Theoretische Physik 4 (Quantentheorie)

Sommersemester 2014

Lösungen zu Übungsblatt 1

Lösung 1.1: Separationsansatz in der Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung lautet

$$\mathrm{i}\hbar(\partial_t\psi)(t,x) = (H\psi)(t,x), \tag{1}$$

wobei wir annehmen, dass H zeitunabhängig ist und somit nur auf das räumliche Argument x wirkt. Der Separationsansatz

$$\psi(t,x) = f(t)\cdot\phi(x) \tag{2}$$

führt dann zu der Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar(\partial_t f)(t)\cdot\phi(x) = f(t)\cdot(H\phi)(x). \tag{3}$$

Hieraus folgt

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{(\partial_t f)(t)}{f(t)} = \frac{(H\phi)(x)}{\phi(x)} = \hbar\omega \tag{4}$$

mit einer Konstanten ω (zunächst in $\mathbb{C}$), da die linke Seite nur von t, die rechte nur von x abhängt. Insbesondere ergibt sich die Differentialgleichung

$$\mathrm{i}(\partial_t f)(t) = \omega f(t) \tag{5}$$

mit der Lösung

$$f(t) = c\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}. \tag{6}$$

Außerdem muss gelten

$$(H\phi)(x) = \hbar\omega\phi(x), \tag{7}$$

d.h. ϕ ist eine Eigenfunktion von H mit Eigenwert $\hbar\omega$. Da H hermite'sch ist, muss also $\omega \in \mathbb{R}$ sein. Wenn wir annehmen, dass $\psi(t,x)$ eine normierte Lösung der Schrödingergleichung ist, so gilt

$$1 = \int |\psi(t,x)|^2\,\mathrm{d}x = |f(t)|^2 \int |\phi(x)|^2\,\mathrm{d}x. \tag{8}$$

Wenn $\phi(x)$ auch normiert ist, $\int |\phi(x)|^2 = 1$, folgt hieraus $|f(t)| = 1$.

Lösung 1.2: Hermitizität des Impulsoperators

Es gilt

$$\langle\phi|P\psi\rangle = \int \phi^*(x)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi(x)\right)\mathrm{d}x \tag{9}$$

$$\overset{(*)}{=} -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\phi^*(x)\right)\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{10}$$

$$= \int\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\phi(x)\right)^*\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{11}$$

$$= \langle P\phi|\psi\rangle, \tag{12}$$

wobei wir bei der partiellen Integration im zweiten Schritt $(*)$ verwendet haben, dass die Wellenfunktionen $\phi(x), \psi(x)$ für $|x| \to \infty$ gegen Null gehen.

Lösung 1.3: Wasserstoff-Atom und De-Broglie-Wellenlänge

Die *klassische* Relation zwischen dem Radius der Kreisbewegung und dem Impuls des Elektrons ergibt sich aus der Bedingung, dass die Zentripetalkraft gleich der Coulomb-Kraft ist,

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} = \frac{p^2}{mr}. \tag{13}$$

Identifiziert man hierin $p = h/\lambda$, so ergibt sich die Bedingung

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{h^2}{\lambda^2 mr}. \tag{14}$$

Wir nehmen weiterhin an, dass der *klassiche* Umfang der Kreisbewegung ein Vielfaches der De-Broglie-Wellenlänge ist, d.h.

$$2\pi r_n = n\lambda, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{15}$$

Einsetzen von $r = r_n$ in Gleichung (14) und Eliminierung von λ ergibt

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\,n^2 = a_0\,n^2 \tag{16}$$

mit $\hbar = h/(2\pi)$, wobei a_0 als Bohrscher Radius bezeichnet wird. Für die Energie ergibt sich aus der *klassischen* Relation

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{17}$$

die Bedingung

$$E_n = -\frac{1}{2}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\,\frac{1}{n^2} \approx -13.6\ \mathrm{eV}\cdot\frac{1}{n^2}. \tag{18}$$

Caveat: Obwohl diese einfache Rechnung zu einem korrekten Ergebnis für die möglichen Energiezustände des Elektrons im Wasserstoffatom führt, sind solche *semiklassischen* Betrachtungen (bei denen klassiche und quantenmechanische Argumente vermischt werden) mit Vorsicht zu genießen und können nur in bestimmten Fällen gerechtfertigt werden. In der Quantenmechanik wird das Elektron im Eigenzustand durch eine – bis auf die Oszillation mit $\exp(-itE_n/\hbar)$ zeitunabhängige – Wellenfunktion beschrieben, es kreist also nicht auf einer definierten Bahn um den Atomkern.

Lösung 1.4: Hamilton-Jacobi-Gleichung und WKB-Näherung

(a) Setzen wir in die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{19}$$

den Ansatz

$$\psi(t,x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}S(t,x)/\hbar} \tag{20}$$

ein und verwenden die Relationen

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\psi, \tag{21}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\psi + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\psi, \tag{22}$$

so ergibt sich die Differentialgleichung für $S(t,x)$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \tag{23}$$

Im klassischen Limes $\hbar \to 0$ verschwindet der zweite Term, und es ergibt sich die Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik.

(b) Der Ansatz $S(t,x) = W(x) - Et$ in Gleichung (23) führt zu der folgenden Differentialgleichung für $W(x)$:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + V = E. \tag{24}$$

Einsetzen der formalen Potenzreihe in $\hbar$

$$W(x) = W_0(x) + \hbar W_1(x) \tag{25}$$

und Vergleich der Koeffizienten ergibt in nullter Ordnung

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_0}{\partial x}\right)^2 + V = E \tag{26}$$

und in erster Ordnung

$$\frac{\partial W_1}{\partial x} = \frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\partial^2 W_0}{\partial x^2} \left[\frac{\partial W_0}{\partial x} \right]^{-1} . \tag{27}$$

Die Differentialgleichung (26) kann explizit gelöst werden:

$$\frac{\partial W_0^{\pm}(x)}{\partial x} = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \equiv \pm p(x), \tag{28}$$

und somit

$$W_0^{\pm}(x) = \pm \int_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' \tag{29}$$

mit einer beliebigen Konstanten $x_0 \in \mathbb{R}$. Durch Rücksubstituieren ergeben sich die näherungsweisen Lösungen der Schrödingergleichung

$$\psi^{\pm}(t,x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tE/\hbar} \exp\left(\pm \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' \right) . \tag{30}$$

Für $E > V(x)$ ist $p(x)$ gleich dem klassischen Impuls, während für $E < V(x)$ die Lösungen (30) exponentiell abfallen bzw. ansteigen. Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung in dieser Näherung "nullter Ordnung" in $\hbar$ hat die Form

$$\psi(t,x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tE/\hbar} \left\{ A \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' \right) + B \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' \right) \right\} \tag{31}$$

mit zwei reellen Konstanten A und B.