Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 14

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

Lösung zu Blatt 4
Besprechung 21.05.2014

---

1. Teilchen im Dreieckspotenzial (3 Punkte)

Im Folgenden betrachten wir ein Teilchen in einem Dreieckspotenzial der Form

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{für} \quad x \leq 0 \\ ax, & \text{für} \quad x > 0 \qquad (a > 0). \end{cases}$$

Die beiden Airy-Funktionen $\mathrm{Ai}(x)$ und $\mathrm{Bi}(x)$ sind Lösungen der homogenen Differentialgleichung.

$$f''(x) - xf(x) = 0. \tag{1}$$

(a) [1 Punkt] Zuerst soll die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + (ax - E)\psi(x) = 0$$

umgeformt werden, um die Airy-Differentialgleichung zu erhalten. Dazu führen wir zuerst die angegebene Variabelentransformation $\bar{x} = x - \frac{E}{a}$ durch, und erhalten

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\bar{x}^2}\psi(\bar{x}) + a\bar{x}\psi(\bar{x}) = 0.$$

Um eine dimensionslose Form zu erhalten führen wir eine (noch zu bestimmende) Länge l und die neue, dimensionslose Variable $\xi = \frac{\bar{x}}{l}$ ein. Damit erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2ml^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) + al\xi\psi(\xi) = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) - \frac{2ma}{\hbar^2}l^3\xi\psi(\xi) = 0 \tag{2}$$

und setzen daher

$$l^3 = \frac{\hbar^2}{2ma}. \tag{3}$$

Somit erhalten wir die gewünschte dimensionslose Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) - \xi\psi(\xi) = 0. \tag{4}$$

(b) [1 Punkt] Nun sollen die Energieniveaus bestimmt werden:
Wir wissen, dass die Airy-Funktionen $\mathrm{Ai}(\xi)$ und $\mathrm{Bi}(\xi)$ die Differentialgleichung (4) lösen. Es müssen jetzt noch die Randbedingungen berücksichtigt werden. Aus $\psi(x) \to 0$ für $x \to \infty$ folgt sofort, dass die Lösung nur durch

$$\psi(\xi) = N\,\mathrm{Ai}(\xi)$$

gegeben ist. Desweiteren muss $\psi(x)$ für $x = 0$ verschwinden, also gelten

$$\mathrm{Ai}\Big(\frac{x}{l} - \frac{E}{al}\Big) = 0 \quad \text{für} \quad x = 0. \tag{5}$$

Die Nullstellen der Airy-Funktion sind als $\mathrm{x_n}$ gegeben, somit gilt für die Energieniveaus

$$E = -al\mathrm{x_n}.$$

(c) [1 Punkt] Skizze der drei energetisch niedrigsten Wellenfunktion:

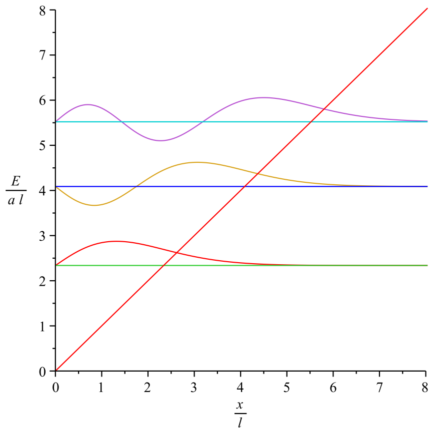

Abbildung 1:

2. Allgemeine Eigenschaften eindimensionaler Probleme (2 Punkte)

Betrachten werden eindimensionale Systeme, ohne die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\Big[V(x)-E\Big]\psi=0 \tag{6}$$

explizit zu lösen

(a) **Entartung** [1 Punkt]

Es ist zu zeigen, daß die Energieniveaus gebundener Zuständen nicht entartet sind:

Die beiden Funktionen $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ seien Eigenfunktionen der Schrödingergleichung (6), also

$$\begin{aligned}\psi_1''+\frac{2m}{\hbar^2}\big[E_1-V(x)\big]\psi_1&=0\\ \psi_2''+\frac{2m}{\hbar^2}\big[E_2-V(x)\big]\psi_2&=0.\end{aligned}$$

Multipliziert man die erste Gleichung mit ψ_2, die zweite mit ψ_1 und subtrahiert beide Gleichungen findet man

$$\psi_1''\psi_2-\psi_2''\psi_1=\frac{2m}{\hbar^2}\big[E_2-E_1\big]\psi_1\psi_2. \tag{7}$$

Nehmen wir an, ψ_1 und ψ_2 hätten den gleichen Eigenwert $E_2=E_1$ so ist

$$\psi_1''\psi_2-\psi_2''\psi_1=0. \tag{8}$$

Durch Integration können wir nun die Wronski-Determinante $\psi_1'\psi_2-\psi_2'\psi_1$ berechnen:

$$\int_{x_0}^{x}\big[\psi_1''(x')\psi_2(x')-\psi_1(x')\psi_2''(x')\big]dx'=\psi_1'\psi_2\big|_{x_0}^{x}-\psi_2'\psi_1\big|_{x_0}^{x}. \tag{9}$$

ψ_1 und ψ_2 sollen gebundene Zustände sein, d.h. es muss gelten

$$\psi_1(x)=\psi_2(x)=0\quad\text{für}\quad x\to\pm\infty.$$

Wir setzen daher $x_0\to-\infty$ und erhalten

$$\psi_1'(x)\psi_2(x)-\psi_2'(x)\psi_1(x)=0. \tag{10}$$

(Für den letzten Schritt hätte es eigentlich genügt wenn x_0 eine gemeinsame Nullstelle von ψ_1 und ψ_2 ist).

Für die Wronski-Determinante gilt, dass falls $W(f,g)(x_0)=f'g-fg'\neq0$ für ein $x_0\in I$, die beiden Funktionen f und g auf dem Intervall I linear unabhängig sind. Der Umkehrschluss gilt leider nicht, daher müssen wir noch einmal integrieren:

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)}=\frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}\to\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln\psi_1(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln\psi_2(x)\to\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln\frac{\psi_1(x)}{\psi_2(x)}=0 \tag{11}$$

woraus die lineare Abhängigkeit folgt

$$\psi_1(x)=e^C\psi_2(x).$$

Da beide Funktionen normiert sein müssen können sie sich nur um eine Phase unterscheiden ($C=i\phi$).

(b) **Knotensatz** [1 Punkt]
Es soll bewiesen werden, dass $\psi_2 \equiv \psi_{n+1}$ zwischen zwei benachbarten Nullstellen x_1, x_2 von $\psi_1 \equiv \psi_n$ **mindestens** eine Nullstelle hat:
Dazu leitet man wieder (7) her, jetzt gilt aber $E_2 > E_1$, die rechte Seite der Gleichung verschwindet nicht. Als geschicktes Intervall integriert man über das Intervall zwischen den Nullstellen

$$\int_{x_1}^{x_2} \left[\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1\right] dx = \psi_1'\psi_2\big|_{x_1}^{x_2} - \psi_1\psi_2'\big|_{x_1}^{x_2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_2 - E_1\right] \int_{x_1}^{x_2} \psi_1\psi_2 dx \tag{12}$$

da x_1 und x_2 Nullstellen von $\psi_1(x)$ sind also $\psi_1(x_1) = \psi_1(x_2) = 0$ erhält man schließlich

$$\psi_1'\psi_2\big|_{x_1}^{x_2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_2 - E_1\right] \int_{x_1}^{x_2} \psi_1\psi_2 dx. \tag{13}$$

Nun gilt entweder

$$\psi_1(x) > 0, \forall x \in]x_1, x_2[\quad \text{sowie} \quad \psi_1'(x_1) > 0 \text{ und } \psi_1'(x_2) < 0,$$

oder

$$\psi_1(x) < 0, \forall x \in]x_1, x_2[\quad \text{sowie} \quad \psi_1'(x_1) < 0 \text{ und } \psi_1'(x_2) > 0.$$

Damit kann (13) nur erfüllt sein wenn ψ_2 in dem Intervall einen Vorzeichenwechsel aufweist. (Setzt man $\psi_2 \gtreqless 0 \; \forall x \in [x_1, x_2]$, haben die beiden Seiten von (13) unterschiedliche Vorzeichen, die Gleichung wird also durch dieses $\psi_2(x)$ nicht gelöst.) Mit der Stetigkeit der Wellenfunktionen folgt daher die Existens mindestens einer Nullstelle.

3. Harmonischer Oszillator (2 Punkte)

Die Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators soll alleine über die Unschärferelation und die Form des Potentials

$$U(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{14}$$

abgeschätzt werden. Die Standardabweichung für Ort und Impuls sind definiert als

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \tag{15}$$

und da Aufgrund der Symmetrie die Erwartungswerte für Ort und Impuls verschwinden $\langle x \rangle = 0$ und $\langle p \rangle$=0 folgt aus der Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{16}$$

direkt

$$\langle x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4 \langle p^2 \rangle}. \tag{17}$$

Dies können wir verwenden um für den Energieerwartungswert die Ungleichung

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} \frac{m\omega^2\hbar^2}{4 \langle p^2 \rangle}. \tag{18}$$

aufzustellen Um die Grundzustandsenergie abzuschätzen minimieren wir bezüglich $\langle p^2 \rangle$

$$\frac{1}{2m} - \frac{1}{2} \frac{m\omega^2\hbar}{4 \langle p^2 \rangle^2} = 0 \tag{19}$$

und erhalten

$$\langle p^2 \rangle_{min} = \frac{m\omega\hbar}{2}. \tag{20}$$

$$E_{min} \geq \frac{\omega\hbar}{4} + \frac{\omega\hbar}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{21}$$

Die exakte Lösung für die Grundzustandsenergie ist $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, also die niedrigste Energie die mit der Unschärferelation zu vereinbaren ist. (Beim Betrachten der Wellenfunktion ist dies zu erwarten, da sie ein Gausssches Wellenpacket ist und somit die minimale Unschärfe $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ erreicht wird.)

4. Teilchen auf einem Ring (3 Punkte)

Ein freies Teilchen ($U(x) = 0$) bewege sich auf einem Ring mit Radius R. Die Eindeutigkeit der Wellenfunktion auf der geschlossenen Kreisbahn fordert die Randbedingung $\psi(\phi+2\pi) = \psi(\phi)$.

(a) [1 Punkt] Der Hamiltonoperator $\hat{H}$ soll in Polarkoordinaten ausgedrückt und die Eigenfunktionen gefunden werden.

In Polarkoordinaten ist der Hamiltonoperator durch den Ausdruck

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{22}$$

gegeben und die Eigenfunktionen sind

$$\psi(\phi) = Ne^{iM\phi}. \tag{23}$$

Es soll weiter gezeigt werden, dass der Randbedingung zu einer Energiequantisierung führen und ein Ausdruck für die Energieeigenwerte hergeleitet werden.

Die Randbedingung fordert

$$\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi) \Rightarrow Ne^{iM\phi} = Ne^{iM\phi}e^{iM2\pi} \Rightarrow M = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{24}$$

wodurch man für die Energie-Eigenwerte

$$\hat{H}\psi(\phi) = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}(iM)^2 Ne^{iM\phi} = E\psi(\phi) \tag{25}$$

mit den diskreten Energien

$$E_M = \frac{\hbar^2}{2mR^2}M^2 \qquad M = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{26}$$

findet. Da die Energien für M und $-M$ gleich sind, sind bis auf E_0 das nicht entartet ist, alle Energieniveaus zweifach entartet.

(b) [1 Punkt] Die Wellenfunktionen soll normiert werden. Weiter soll gezeigt werden, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\phi)|^2$ auf dem Ring konstant ist.

Die Normierung findet man über

$$1 = |N|^2 \int_0^{2\pi} |\psi(\phi)|^2 = |N|^2 \int_0^{2\pi} e^{-iM\phi}e^{iM\phi} = 2\pi|N|^2 \tag{27}$$

und damit für die normierte Wellenfunktion und die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{iM\phi} \qquad |\psi(\phi)|^2 = \frac{1}{2\pi}. \tag{28}$$

(c) [1 Punkt] Der Drehimpulsoperator $\hat{L}_z$ ist gegeben durch

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{29}$$

Zuletzt soll gezeigt werden, dass die Wellenfunktionen $\psi(\phi)$ auch dessen Eigenfunktionen sind und die Eigenwerte von $\hat{L}_z$ berechnet werden.

Die Rechnung ist leicht:

$$\hat{L}_z\psi(\phi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{iM\phi} = \hbar M\psi(\phi) \tag{30}$$

Damit sind alle $\psi(\phi)$ Eigenfunktionen von $\hat{L}_z$ mit den Eigenwerten $M\hbar$