Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 14

Prof. Dr. Gerd Schön
Andreas Heimes, Dr. Andreas Poenicke

Lösungen zu Blatt 2
Besprechung 07.05.2014

---

1. Normierung und Kontinuität (2 Punkte)

(a) (1 Punkt) Zunächst schauen wir uns die Zeitableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ an,

$$\dot\rho = \dot\psi^*\psi + \psi^*\dot\psi$$

und setzen die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}\dot\psi &= \frac{1}{i\hbar}H\psi\\ \dot\psi^* &= -\frac{1}{i\hbar}H\psi^*\end{aligned}$$

ein,

$$\dot\rho = -\frac{1}{i\hbar}(H\psi^*)\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*(H\psi) = -\frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*(\partial_x^2\psi) - (\partial_x^2\psi^*)\psi\Big). \tag{1}$$

Die Integration über x liefert

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\dot\rho &= -\frac{\hbar}{i2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\Big(\psi^*(\partial_x^2\psi) - (\partial_x^2\psi^*)\psi\Big)\\ &= -\frac{\hbar}{i2m}\Big(\psi^*(\partial_x\psi) - (\partial_x\psi^*)\psi\Big)\Big|_{x=-\infty}^{\infty}\\ &\quad + \frac{\hbar}{i2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\Big((\partial_x\psi^*)(\partial_x\psi) - (\partial_x\psi^*)(\partial_x\psi)\Big) = 0\end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir partiell integriert und ausgenutzt, dass ψ für $|x| \to \infty$ verschwindet. Da $\int_{-\infty}^{\infty} dx\dot\rho = 0$ für beliebige Zeiten t, ist die Norm erhalten, es muss also gelten $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x,t)|^2 = 1$.

(b) (1 Punkt) Nehmen wir die Definition der Wahrscheinlichkeitsstromedichte aus der Aufgabenstellung, so erhalten wir

$$\begin{aligned}\partial_x J &= \frac{\hbar}{2m}\partial_x\left[\psi^*\frac{\partial_x}{i}\psi - \psi\frac{\partial_x}{i}\psi^*\right]\\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\partial_x^2\psi - \psi\partial_x^2\psi^* + \partial_x\psi^*\partial_x\psi - \partial_x\psi\partial_x\psi^*\right]\\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\partial_x^2\psi - \psi\partial_x^2\psi^*\right]\end{aligned} \tag{2}$$

Gleichungen (1) und (2) stimmen bis auf das Vorzeichen überein, womit die Kontinuitätsgleichung gezeigt wäre.

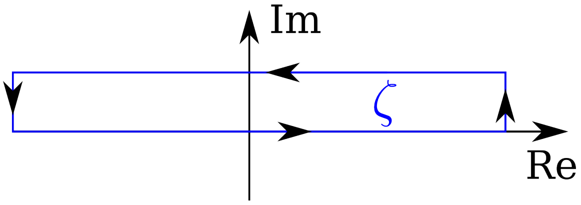

Abbildung 1:

2. Wellenpaket und Unschärferelation (3 Punkte)

Gegeben sei ein Wellenpaket für ein freies Teilchen mit Impulsverteilung

$$g(k) = \sqrt{a}\exp(-a^2k^2/4)/(2\pi)^{1/4}.$$

Wir betrachten ein Wellenpaket aus ebenen Wellen mit genau dieser Verteilung,

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k) e^{i(kx-\omega_k t)},$$

wobei $\omega_k = \hbar k^2/2m$.

(a) Zunächst diskutieren wir den Zeitpunkt $t = 0$,

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k) e^{i(kx)} = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \exp(-a^2k^2/4 + ikx),$$

Mittels quadratischer Ergänzung erhalten wir

$$\begin{aligned} a^2k^2/4 - ikx &= (a/2)^2\left[k^2 - i4kx/a^2 + (i2x/a^2)^2\right] - a^2(ix/a^2)^2 \\ &= \left(\frac{a}{2}\right)^2\left[k - i\frac{2x}{a^2}\right]^2 + \frac{x^2}{a^2} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} \psi(x,0) &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \exp\left(-\left(\frac{a}{2}\right)^2\left[k - i\frac{2x}{a^2}\right]^2\right) \\ &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)\int_{-\infty}^{\infty} du\, \exp\left(-\left(\frac{a}{2}\right)^2 u^2\right) \end{aligned}$$

Beachten Sie, dass im letzten Schritt die Substitution $u = k - i\frac{2x}{a^2}$ gemacht wurde. Da das Integral über die in Abb. 1 gezeigte Kontur ζ verschwindet, entspricht das Integral über die Achse $\{k - i2x/a^2 \,|\, k \in (-\infty, \infty)\}$ gerade dem Integral über die reelle Achse. Das Gauß-Integral liefert schließlich

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}\exp(-x^2/a^2).$$

Die Breite der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ ist gegeben durch $a/2$, d.h. Sie ist gerade invers-proportional zur Breite der Impulsverteilung.

(b) Die Standard-Abweichungen in Ort und Impuls seien definiert über $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ bzw. $\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$, wobei

$$\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^\dagger(x,0)\, A\, \psi(x,0)$$

der Erwartungswert des Operators A ist. Zunächst berechnen wir explizit die Integrale

$$
\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\exp(-2x^2/a^2) = 0\\
\langle x^2\rangle &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2\exp(-2x^2/a^2) = \frac{a^2}{4}\\
\langle \frac{1}{i}\partial_x\rangle &= \frac{1}{i}\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,(-\frac{2x}{a^2})\exp(-2x^2/a^2) = 0\\
\langle -\partial_x^2\rangle &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\frac{2}{a^2}-\frac{4}{a^4}x^2\right)\exp(-2x^2/a^2) = \frac{1}{a^2}
\end{aligned}
$$

Damit erhalten wir $\Delta x\,\Delta p = \hbar(\langle x^2\rangle\langle k^2\rangle)^{1/2} = \hbar/2$.

(c) Nun bestimmen wir $\psi(x,t)$ für beliebige Zeiten,

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp(-a^2k^2/4 + ikx - i\omega_k t)\\
&= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp\left(-\left[a^2 + i\frac{2\hbar}{m}t\right]k^2/4 + ikx\right)
\end{aligned}
$$

Mit der Definition $\alpha^2 = \left[a^2 + i\frac{2\hbar}{m}t\right]$ erhalten wir das Integral aus (a),

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{a}{\alpha}}\frac{\sqrt{\alpha}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp\left(-\alpha^2k^2/4 + ikx\right)\\
&= \sqrt{\frac{a}{\alpha}}\left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{1/4}\exp(-x^2/\alpha^2)\\
&= \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\left[a^2 + i\frac{2\hbar}{m}t\right]^{1/2}}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2 + i\frac{2\hbar}{m}t}\right)
\end{aligned}
$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$
\psi^*(x,t)\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}\frac{1}{\left[1 + \frac{4\hbar^2}{m^2a^4}t^2\right]^{1/2}}\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2\left(1 + \frac{4\hbar^2}{m^2a^4}t^2\right)}\right)
$$

D.h. im Vergleich zum Fall $t = 0$ verhält sich die effektive Breite nun wie $\beta = a\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2a^4}t^2}$. Das Wellenpaket zerfließt also, wird breiter und die Amplitude nimmt ab. Desweiteren finden wir

$$
\begin{aligned}
\langle x^2\rangle &= \left(\frac{2}{\pi\beta^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2\exp(-2x^2/\beta^2) = \frac{\beta^2}{4}\\
\langle -\partial_x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x,t)(-\partial_x^2)\psi(x,t)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx(\partial_x\psi^*(x,t))(\partial_x\psi(x,t))\\
&= \left(\frac{2}{\pi\beta^2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{4x^2}{|\alpha|^4}\exp(-2x^2/\beta^2)\\
&= \frac{\beta^2}{|\alpha|^4} = \frac{1}{a^2}
\end{aligned}
$$

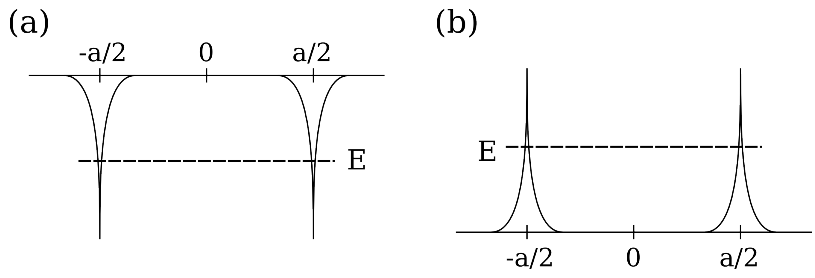

Abbildung 2:

Damit gilt

$$\Delta x\, \Delta p = \hbar(\langle x^2\rangle\langle k^2\rangle)^{1/2} = \hbar/2\left(1+\frac{4\hbar^2}{m^2a^4}t^2\right)^{1/2} \geq \hbar/2.$$

Zum Zeitpunkt $t=0$ hat das Wellenpaket also eine minimale Unschärfe.

3. Delta-Potenziale (3 Punkte)

(a) (i) Zuerst leiten wir die Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktion und deren Ableitung her. Durch Integration der Schrödinger-Gleichung erhalten wir analog zur Aufgabe 3 (a) auf dem ersten Blatt

$$\lim_{\epsilon\to 0}\partial\psi(x_0+\epsilon) - \lim_{\epsilon\to 0}\partial\psi(x_0-\epsilon) = \begin{cases} -\frac{2mv_0}{\hbar^2}\psi(0) & x_0 = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Aufgrund der Tatsache, dass $\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx\delta(x)\psi(x) = \psi(0)$, ist im Unterschied zum letzten Blatt die rechte Seite nun endlich. Eine weitere Integration liefert die Stetigkeit der Wellenfunktion,

$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0+\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0-\epsilon).$$

(ii) Da $E<0$, sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung exponentiell abklingend für $|x|>0$,

$$\psi(x) = \begin{cases} A\exp(\kappa x) & x<0 \\ B\exp(-\kappa x) & x\geq 0 \end{cases}$$

mit $\hbar\kappa = \sqrt{2m(-E)}$. Aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x=0$ gilt $A=B$. Die Normierung der Wellenfunktion liefert $A=\sqrt{\kappa}$. Um die Bindungsenergie zu erhalten, schauen wir uns die Randbedingung für $\partial_x\psi$ an,

$$\lim_{\epsilon\to 0}\partial\psi(+\epsilon) - \lim_{\epsilon\to 0}\partial\psi(-\epsilon) = -\kappa A - \kappa A = -\frac{2mv_0}{\hbar^2}A \Rightarrow \kappa = \frac{mv_0}{\hbar^2},$$

also

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2}.$$

(iii) Nun ist $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}>0$. Die Wellenfunktion linksseitig des Delta-Potenzials ist eine einlaufende und reflektierte Welle, rechtsseitig haben wir eine transmittierte Welle,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} & x \geq 0 \end{cases}$$

Die Stetigkeitsbedingungen liefern

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ ik(A - B) &= ikC + \frac{2mv_0}{\hbar^2} C \\ \Rightarrow A &= C\big[1 - i\frac{mv_0}{\hbar^2 k}\big] = t^{-1} e^{-i\varphi} \end{aligned}$$

mit $\tan(\varphi) = \frac{mv_0}{\hbar^2 k}$ und

$$t^{-1} = \sqrt{1 + \big(\frac{mv_0}{\hbar^2 k}\big)^2}.$$

Im klassischen Grenzfall $E \to \infty$ geht $\varphi \to 0$ und $t \to 1$, d.h. das Teilchen sieht das Delta-Potenzial nicht. Im umgekehrten Fall $E \to 0$ geht $t \to 0$, das Teilchen wird also totalreflektiert.

(b) Die Schrödinger-Gleichung für das Potenzial in Abbildung 2(a) lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - v_0\delta(x + a/2) - v_0\delta(x - a/2)\right]\psi(x) = H(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Zunächst sehen wir, dass $H(x) = H(-x)$. Damit ist $\psi(x)$ gleichzeitig eine Eigenfunktion zum Paritätsoperator $P\psi(x) = \psi(-x)$. [1]
Sei λ ein Eigenwert zum Paritätsoperator, also $P\psi(x) = \lambda\psi(x)$. Mit $P^2\psi(x) = \psi(x)$ erhalten wir die beiden Werte $\lambda = \pm 1$ und die entsprechenden symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen $\psi_\pm(-x) = \pm\psi_\pm(x)$:

$$\psi_+(x) = \begin{cases} A_+ e^{\kappa(x+a/2)} & x < -a/2 \\ B_+ \cosh(\kappa x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ A_+ e^{-\kappa(x-a/2)} & a/2 < x \end{cases}$$

$$\psi_-(x) = \begin{cases} -A_- e^{\kappa(x+a/2)} & x < -a/2 \\ B_- \sinh(\kappa x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ A_- e^{-\kappa(x-a/2)} & a/2 < x \end{cases}$$

mit $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$. Aus den Stetigkeitsbedingungen für ψ und $\partial\psi$ bei $x = -a/2$, erhalten wir für die symmetrische Lösung

$$\begin{aligned} A_+ &= B_+ \cosh(\kappa a/2) \\ \kappa B_+ \sinh(\kappa a/2) &= -\left(\kappa - \frac{2mv_0}{\hbar^2}\right) A_+ \end{aligned}$$

und damit

$$\tanh(\kappa a/2) = -\left(1 - \frac{2mv_0}{\hbar^2 \kappa}\right)$$

[1] Sehen wir uns dafür die Wirkung des Paritätsoperators auf die Schrödinger-Gleichung an,

$$PH(x)\psi(x) = H(-x)\psi(-x) = H(x)\psi(-x) = H(x)P\psi(x)$$

Gleichzeitig ist $PE\psi(x) = EP\psi(x)$ und damit $H(x)[P\psi(x)] = E[P\psi(x)]$. Seien $\psi_\pm(x)$ die Eigenfunktionen des Paritätsoperators, so sind diese auch Lösungen der Schrödinger-Gleichung, also $H(x)\psi_\pm(x) = E\psi_\pm(x)$.

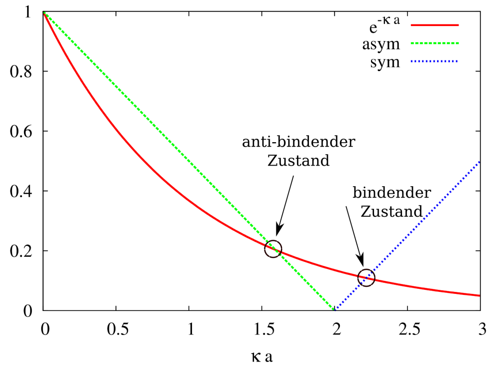

Abbildung 3: Graphische Lösung von (3). Hier haben wir $mv_0/\hbar^2 = 2$ gewählt.

Analog erhalten wir für die asymmetrische Lösung

$$\coth(\kappa a/2) = -\left(1 - \frac{2mv_0}{\hbar^2\kappa}\right)$$

Zusammenfassend können wir diese Quantisierungsbedingungen für E auch schreiben als

$$e^{-\kappa a} = \pm\left(1 - \frac{\hbar^2\kappa}{mv_0}\right), \tag{3}$$

wobei "±" der antisymmetrischen bzw. symmetrischen Lösung entsprechen. Wir lösen diese Gleichung graphisch (Abb. 3) und finden, dass die symmetrische Lösung energetisch niedriger liegt. Daher bezeichnet man diese als "bindend", die asymmetrische Lösung als "anti-bindend".

(c) Nun sei $E = \hbar^2k^2/2m > 0$ und $V(x) = v_0[\delta(x + a/2) + \delta(x - a/2)]$ mit $v_0 > 0$. Gefragt ist nach der Bedingung für das Verschwinden des Reflexionskoeffizienten der Barriere. Analog zu (a) erhalten wir

$$\psi_+(x) = \begin{cases} A_+e^{ik(x+a/2)} & x < -a/2 \\ B_+\cos(kx) & -a/2 \le x \le a/2 \\ A_+e^{ik(x-a/2)} & a/2 < x \end{cases}$$

$$\psi_-(x) = \begin{cases} -A_-e^{ik(x+a/2)} & x < -a/2 \\ B_-\sin(kx) & -a/2 \le x \le a/2 \\ A_-e^{ik(x-a/2)} & a/2 < x \end{cases}$$

Beachte, dass in beiden Fällen der Reflexionskoeffizient auf null gesetzt wurde. Die Stetigkeitsbedingungen für die symmetrische Lösung liefern

$$A_+ = B_+\cos(ka/2)$$
$$kB_+\sin(ka/2) = \left(ik + \frac{2mv_0}{\hbar^2}\right)A_+$$

und damit

$$\tan(ka/2) = \left(i + \frac{2mv_0}{\hbar^2k}\right) \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{\hbar^2k}{mv_0}$$

Die assymmetrische Lösung liefert dasselbe Ergebnis. Wieder lösen wir das Problem graphisch in Abb.4. Dort skizzieren wir auch die Transmission T, welche beim Verschwinden des Reflexionskoeffizienten gerade gleich eins ist. Diese Situation bezeichnet man gemeinhin als Resonanztunneln.

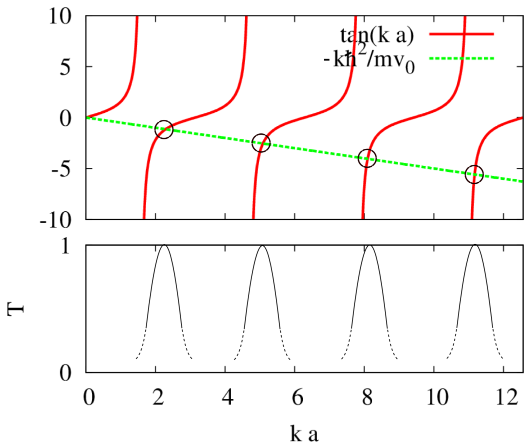

Abbildung 4: Transmission durch eine Doppel-Barriere.