadratintegralen Funktionen mit Skalarprodukt. Dass die Wellenfunktionen Elemente eines Vektorraums sind, folgt aus der Linearität der Schrödingergleichung. Sind zwei Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 Lösung der Schrödingergleichung, dann auch ihre Linearkombination $a\psi_1 + b\psi_2$ mit $a, b \in \mathbb{C}$ oder $c\psi_1$ bzw. $d\psi_2$ mit $c, d \in \mathbb{C}$, was gerade die Vektorraumeigenschaft ist. Im Folgenden soll der Einfachheit halber der eindimensionale Fall betrachtet werden. Das Ganze lässt sich problemlos auf mehrere Dimensionen erweitern. Das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen auf diesem Vektorraum ist gerade das bekannte Integral

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx, \quad (48)$$

das die Eigenschaften eines Skalarprodukts aufweist:

- Antilinearität (entspricht der Linearität im Reellen):

$$\begin{aligned} (\psi_1, \psi_2 + \psi_3) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \{ \psi_2(x) + \psi_3(x) \} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_3(x) dx = \\ &= (\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \psi_3), \end{aligned} \quad (49)$$

$$(\psi_1, c\psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) c\psi_2(x) dx = c \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = c(\psi_1, \psi_2), \quad (50)$$

bzw.

$$(c\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} (c\psi_1(x))^* \psi_2(x) dx = c^* \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = c^*(\psi_1, \psi_2). \quad (51)$$

- Hermitizität (entspricht der Symmetrie im Reellen):

$$\begin{aligned}
 (\psi_2, \psi_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1^*(x) \psi_2(x))^* dx = \\
 &= \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx \right\}^* = (\psi_1, \psi_2)^*. \tag{52}
 \end{aligned}$$

- Positive Definitheit:

Dies bedeutet, dass das Skalarprodukt einer Wellenfunktion mit sich selbst stets ≥ 0 ist. Es ist genau dann gleich Null, wenn $\psi(x) \equiv 0$ ist.

$$(\psi_1, \psi_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_1(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(x)|^2 dx > 0, \tag{53}$$

wegen $|\psi_1(x)|^2 > 0$. $(\psi_1, \psi_1) = 0$ ist äquivalent zu $\psi_1(x) \equiv 0$.

Die Quadratintegrabilität ist genau die Eigenschaft, dass das Integral über das Betragsquadrat $|\psi(x)|^2$ endlich sein muss. Ansonsten wäre die Wellenfunktion nicht normierbar, was zu Problemen mit dem Wahrscheinlichkeitsbegriff führt. (Die Wahrscheinlichkeit sollte auf Eins normiert sein. Unendlich große Wahrscheinlichkeiten sind unsinnig.)

a.)

Wir wollen zeigen, dass die beiden Wellenfunktionen

$$\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right), \quad \psi_1(x) = 2C_1x \exp\left(-\frac{1}{2}b^2x^2\right), \tag{54}$$

nach dem oben gegebenen Skalarprodukt orthogonal zueinander sind:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} 2C_0C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-b^2x^2) dx = \boxed{0}. \tag{55}$$

Das Integral verschwindet, weil der Integrand eine ungerade Funktion (punktsymmetrisch zum Ursprung) ist und über ein symmetrisches Intervall integriert wird.

b.)

Die Kraft auf ein Elektron ist gegeben durch $K = eF$. Das zugehörige Potential für diese Kraft lautet $V(x) = eFx$ wegen $F = -dV(x)/dx$. Damit ist dieses Potential zusätzlich zum Potential des harmonischen Oszillators zu addieren und es ergibt sich der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + eFx. \tag{56}$$

Mit Hilfe einer quadratischen Ergänzung kann dieser auf die Form des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators gebracht werden!

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 + \frac{2eF}{m\omega^2}x\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \underbrace{\left(x + \frac{eF}{m\omega^2}\right)^2}_{\equiv \bar{x}^2} - \frac{(eF)^2}{m\omega^2}. \tag{57}$$

Durch Einsetzen in die Schrödingergleichung ergibt sich

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2 - \frac{(eF)^2}{m\omega^2}\right) \psi = W\psi, \tag{58}$$

und somit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \bar{x}^2\right) \psi = \left(W + \frac{(eF)^2}{m\omega^2}\right) \psi \equiv \bar{W} \psi. \quad (59)$$

Da steht sie nun wieder, die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators in Abhängigkeit von einer neuen Ortsvariablen \bar{x} und mit einer neuen Energie \bar{W} . Die Eigenfunktionen hängen damit nicht mehr von x , sondern von \bar{x} ab:

$$\psi(\bar{x}) = C_n H_n(b\bar{x}) \exp\left(-\frac{1}{2}b^2 \bar{x}^2\right), \quad (60)$$

also

$$\psi_n(x) = C_n H_n\left[b\left(x + \frac{eF}{m\omega^2}\right)\right] \exp\left(-\frac{1}{2}b^2 \left[x + \frac{eF}{m\omega^2}\right]^2\right). \quad (61)$$

Die Energieeigenwerte sind

$$\bar{W} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (62)$$

und somit gilt:

$$W = \bar{W} - \frac{(eF)^2}{m\omega^2} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{(eF)^2}{m\omega^2}. \quad (63)$$

c.)

Wir haben kennengelernt, dass die Energie einer elektromagnetischen Welle in Paketen transportiert wird, also gequantelt ist. Diese Energiequanten haben wir als Photonen bezeichnet. Mathematisch kann man ein Photon mit Wellenvektor k ($k = 2\pi/\lambda$) durch einen harmonischen Oszillator beschreiben.

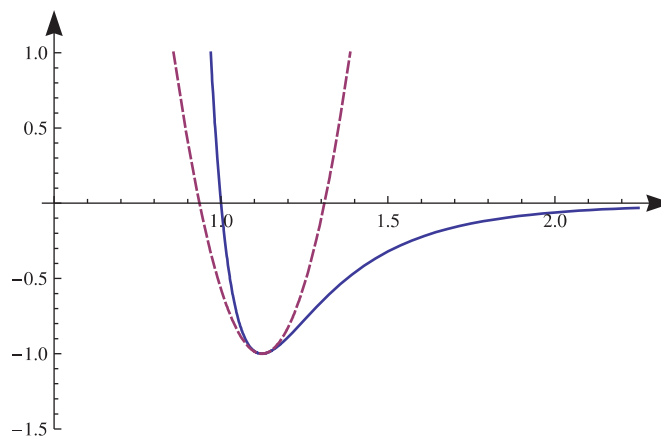
d.)

Die Lösungen der rechten Potentialhälfte, also für $x < 0$ sind bereits bekannt. Es handelt sich dabei nämlich um den altbekannten harmonischen Oszillator. Das unendlich hohe Potential für $x \geq 0$ fordert, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und damit die Wellenfunktion in diesem Bereich verschwinden muss. Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion ergibt sich nun die zusätzliche Randbedingung $\psi(0) = 0$ und diese wird nur von den ungeraden (also den zum Ursprung punktsymmetrischen) Wellenfunktionen erfüllt. Damit setzen sich die Lösungen des „halben“ harmonischen Oszillators nur aus den ungerade Lösungen des gewöhnlichen harmonischen Oszillators zusammen:

$$\psi_{2k+1}(x) = C_{2k+1} H_n(bx) \exp\left(-\frac{1}{2}b^2 x^2\right), \quad W_{2k+1} = \hbar\omega \left(2k + \frac{3}{2}\right), \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (64)$$

e.)

Skizziert (für die Werte $\epsilon = 1$ und $\sigma = 0,5$) sieht das Lennard-Jones-Potential zusammen mit der harmonischen Näherung folgendermaßen aus:



Wir ersten beiden Ableitungen lauten:

$$V'(r) = 4\epsilon \left(-12 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} + 6 \frac{\sigma^6}{r^7} \right), \quad V''(r) = 4\epsilon \left(156 \frac{\sigma^{12}}{r^{14}} - 42 \frac{\sigma^6}{r^8} \right). \quad (65)$$

Durch Nullsetzen der ersten Ableitung ergibt sich das Minimum r_0 :

$$V'(r_0) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow -12\sigma^{12} + 6\sigma^6 r_0 = 0 \Rightarrow r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma, \quad V(r_0) = -\epsilon. \quad (66)$$

Weiterhin benötigen wir:

$$V''(r_0) = 36 \cdot 2^{\frac{2}{3}} \frac{\epsilon}{\sigma^2}. \quad (67)$$

Entwickeln wir nun $V(r)$ in eine Taylorreihe, ergibt sich:

$$V(r) = V(r_0) + \underbrace{V'(r_0)}_{=0}(r - r_0) + \frac{1}{2}V''(r_0)(r - r_0)^2 + \dots = -\epsilon + 18 \cdot 2^{\frac{2}{3}} \frac{\epsilon}{\sigma^2}(r - \sqrt[6]{2}\sigma)^2 + \dots \quad (68)$$

Mit diesem Potential lautet die Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r_0) + \frac{1}{2}V''(r_0)(r - r_0)^2 \right) \psi(r) = W\psi(r). \quad (69)$$

Führen wir eine Variablenverschiebung $\varrho = r - r_0$ durch, so folgt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\varrho^2 \right) \psi(\varrho) = (W - V(r_0))\psi(\varrho) \equiv \bar{W}\psi(\varrho), \quad m\omega^2 = |V''(r_0)|. \quad (70)$$

Damit können wir erneut die Eigenenergien ablesen:

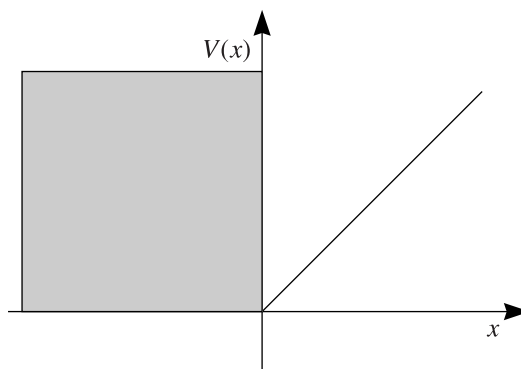
$$W_n = \bar{W}_n + V(r_0) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + V(r_0). \quad (71)$$

Die Nullpunktenergie folgt für $n = 0$:

$$\begin{aligned} W_0 &= \bar{W}_0 + V(r_0) = \frac{1}{2}\hbar\omega + V(r_0) = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{|V''(r_0)|}{m}} + V(r_0) = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{18 \cdot 2^{\frac{2}{3}} \frac{|\epsilon|}{\sigma^2 m}} - \epsilon = \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{36 \cdot 2^{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{|\epsilon|}{\sigma^2}} - \epsilon = \frac{1}{2}\sqrt{36 \cdot 2^{\frac{2}{3}} \cdot (2 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2) \cdot \frac{10^{-3} \text{ eV}}{(2,5 \text{ \AA})^2}} - 10^{-3} \text{ eV} \approx \boxed{0,001}. \end{aligned} \quad (72)$$

Aufgabe 17

a.)



b.)

Die Schrödingergleichung lautet:

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + eFx \right) \psi(x) = W\psi(x), \quad (73)$$

für $x \geq 0$ mit der Randbedingung $\psi(0) = 0$.

c.)

Zuerst muss die Testfunktion wieder einmal normiert werden. Mittels des Integrals

$$\int_0^{\infty} x^n \exp(-ax) dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad (74)$$

folgt dann:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^{\infty} x^2 \exp(-2\alpha x) dx = \frac{A^2}{4\alpha^3} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow A = 2\sqrt{\alpha^3}. \quad (75)$$

Dann ist der Erwartungswert der Gesamtenergie zu bestimmen:

$$\langle W(\alpha) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 4\alpha^3 \int_0^{\infty} x \exp(-\alpha x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + eFx \right) x \exp(-\alpha x) dx. \quad (76)$$

Mittels der zweiten Ableitung von $x \exp(-\alpha x)$, also

$$\frac{d^2}{dx^2} [x \exp(-\alpha x)] = -2\alpha \exp(-\alpha x) + \alpha^2 x \exp(-\alpha x), \quad (77)$$

folgt:

$$\langle W(\alpha) \rangle = 4\alpha^3 \int_0^{\infty} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} x \exp(-2\alpha x) - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} x^2 \exp(-2\alpha x) + eFx^3 \exp(-2\alpha x) \right) dx. \quad (78)$$

Nun benötigen wir

$$\int_0^{\infty} x \exp(-2\alpha x) dx = \frac{1}{4\alpha^2}, \quad \int_0^{\infty} x^3 \exp(-2\alpha x) dx = \frac{3}{8\alpha^4}, \quad (79)$$

und damit ergibt sich:

$$\langle W(\alpha) \rangle = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} - eF \frac{3}{2\alpha} = \boxed{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + \frac{3}{2\alpha} eF}. \quad (80)$$

d.)

Die Natur wird sich für einen Zustand entscheiden, für den die Energie minimal ist. Wir müssen also das Minimum von des Erwartungswerts der Energie, also $\langle W(\alpha) \rangle$, finden. Dies erreichen wir durch Nullsetzen der ersten Ableitung:

$$\frac{d\langle W(\alpha) \rangle}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - \frac{3}{2\alpha^2} eF \stackrel{!}{=} 0. \quad (81)$$

Daraus folgt durch Auflösen nach α

$$\alpha = \sqrt[3]{\frac{3}{2\hbar^2} eFm}, \quad (82)$$

und damit folgt eine Wellenfunktion, welche eine gute Näherung für die unbekannte Wellenfunktion sein wird, die aus der Schrödingergleichung folgt:

$$\boxed{\psi(x) = 2\sqrt{\frac{3}{2\hbar^2} eFm} x \exp\left(-\sqrt[3]{\frac{3}{2\hbar^2} eFm} x\right)}. \quad (83)$$