Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 07 - Lösungen

Stilianos Louca

1. Juni 2008

Notationen:

- Für $z \in \mathbb{C}$ sei $\overline{z}$: komplex konjugierte.
- Für einen Endomorphismus F bezeichne $E_\lambda(F)$ den Eigenraum von F bzgl. des Eigenwertes λ.

Aufgabe 17

Beginnen mit der Definition von $R = (X_1, X_2, X_3)$ in Ortsdarstellung

$$\langle \vec{r}| X_i |\psi\rangle = x^i \cdot \langle \vec{r} |\psi\rangle$$

und schreiben

$$\langle \vec{p}| X |\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \; e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} x\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \; e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} x\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \; \psi(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \frac{\partial}{\partial p_x} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)}$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \; \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}}_{\langle \vec{p}|\psi\rangle} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \langle \vec{p} |\psi\rangle$$

Analog auch $Y, Z \;\rightarrow\; \langle \vec{p}| X_i |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \langle \vec{p} |\psi\rangle \quad , \quad i = 1, 2, 3$ bzw. formel: $(\tilde{X\psi})(\vec{p}) = i\hbar \nabla_{\vec{p}} \tilde{\psi}(\vec{p})$

Aufgabe 18

Frage

Historische Vorlesung, Prof. Schäfer: Welcher war der grundsätzliche Unterschied zwischen der ursprünglich von Maxwell vorgeschlagenen Theorie und der heutigen Elektrodynamik?

Antwort

Die ursprünglich von Maxwell vorgeschlagene Beschreibung des elektrischen und magnetischen Feldes bezog sich grundsätzlich auf Wirkungen im so genannten Äther. Für Ihn gab es keine Trennung zwischen Materie und Feld, da letzteres nur als Beschreibung der, durch *materieller, mikroskopischer Bewegungen* des Äthers entstehender, Phänomene diente. Erst später wurde die Feldtheorie als *selbständig* und getrennt von jeglicher materieller Ursache erfasst bzw. formuliert. Beispielsweise war das heute als reines *Hilfsfeld* angesehene Vektorpotential $\vec{A}$ von ihm noch als reales Feld, das heißt als tatsächliche mikroskopische *Molekularwirbel* des Äthers, angesehen.

Aufgabe 19

Die allgemeine Schrödingergleichung ist für ein Teilchen gegeben durch

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(x,t)$$

(vgl. Übungsserie 06)

a) Um die stationären Eigenfunktionen $\psi(x,t)$ der Schrödingergleichung zu finden, machen wir den Ansatz

$$\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

und gehen damit in die Differentialgleichung ein:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = i\hbar\varphi(x)\partial_t e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \varphi(x)Ee^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\stackrel{!}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\partial_x^2\varphi(x) + V(x)\varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\rightarrow\ E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi(x) + V(x)\varphi(x)$$

Innerhalb des Intervalls $(0,a)$ $(V=0)$ muss also gelten:

$$\partial_x^2\varphi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x)$$

Die allgemeine Lösung dieser linearen, homogenen Differentialgleichung ist bekanntlich gegeben durch

$$\varphi_1(x) = Ae^{i\Omega x} + Be^{-i\Omega x}\ ,\ \Omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

(vgl. e-Ansatz) Außerhalb des Intervalls $(0,a)$ $(V=\infty)$ ergibt die Differentialgleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi(x) = \underbrace{V(x)}_{\to\infty}\varphi(x) + \hbar\omega\varphi(x)$$

nur Sinn falls $\varphi(x)$ verschwindet. Somit ist die Lösung in $(-\infty,0]\cup[0,\infty)$ gegeben durch $\varphi_2(x)\equiv 0$. Fordern wir die Stetigkeit von φ am Rand von (a,b), das heißt $\varphi_1(0)=\varphi_2(0)=0=\varphi_2(a)=\varphi_1(a)$, so muss

$$A+B=0\ \wedge\ Ae^{ia\Omega} + Be^{-ia\Omega} = 0\ ,\ A,B\in\mathbb{C}$$

sein. Auflösen ergibt $e^{ia\Omega} = e^{-ia\Omega}$. Dies kann nur für $\Omega=0$ oder für rein reelle Ω erfüllt werden, nämlich

$$ia\Omega \stackrel{!}{=} -ia\Omega + 2\pi ni\ ,\ n\in\mathbb{Z}\ \rightarrow\ \Omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\pi n}{a}\ \rightarrow\ \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n^2}{a^2}\ \rightarrow\ E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}$$

Somit ergibt sich im Intervall $(0,a)$:

$$\varphi_n(x) = A_n\left[e^{ix\frac{\pi n}{a}} - e^{-ix\frac{\pi n}{a}}\right] = \underbrace{2iA_n}_{\tilde{A}_n}\sin\left(x\frac{\pi n}{a}\right)$$

Bemerke: Die Lösungen sind für n und $-n$ praktisch identisch (Freiheit der Phase) so dass wir o.B.d.A nur $n\in\mathbb{N}$ betrachten. Der Fall $n=0$ ergibt die triviale Lösung.
Normieren wir ferner die Lösungen, das heißt fordern wir $\langle\psi,\psi\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}}|\varphi(x)|^2\ dx \stackrel{!}{=} 1$, so ergibt sich

$$1 = \left|\tilde{A}\right|^2\cdot\underbrace{\int_0^a\sin^2\left(x\frac{\pi n}{a}\right)\ dx}_{\frac{a}{2}} = \left|\tilde{A}\right|^2\cdot\frac{a}{2}\ \rightarrow\ \left|\tilde{A}\right| = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \rightarrow\ \tilde{A} = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot e^{i\vartheta}\ ,\ \vartheta\in\mathbb{R}$$

das heißt die allgemeine, stationäre, normierte Eigenlösung $\psi(x,t)$ ist gegeben durch

$$\boxed{\psi(x,t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(x\frac{\pi n}{a}\right) \cdot e^{i\vartheta} \cdot e^{-i\frac{\hbar\pi^2 n^2}{2ma^2}t} & : x \in (0,a) \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad , \ \vartheta \in \mathbb{R}, \ n \in \mathbb{N}}$$

wobei ϑ einfach ein fester Phasenterm ist, mit den entsprechenden Energieeigenwerten

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}}$$

Bemerkung: Beginnt man gleich mit der stationären Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + V\varphi = E\varphi$$

die ja auch aus dem Ansatz

$$\psi(x) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

resultiert, so gelangt man auf die gleichen Lösungen für φ und Eigenwerte E_n:

$$\boxed{\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(x\frac{\pi n}{a}\right) & : x \in (0,a) \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad , \ n \in \mathbb{N}}$$

wobei o.B.d.A der eigentlich freie Phasenterm $e^{i\vartheta} = 1$ gesetzt wurde.

b) Normieren zuerst den Zustand χ:

$$1 \overset{!}{=} \langle\chi,\chi\rangle = |N|^2 \int_0^a x^2(a-x)^2 \ dx = |N|^2 \int_0^a \left(x^4 - 2ax^3 + a^2x^2\right) \ dx = \frac{a^5}{30} \cdot |N|^2$$

$$\rightarrow \ |N| = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \ \rightarrow \ N = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \cdot e^{i\gamma} \ , \ \gamma \in \mathbb{R} \ , \ \rightarrow \ \chi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \cdot e^{i\gamma} \cdot x(a-x)$$

und bekommen

Die Zustände $\psi_n(x) := \psi_n(x,0)$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im Raum der stationären Lösungen bzgl. der durch das Skalarprodukt induzierten Norm. Wir entwickeln den Zustand χ nach dem aus der Hilbertraumtheorie bekannten Schema

$$\chi(x) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \underbrace{\langle\psi_n,\chi\rangle}_{c_n} \cdot \psi_n(x) \ , \ \omega_n := \frac{\pi n}{a}$$

$$\langle\psi_n,\chi\rangle = \int_0^a \overline{\psi_n(x)}\chi(x) \ dx = N\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \int_0^a \sin(x\omega_n) \cdot x(a-x) \ dx$$

$$= N\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \left[a\left(-\frac{x}{\omega_n}\cos\omega_n x + \frac{1}{\omega_n^2}\sin\omega_n x\right) - \left(-\frac{x^2}{\omega_n}\cos\omega_n x + \frac{2x}{\omega_n^2}\sin\omega_n x + \frac{2}{\omega_n^3}\cos\omega_n x\right)\right]_0^a$$

$$= N\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \frac{2a^3}{\pi^3 n^3}\left[1-(-1)^n\right] \overset{\text{Normiertes } N}{=} e^{i\gamma} \cdot \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3}\left[1-(-1)^n\right]$$

Speziell für $\gamma = 0$ also:

$$\boxed{c_n = \langle \psi_n, \chi \rangle = \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} \left[1 - (-1)^n\right]}$$

Da die Eigenräume des Hamilton-Operators bzgl. jeden Energieeigenwertes 1-dimensional sind, ist die Wahrscheinlichkeit die Energie E_n zu messen gegeben durch

$$\boxed{w_n = \left|\langle \psi_n, \chi \rangle\right|^2 = \frac{240}{\pi^6 n^6} \left[1 - (-1)^n\right]^2 = \begin{cases} \dfrac{960}{\pi^6 n^6} & : n \text{ ungerade} \\ \\ 0 & : n \text{ gerade} \end{cases}}$$

Bemerke: Die gesamte Wahrscheinlichkeit W *irgendeine* Energie zu messen ergibt sich wie erwartet als

$$W = \sum_{n \in \mathbb{N}} w_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{960}{\pi^6 (2n+1)^6} \overset{\text{Tabellenwerk}}{=} 1$$

c) Der Erwartungswert des Hamiltonoperators im Zustand $\chi(x)$ ist somit gegeben durch

$$\langle H \rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} w_n E_n \cong \sum_{\substack{n \in \mathbb{N} \\ n \text{ ungerade}}} w_n E_n = \sum_{n=0}^{\infty} w_{2n+1} E_{2n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{480\hbar^2}{m a^2 \pi^4 (2n+1)^4} \overset{\text{Hinweis}}{=} \frac{5\hbar^2}{m a^2}$$