

Quantenmechanik I

Übungsblatt 3: Ehrenfest Theorem und gebundene Zustände

JProf. J. Sirker

Fällig: Montag 9. Mai, 13:00 Uhr

1. Das Ehrenfest Theorem und der klassische Limes (7 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie das Ehrenfest Theorem, Gleichung (I.E.12),

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \quad (1)$$

kennengelernt. Diese Gleichung weicht von der klassischen Bewegungsgleichung

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}) |_{\mathbf{r}=\langle \mathbf{r} \rangle} \quad (2)$$

ab, da i. A. $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \neq \nabla V(\mathbf{r}) |_{\mathbf{r}=\langle \mathbf{r} \rangle}$ ist.

Wir wollen im folgenden die Gültigkeit der klassischen Approximation (2) untersuchen und die Größe der Quantenkorrekturen abschätzen. Wir beschränken uns auf eine Dimension, in der sich Gleichung (1) zu

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad (3)$$

vereinfacht. Schätzen Sie die Quantenkorrekturen ab, indem Sie $f(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}$ in eine Taylorreihe um $x = \langle x \rangle$ entwickeln. In welchem Fall wird die klassische Approximation (2) - ebenfalls beschränkt auf eine Dimension - für den Mittelwert exakt?

2. Dreidimensionales Problem (7 Punkte)

Betrachten Sie ein Potential $V(\mathbf{r})$, das sich als Summe dreier Funktionen des Ortsvektors $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ schreiben lässt:

$$V(\mathbf{r}) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3) \quad (4)$$

a) Zeigen Sie, daß die dreidimensionale stationäre Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

durch den Produktansatz $\Psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$ gelöst wird, wenn die ψ_i die eindimensionale Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_i''(x_i) = [E_i - V(x_i)]\psi_i(x_i) \quad (6)$$

erfüllen und für den Eigenwert gilt:

$$E = E_1 + E_2 + E_3. \quad (7)$$

- b) Ein Teilchen bewege sich nun in einem dreidimensionalen Kasten

$$V(x_i) = \begin{cases} 0 & , 0 \leq x_i \leq L_i \\ \infty & , \text{sonst} \end{cases}. \quad (8)$$

Bestimmen Sie mit Hilfe der Lösung des eindimensionalen Kastens aus der Vorlesung und dem vorherigen Aufgabenteil die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte von (5).

(*Hinweis:* die Lösung hängt von drei Quantenzahlen n_1, n_2, n_3 ; $n_i = 1, 2, 3, \dots$ ab).

- c) Bestimmen sie die Entartung der Zustände mit der Gesamtquantenzahl $n^2 = \sum_{i=1}^3 n_i^2 = 3$ und $n^2 = 6$.

3. Gebundene Zustände in einer Dimension (16 Punkte)

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m in einer Dimension unter dem Einfluß eines anziehenden Potentials $V = V(x) \leq 0$, das für $x \rightarrow \pm\infty$ verschwindet (allgemeiner "Potentialtopf"). Die Schrödingergleichung (SG) für stationäre Zustände lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi = E\psi. \quad (9)$$

Wir interessieren uns für gebundene Zustände bei negativer Energie E .

- a) Begründe, daß die Wellenfunktion $\psi(x)$ reell gewählt werden kann. Diskutiere anhand der SG die Lage der Wendepunkte von $\psi(x)$, sowie das unterschiedliche Krümmungsverhalten im klassisch erlaubten bzw. verbotenen Bereich $E \gtrless V(x)$.
- b) Zeige, daß gebundene Zustände in einer Dimension nicht entartet sind.
Hinweis: Betrachte die aus zwei angenommenen Lösungen $\psi_{1,2}(x)$ der SG zu den Eigenwerten E_1 und E_2 gebildete "Wronski-Determinante" $W(x) := \psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x)$. Zeige, daß für zwei gebundene Zustände gleicher Energie die Wronski-Determinante verschwindet und sich deshalb beide Wellenfunktionen bis auf einen Faktor gleichen.
- c) Die Energieeigenwerte für die gebundenen Zustände in einem eindimensionalen Potential seien in aufsteigender Reihenfolge numeriert: $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$. Zeige, daß für die zugehörigen Wellenfunktionen

$\psi_0(x), \psi_1(x), \dots$ gilt: Zwischen zwei aufeinanderfolgenden Nullstellen a, b (mit $a < b$) von $\psi_n(x)$ liegt (mindestens) eine Nullstelle von $\psi_{n+1}(x)$.

Hinweis: Betrachten Sie mit der aus $\psi_n(x)$ und $\psi_{n+1}(x)$ gebildeten Wronski-Determinante $W = \psi_n \psi'_{n+1} - \psi'_n \psi_{n+1}$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} W(b) - W(a) &= -\psi'_n \psi_{n+1} \Big|_a^b = \int_a^b dx W'(x) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{n+1} - E_n) \int_a^b dx \psi_n \psi_{n+1} \end{aligned} \quad (10)$$

d) Betrachten Sie als Beispiel den speziellen Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (11)$$

dessen Streuzustände bereits in der Vorlesung diskutiert wurden. Setzen Sie zur analytischen Lösung $\psi(x) \propto \sin(Kx) + \cos(Kx)$ für den Innenraum $|x| < \frac{a}{2}$ bzw. $\psi(x) \propto \exp(-k|x|)$ für den Außenraum $|x| > \frac{a}{2}$ an. Aus den Anschlußbedingungen bei $\pm \frac{a}{2}$ folgt ein Gleichungssystem zur Bestimmung von K und k , woraus sich die Eigenwerte E der gebundenen Zustände ergeben. Die Gleichungen sind zwar nicht explizit auflösbar, können aber graphisch oder numerisch leicht gelöst werden. Zweckmäßigerweise benutzt man die Abkürzungen $X = \frac{1}{2}aK$ und $Y = \frac{1}{2}ak$.