Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 2

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 05.05.2023, 14:00 Uhr

Das Übungsblatt wird in Gruppen von maximal 3 Personen bearbeitet. Die Abgabe erfolgt digital über ILIAS.

Aufgabe 1. Particle in a Box (10 Punkte)

Consider a particle of mass m moving in a "symmetric" 1D box defined by the potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| < L/2 \\ \infty & \text{für} \quad |x| \geq L/2. \end{cases}$$

Since the potential barrier is infinitely high outside outside of the potential well, the particle cannot be found outside the box (and therefore the wavefunction of the particle must be zero when $|x| \geq L/2$).

1. (5 Punkte) Solve the time-independent Shrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

   using a complex exponential ansatz for the wavefunction. Note that the wavefunction must be continuous for all values of x; by demanding that the wavefunction be continuous at the boundary of the box, $|x| = L/2$, show that the eigenenergies E must be "quantised" and can only take on the following discrete values:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2L^2 m}n^2 \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

   Show that the corresponding normalised stationary-state wavefunctions in the region $|x| < L/2$ can be written as follows:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\pi n x/L) & \text{für } n \text{ gerade} \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(\pi n x/L) & \text{für } n \text{ ungerade.} \end{cases}$$

2. (1 Punkt) Sketch the potential well and the first four steady-state wavefunctions, $n = 1, 2, 3, 4$. Comment on the symmetry of the wavefunctions.

3. (2 Punkte) Show that the overlap of two stationary-state wavefunctions with different eigenenergies is zero, that is show the following:

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi_n(x)\psi_m^*(x) = 0 \quad \text{für} \quad n \neq m$$

   where $f^*(x)$ denotes the complex conjugate (this is not relevant here since the wavefunctions are real, but is included for completeness).

4. (2 Punkte) Calculate the probability $P_{1/2}(n)$ that the particle in the n-th stationary-state occupies the central half of the box, defined by $|x| < L/4$. Show that

$$\lim_{n\to\infty} P_{1/2}(n) = 1/2.$$

This is the classicaly expected result and demonstrates Bohr's "correspondence principle" that classical results are recovered in the limit of large quantum numbers; in this case n is a so-called "quantum number".

Lösung Aufgabe 1.

1. Start with a standard ansatz for the wavefunction

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Plugging this into the TISE yields

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ and therefore } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

We now demand that for the wavefunction to be continuous the following must be true $\psi(L/2) = 0$ and $\psi(-L/2) = 0$. As a result of this the following must be true

$$\begin{aligned} \psi(L/2) = 0 \quad &\Rightarrow \quad Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0 \quad \Rightarrow A = -Be^{-ikL} \\ \psi(-L/2) = 0 \quad &\Rightarrow \quad Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0 \quad \Rightarrow A = -Be^{ikL} \end{aligned}$$

Since both of these must be true we have to satisfy the combined condition, $A = -B\exp[\pm ikL]$, and hence $\exp[+ikL] = \exp[-ikL]$, or equivalently $\exp[\pm 2ikL] = 1$. From here we can conclude that for the wavefunction to satisfy $\psi(\pm L/2) = 0$ that kL must be non-zero integer multiples of π. The case where $kL = 0$ is not allowed because the wavefunction would be constant in x, and hence cannot satisfy the contunuity condition at the boundary of the potential well ($\psi(\pm L/2) = 0$) unless the wavefunction itself is 0 everywhere. Since we have established that k and E are related we can see that E must then be similarly quantised.

$$k_n L = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} L = \pm n\pi \text{ where } n = 1, 2, 3, \ldots \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2L^2 m} n^2 \text{ where } n = 1, 2, 3, \ldots$$

We can now characterise two sets of wavefunctions, which depend on whether n is even or odd. If n is even we have $e^{\pm ikL} = 1$, and can therefore see that $A = -B$ from the boundary conditions. If n is odd then $e^{\pm ikL} = -1$ and so the coefficients are related by $A = B$. We therefore have the following cases for the stationary-state wavefunctions:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A\left(e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L}\right) = 2iA\sin(\pi n x/L) & \text{for } n \text{ even} \\ A\left(e^{in\pi x/L} + e^{-in\pi x/L}\right) = 2A\cos(\pi n x/L) & \text{for } n \text{ odd.} \end{cases}$$

We are now ready to normalise the wavefunctions, and can find that for both the even and odd cases the integral is the same

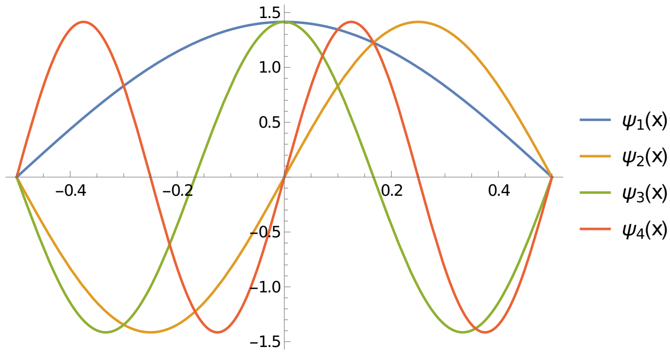
$$1 = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, |\psi_n(x)|^2 = 2L|A|^2 \quad \Rightarrow \quad |A| = \frac{1}{\sqrt{2L}}$$

The normalisation A is then any complex number with an absolute magnitude of $1/\sqrt{2L}$. To make this clean we will select $A = -i/\sqrt{2L}$ for even values of n and $A = 1/\sqrt{2L}$ for odd values of n (since these constitute two separate sets of solutions they can have different phases). We then arrive at the form of the wavefunctions presented in the question:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\pi n x/L) & \text{for } n \text{ even} \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(\pi n x/L) & \text{for } n \text{ odd.} \end{cases}$$

NOTE: this choice of the complex phase is totally arbitrary, no points should be lost is a student picks something different as the physics of the system will be unchanged.

2. The plot should look something like this (here I have used $L = 1$, but for the solutions the scaling is not important, so long as the qualitative behaviour of the wavefunctions is correctly shown):



We see that for odd values of n the wavefunction is a symmetric (even) function in x, whereas it is an asymmetric (odd) function in x for even values of n.

3. In calculating the overlap of the steady-state wavefunctions where $n \neq m$, there are three different cases that must be calculated due to the definition of $\psi_n(x)$ that is used here.

$$n \text{ odd}, m \text{ even} : \frac{2}{L}\int_{L/2}^{L/2} \cos\left(\pi n x/L\right) \sin\left(\pi m x/L\right) dx = 0$$

Since the integrand is odd in the interval $x \in [-L/2, L/2]$ this integral is 0 by inspection.

And now the other two cases:

$$n, m \text{ even} : \frac{2}{L}\int_{L/2}^{L/2} \sin\left(\pi n x/L\right) \sin\left(\pi m x/L\right) dx = \frac{2}{\pi}\left(\frac{\sin([m-n]\pi/2)}{m-n} - \frac{\sin([m+n]\pi/2)}{m+n}\right) = 0$$

$$n, m \text{ odd} : \frac{2}{L}\int_{L/2}^{L/2} \cos\left(\pi n x/L\right) \cos\left(\pi m x/L\right) dx = \frac{2}{\pi}\left(\frac{\sin([m-n]\pi/2)}{m-n} + \frac{\sin([m+n]\pi/2)}{m+n}\right) = 0$$

Since $m \neq n$ and $(m \pm n)/2$ is even, it follows that $\sin([m \pm n]\pi/2) = 0$ and hence both integrals must be 0.

We have already shown in 1.1 that when $n = m$ the integral is 1, so we can conclude that

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi_n(x)\psi_m^*(x) = 0 \quad \text{when} \quad n \neq m.$$

4. To solve this problem, one needs to compute the integral:

$$P_{1/2}(n) = \int_{-L/4}^{L/4} |\psi_n(x)|^2\, dx$$

The are two cases to consider here depending on the parity of the wavefunction.

$$n \text{ even} : P_{1/2}(n) = \frac{L}{2}\int_{-L/4}^{L/4} \sin^2\left(\pi n x/L\right)\, dx = \frac{1}{2} - \frac{\sin(n\pi/2)}{n\pi} = \frac{1}{2} \text{ since } \sin(n\pi/2) = 0$$

$$n \text{ odd} : P_{1/2}(n) = \frac{L}{2}\int_{-L/4}^{L/4} \cos^2\left(\pi n x/L\right)\, dx = \frac{1}{2} + \frac{\sin(n\pi/2)}{n\pi} = \frac{1}{2} + \frac{(-1)^{(n-1)/2}}{n\pi} \quad \text{since } \sin(n\pi/2) = \pm 1$$

The full solution is therefore

$$P_{1/2}(x) = \begin{cases} 1/2 & \text{for } n \text{ even} \\ 1/2 + (-1)^{(n-1)/2}/n\pi & \text{for } n \text{ odd.} \end{cases}$$

In the case of even n the probability is already the classical result of $1/2$. For odd n we have the additional term, but we notice that as $n \to \infty$ that $(-1)^{(n-1)/2}/n\pi \to 0$, and so the probability also converges to $1/2$. So in the limit of large n the probability no longer depends on the parity of n, and therefore

$$\lim_{n\to\infty} P_{1/2}(n) = 1/2.$$

Aufgabe 2. Schrödingergleichung und Energie-Impuls Beziehung (3 Punkte)

Schreiben Sie die (zeitunabhängige) Schrödingergleichung in einer Dimension für ein konstantes Potential V im Realraum auf. Wenden Sie die Fouriertransformation an und leiten Sie eine Energie-Impuls Beziehung

$$k = \pm\sqrt{2m\left(E - V\right)/\hbar^2} \tag{1}$$

her. Diskutieren Sie die zugehörigen Wellenfunktionen. Schließlich, reflektieren Sie über die Lösungen der Energie-Impuls Beziehung fur den Fall $E < V$. Wie sind hier die 'Wellenfunktionen' zu verstehen?

Lösung Aufgabe 2.

Im Realraum lautet die Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V\right]\psi\left(x\right) = E\psi\left(x\right)$$

Schreibt man die Wellenfunktion in der Fourierdarstellung erhält man

$$\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\left[\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \left(E - V\right)\right]\tilde{\psi}\left(k\right)e^{ikx} = 0$$

Damit lautet die Energie-Impulsbeziehung

$$\hbar^2 k^2/(2m) = E - V \qquad \text{oder} \qquad k = \pm\sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}$$

Die entsprechende Wellenfunktion ist eine ebene Welle.
Die Energie-Impulsbeziehung für $E < V$ besitzt nun komplexe Lösungen mit $\kappa = \pm i\sqrt{2m\left|E - V\right|/\hbar^2}$. Diese führen zu exponentiellen Lösungen, welche als evaneszente Moden zulässig werden.

Aufgabe 3. δ-Potential (7 Punkte)

Im Folgenden betrachten wir ein Potential der Form

$$V\left(x\right) = V_0\delta\left(x\right)\,, \quad \text{wobei} \quad V_0 > 0\,. \tag{2}$$

1. (3 Punkte) In diesem Problem ist die Wellenfunktion stetig, die erste Ableitung ist jedoch nicht stetig. Formulieren Sie die Schrödingergleichung. Berechnen Sie den Sprung der ersten Ableitung der Wellenfunktion, indem Sie die Schrödingergleichung von $-\varepsilon$ bis ε über x integrieren und den Grenzfall $\varepsilon \to 0$ untersuchen.
2. (4 Punkte) Berechnen Sie die Lösung der stationären Schrödingergleichung mit Energie $E > 0$. Formulieren Sie dafür einen Exponentialansatz für die Wellenfunktion in $x < 0$ und in $x > 0$. Nehmen Sie hierbei an, dass die Welle von links einläuft.

Lösung Aufgabe 3.

1. Wir benutzen die Schrödingergleichung in der Form

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\phi(x)$$

Wir integrieren diese Differentialgleichung auf beiden Seiten von $-\varepsilon$ bis ε und erhalten auf der rechten Seite:

$$\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{d}x(V_0\delta(x)-E)\phi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{d}x V_0\delta(x)\phi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{d}x E\phi(x)$$

Da E beschränkt ist, geht der zweite Summand im Grenzübergang $\varepsilon \to 0$ gegen 0. Für den ersten Summanden gilt

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{d}x V_0\delta(x)\phi(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(0) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(0)$$

nach den Eigenschaften der Deltadistribution. Für den linken Teil der Gleichung gilt hingegen

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \mathrm{d}x \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi(\varepsilon) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi(-\varepsilon)$$

Im Grenzübergang $\varepsilon \to 0$ müssen die beiden Ergebnisse jedoch gleich sein. Deshalb macht die Ableitung an der Stelle $x = 0$ einen Sprung von

$$\phi'(x)_+ - \phi'(x)_- = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(0)$$

2. Der Bereich ist in zwei Teilbereiche aufgespalten. Wir wählen den Ansatz

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 & \text{für} \quad x < 0 \\ \psi_2 & \text{für} \quad x > 0 \end{cases} = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx} & \text{für} \quad x < 0 \\ A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} & \text{für} \quad x > 0 \end{cases}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, da wir die Lösung für die Schrödingergleichung mit Potential $V = 0$ (was in diesen beiden Bereichen gelten muss) schon kennen. Dann muss ψ an der Stelle $x = 0$ stetig sein und die Ableitung muss den oben berechneten Sprung aufzeigen. Berechnen wir zuerst einmal die Ableitung

$$\psi' = \begin{cases} ikA_1 e^{ikx} - ikA_1' e^{-ikx} & \text{für} \quad x < 0 \\ ikA_2 e^{ikx} - ikA_2' e^{-ikx} & \text{für} \quad x > 0 \end{cases}$$

Um Verwirrung zu vermeiden: A_1' und A_2' bezeichnen hier lediglich Konstanten, keine Ableitungen (im Gegensatz zu unserer Notation für Wellenfunktionen, wie z.B. ψ'; diese stehen für Ortsableitungen). Nun zu den einzelnen Bedingungen:

- ϕ stetig für $x = 0$: $\psi_1(0) = \psi_2(0) = A_1 + A_1' = A_2 + A_2'$.
- ϕ' springt für $x = 0$: $\psi_2'(0) - \psi_2'(0) = ikA_2 - ikA_2' - ikA_1 + ikA_1' = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(0)$.

Da die Welle nur von links kommen soll, setzen wir $A_2' = 0$. Außerdem können wir die Normierung frei wählen, wehalb wir zur Vereinfachung $A_1 = 1$ wählen. Man erhält dann die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} 1 + A_1' &= A_2 \\ ikA_2 - ik + ikA_1' &= \frac{2m}{\hbar}V_0\psi(0) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 A_2 \end{aligned}$$

Wir setzen die erste Gleichung in die zweite Gleichung ein underhalten:

$$(1 + A_1') - 1 + A_1' = \frac{2m}{ik\hbar^2}V_0(1 + A_1') \quad \Rightarrow \quad 2A_1' = \frac{2m}{ik\hbar^2}V_0 + A_1'\frac{2m}{ik\hbar^2}V_0$$

und daraus die Lösung für A_1' mit

$$A_1' = \frac{mV_0}{ik\hbar^2}\frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar^2}} = \frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar}} - 1$$

Für A_2 erhält man dann durch Einsetzen

$$A_2 = 1 + A_1' = \frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar^2}}$$