Physik IV – Atome und Moleküle; Sommer 2011

Prof. Thomas Müller & Dr. Frank Hartmann, KIT

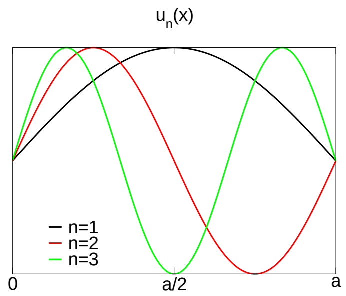
LÖSUNGEN Übung 6

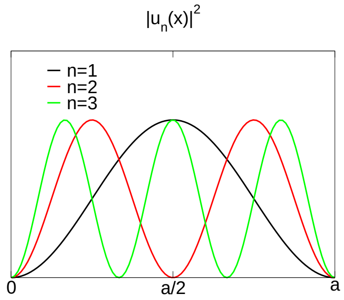
1. Stationäre Schrödingergleichung
$$\hat{H}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$
Stationärer Zustand erfordert $V(x,t) = V(x)$.
Produktansatz für die Wellenfunktion:
$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$$
Einsetzten liefert:
$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x)\right]\varphi(t) &= \psi(x)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) \\ \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} &= \frac{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t)}{\varphi(t)}\end{aligned}$$
Da die linke Seite nur von x und die rechte nur von t abhängt, können beide Seiten nur gleich sein, wenn sie konstant sind. Die Konstante ist die Energie E. Es folgt dann:
$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) &= E\varphi(t) \Rightarrow \varphi(t) = Ae^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

2. Potenzialtopf

   (a) Lösen der stationären Schrödingergleichung
   Wir machen den Ansatz: $u_n(x) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$. Da $V(x) = \infty$ für $x < 0$ und $x > a$ folgt $u_n(x) = 0$, bzw. $C_n = 0$ für $x < 0$ und $x > a$. Diese Randbedingung erlaubt auch den Cosinusanteil für den Ansatz auszuschließen. Für $0 < x < a$ bestätigen wir den Ansatz durch einsetzen in die stationäre Schrödingergleichung (mit $V(x) = 0!$), es folgt:
$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_n(x) &= Eu_n(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}C_n\Delta\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) &= EC_n\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) &= E\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ E &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2\end{aligned}$$
   Bleibt noch C_n aus der Normierung zu bestimmen. Wobei man wissen muss $\int \sin^2(bx)dx = \frac{1}{4}x - \frac{1}{4b}\sin(2bx)$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u_n(x)|^2\,dx = \int_0^a C_n^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \left[\frac{1}{2}x - \frac{a}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a = C_n^2\cdot\frac{a}{2} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\Rightarrow C_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \Rightarrow u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$





(b) Erwartungswert $\langle x \rangle$:

$$\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_n^*(x) x u_n(x) dx = \frac{2}{a} \int\limits_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx$$

Wir substituieren $y = x - a/2$ um die Symmetrie der Wellenfunktion zu nutzen, man erhält:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a}\left[\int\limits_{-a/2}^{+a/2} y \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}(y + a/2)\right) dy + \int\limits_{-a/2}^{+a/2} \frac{a}{2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}(y + a/2)\right) dy\right]$$

Der zweite Term ist ein Integral vom Typ wie eben bei der Normierung. Also einfach mal ausrechnen, dazu muss man im ersten Term noch ausmultiplizieren. Man erhält dann:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a}\left[\int\limits_{-a/2}^{+a/2} y \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}y + \frac{n\pi}{2}\right) dy\right] + \frac{a}{2}$$

Weiter gilt:

$$\begin{aligned} \sin^2\left(\alpha + \frac{n\pi}{2}\right) &= \sin^2(\alpha) \quad \text{für } n \text{ gerade} \\ \sin^2\left(\alpha + \frac{n\pi}{2}\right) &= \cos^2(\alpha) \quad \text{für } n \text{ ungerade} \end{aligned}$$

Damit verschwindet das Integral, da es sich um eine Integration eines Produkts aus symmetrischer Funktion ($\sin^2(\alpha)$ bzw. $\cos^2(\alpha)$) mit einer antisymmetrischen Funktion y über ein symmetrisches Intervall handelt. Damit ist:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}$$

(c) Energie für Übergang von $n = 1$ in $n = 2 \Rightarrow \Delta E(1 \to 2) = E_2 - E_1$ mit $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$ folgt (mit $a = 10^{-10}$ m):

$$\Delta E(1 \to 2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2^2 - 1^2) = 3E_1 = 112{,}8\,\text{eV}$$

Wahrscheinlichkeit im Grundzustand ($n = 1$) das Elektron im Intervall $[x_1 = 0{,}49 \cdot 10^{-10}\,\text{m};\ x_2 = 0{,}51 \cdot 10^{-10}\,\text{m}]$ zu finden (mit $a = 10^{-10}$ m):

$$P = \int\limits_{x_1}^{x_2} |u_1(x)|^2\, dx$$

Mit der Näherung $u_1(x) \approx u_1(0{,}5) = u_1(a/2)$ für $x \in [x_1 = 0{,}49 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m};$ $x_2 = 0{,}51 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}]$ ergibt sich:

$$P = \int\limits_{x_1}^{x_2} |u_1(a/2)|^2 \, dx = |u_1(a/2)|^2 \cdot (x_2 - x_1) = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} \cdot \frac{a}{2}\right) \cdot (x_2 - x_1) = \frac{2(x_2 - x_1)}{a} = 0{,}04$$

3. Zerfliessendes Wellenpaket
   Normierung:

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= N \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{k^2}{2(\Delta k)^2}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \\
\psi(x,t=0) &= N \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{k^2}{2(\Delta k)^2}} e^{ikx} dk \\
&= N e^{-\frac{x^2}{4} \cdot 2\Delta k^2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2\Delta k^2}(k - ix\Delta k^2)^2} dk \\
&= N e^{-\frac{x^2}{2} \cdot \Delta k^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\frac{1}{\sqrt{2}\Delta k}} = N\sqrt{2\pi}\Delta k e^{-\frac{x^2}{2} \cdot \Delta k^2} \\
\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t=0)\psi(x,t=0) dx &\stackrel{!}{=} 1 = \left(N\sqrt{2\pi}\Delta k\right)^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2 \Delta k^2} dx \\
1 &= \left(N\sqrt{2\pi}\Delta k\right)^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta k} \\
N &= \frac{1}{\sqrt{2\Delta k}\pi^{3/4}}
\end{aligned}$$

   Freies Teilchen:
   Wir nehmen erst einmal an, dass die Normierung erhalten bleibt und zeigen später, dass diese Annahme in Ordnung war. Weiter gilt $E = \hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow$ $\omega(k) = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= N\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{k^2}{2(\Delta k)^2}} e^{i(kx-\frac{\hbar}{2m}k^2 t)}dk \\
&= N\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\frac{1}{2(\Delta k)^2}+i\frac{\hbar}{2m}t)k^2+ikx}dk \\
&= Ne^{-\frac{x^2}{4}\cdot\frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2}+i\frac{\hbar}{2m}t}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\frac{1}{2(\Delta k)^2}+i\frac{\hbar}{2m}t)(k-i\frac{x}{2}\frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2}+i\frac{\hbar}{2m}t})^2}dk \\
&= Ne^{-\frac{x^2}{4}\cdot\frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2}+i\frac{\hbar}{2m}t}}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2\Delta k^2}+\frac{i\hbar}{2m}t}} \\
&= \sqrt{\frac{2m\Delta k^2\pi}{m+i\hbar\Delta k^2 t}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\Delta k^2}\pi^{3/4}}\cdot e^{-\frac{x^2}{4}\frac{2m\Delta k^2}{m+i\hbar\Delta k^2 t}} \\
\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi}(m+i\hbar\Delta k^2 t)}}\cdot e^{-\frac{x^2 m\Delta k^2}{2(m+i\hbar\Delta k^2 t)}} \\
|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t) &= \frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{1}{m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2}}\cdot e^{-\frac{x^2 m\Delta k^2}{2}\cdot\left(\frac{m-i\hbar\Delta k^2 t}{m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2}+\frac{m+i\hbar\Delta k^2 t}{m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2}\right)} \\
|\psi(x,t)|^2 &= \frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi(m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2)}}\cdot e^{-\frac{x^2 m^2\Delta k^2}{m^2+\hbar\Delta k^4 t^2}}
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist zu jeder Zeit eine Gaußfunktion mit der Breite

$$\Delta x(t) = \frac{\sqrt{\pi(m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2)}}{m\Delta k},$$

d.h. das Wellenpaket wird breiter mit der Zeit. Der Faktor $e^{-k^2/(2\Delta k^2)}$ ist die Gaußfunktion zur Gewichtung der ebenen Wellen $e^{i(kx-\omega(k)t)}$. Bleibt zum Schluss noch zu zeigen, dass die Normierung wirklich zeitunabhänig ist.

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx = \frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi(m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2)}}\frac{\sqrt{\pi}}{m\Delta k}\sqrt{m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2} = 1$$