Grundlagen der Physik 3
Lösung zu Übungsblatt 10

Daniel Weiss

15. Dezember 2010

Inhaltsverzeichnis

Aufgabe 1

Zunächst einmal stellen wir die Wellenfunktion $\Psi(x)$ auf, welche das Elektron im unendlich hohen Kastenpotential beschreibt. Die eindimensionale, stationäre Schrödingergleichung lautet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_{\text{pot}}\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{1}$$

Außerhalb des „Kastens" geht die potentielle Energie ins Unendliche; das Teilchen kann dort also nicht existieren. Innerhalb des Kastens gilt $E_{\text{pot}} = 0$, sodass sich die Schrödingergleichung ein wenig vereinfacht:

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

Mit dem Ansatz

$$\Psi(x) := Be^{ikx} \tag{3}$$

folgt als allgemeine Lösung:

$$\Psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{ikx}\right) \tag{4}$$

mit

$$\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} = k = \frac{n\pi}{a} \tag{5}$$

Dabei wurden die Randbedingungen

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0 \tag{6}$$

benutzt. Die Konstante A wird über die Normierungsbedingung bestimmt

$$\int_0^a \Psi^\star(x)\Psi(x)\,\mathrm{dx} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow A^\star A = \frac{1}{2a} \Rightarrow \begin{cases} A_1 = \sqrt{\frac{1}{2a}} \\ A_2 = -\sqrt{\frac{1}{2a}} \\ A_3 = i\sqrt{\frac{1}{2a}} \\ A_4 = -i\sqrt{\frac{1}{2a}} \end{cases} \tag{7}$$

Es gibt also 4 Konstanten, die die Normierungsbedingung erfüllen. Rechne im Folgenden mit A_4, da diese nach Umschreiben in eine Sinusfunktion eine „schöne“ reelle Normierungskonstante ergibt. Vor vergrößern des Potentialtopfes ist das Elektron im Grundzustand

$$\Psi_1(x) = -i\frac{1}{\sqrt{2a}}\left(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}\right) \tag{8}$$

Anschließend gibt es unendlich viele mögliche Zustandsfunktionen $\Psi'_n(x)$.

$$\Psi'_n(x) = -i\frac{1}{\sqrt{4a}}\left(e^{ik'x} - e^{-ik'x}\right) \tag{9}$$

Da beide Wellenfunktionen antisymmetrisch sind, kann eine durch eine unendliche Fourierreihe der anderen vollständig ausgedrückt werden.

$$\Psi_1(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \Psi'_n(x) \tag{10}$$

Wir nehmen diese Beziehung und setzen sie in die Normierungsbedingung von vorher ein:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{2a} \Psi_1^\star(x)\Psi_1(x)\,\mathrm{dx} \\ \Leftrightarrow 1 &= \int_0^{2a} \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^\star \Psi_n'^\star(x)\gamma_n\Psi'_n(x)\,\mathrm{dx} \\ \Leftrightarrow 1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^\star\gamma_n \underbrace{\int_0^{2a} \Psi_n'^\star(x)\Psi'_n(x)\,\mathrm{dx}}_{=1 \text{ wg. Normierungsbed.}} \\ \Leftrightarrow 1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^\star\gamma_n \end{aligned} \tag{11}$$

Offensichtlich ist also $\gamma_n^\star \gamma_n = P_n$ die Wahrscheinlichkeit, mit der das Elektron sich im Zustand n befindet. Wende also die Fouriertransformation an, um die Vorfaktoren γ_n zu bestimmen:

$$\begin{aligned}
\gamma_n &= \int_0^a \Psi_1^\star(x)\Psi_n'(x)\,\mathrm{dx} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{8a^2}} \int_0^a \left(-e^{ix(k_1+k')} + e^{ix(k_1-k')} + e^{-ix(k_1-k')} - e^{-ix(k_1+k')}\right) \mathrm{dx} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}a} \int_0^a \left(\cos\left[(k_1-k')x\right] - \cos\left[(k_1+k')x\right]\right) \mathrm{dx} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}a} \left[\frac{a}{\pi - \frac{n\pi}{2}} \sin\left[\left(\pi - \frac{n\pi}{2}\right)\frac{x}{a}\right] - \frac{a}{\pi + \frac{n\pi}{2}} \sin\left[\left(\pi + \frac{n\pi}{2}\right)\frac{x}{a}\right]\right]_0^a = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\pi - \frac{n\pi}{2}} \sin\left(\pi - \frac{n\pi}{2}\right) - \frac{1}{\pi + \frac{n\pi}{2}} \sin\left(\pi + \frac{n\pi}{2}\right)\right] \qquad (12)
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit für den Zustand n ist demnach:

$$P_n = \gamma_n^\star \gamma_n = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\pi - \frac{n\pi}{2}} \sin\left(\pi - \frac{n\pi}{2}\right) - \frac{1}{\pi + \frac{n\pi}{2}} \sin\left(\pi + \frac{n\pi}{2}\right)\right]^2 \qquad (13)$$

So steht es in der Aufgabenstellung als Lösung. Es kann jedoch mit

$$\sin\left(\pi - \frac{n\pi}{2}\right) = \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \qquad (14)$$

$$\sin\left(\pi + \frac{n\pi}{2}\right) = -\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \qquad (15)$$

ein wenig vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}
P_n &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\pi - \frac{n\pi}{2}} + \frac{1}{\pi + \frac{n\pi}{2}}\right]^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) \\
\Leftrightarrow P_n &= \left[\frac{1}{2\pi - \frac{n^2\pi}{2}}\right]^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) \qquad (16)
\end{aligned}$$

Aufgabe 2

Ausgehend von der Heißenbergschen Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (17)$$

drücken wir die Ortsunschärfe durch die Impulsunschärfe aus

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} \qquad (18)$$

Die Gesamtenergie der Feder setzt sich aus potentieller und kinetischer Energie zusammen und ist nach dem Energieerhaltungssatz konstant.

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}Dx^2}_{\text{pot. Energie}} + \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{kin. Energie}} = \text{konst.} \tag{19}$$

Die Energieunschärfe ist demnach:

$$\Delta E = \frac{1}{2}D(\Delta x)^2 + \frac{(\Delta p)^2}{2m} \tag{20}$$

Mit Gleichung 18 folgt:

$$\Delta E = \frac{1}{2}D(\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{8(\Delta x)^2 m} \tag{21}$$

Dabei wurde in der letzten Gleichung die kleinstmögliche Ortsunschärfe in Abhängigkeit der Impulsunschärfe eingesetzt; schließlich soll die kleinste Energieunschärfe bestimmt werden. Nun muss das Minimum dieser Gleichung bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\,\Delta E}{\mathrm{d}\,\Delta x} = D\Delta x - \frac{2\hbar^2}{8(\Delta x)^3 m} &\overset{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow D\Delta x &= \frac{2\hbar^2}{8(\Delta x)^3 m} \\ \Leftrightarrow (\Delta x)^2 &= \frac{\hbar}{2\sqrt{Dm}} \end{aligned} \tag{22}$$

Diese Extremalstelle eingesetzt in die Gleichung der Energieunschärfe von oben liefert die minimale Energieunschärfe

$$\Delta E_{\min} = \frac{1}{2}D\frac{\hbar}{2\sqrt{Dm}} + \frac{2\hbar^2\sqrt{Dm}}{8\hbar m} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{D}{m}} = \frac{\hbar}{2}\omega_0 \tag{23}$$

Dabei wurde die aus den Lösungen der Differentialgleichungen des harmonischen Oszillators bereits bekannte Beziehung für die Winkelgeschwindigkeit benutzt:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{D}{m}} \tag{24}$$

Aufgabe 3

a) Der Ansatz für das Lennard-Jones-Potential ist

$$U(r) = -Ar^{-n} + Br^{-m} \tag{25}$$

Dieses soll an der Stelle r_0 ein Minimum mit dem Wert U_0 haben. Es gilt also

$$\begin{aligned} 0 = \quad U'(r_0) = \quad & nAr_0^{-(n+1)} - mBr_0^{-(m+1)} && (26) \\ U_0 = \quad U(r_0) = \quad & -Ar_0^{-n} + Br_0^{-m} && (27) \end{aligned}$$

Aus Gleichung 27 folgt für B:

$$B = U_0 r_0^m + Ar_0^{m-n} \tag{28}$$

Dies in Gleichung 26 eingesetzt liefert für A:

$$A = \frac{U_0}{\frac{n}{m} - 1} r_0^n \tag{29}$$

Damit kann nun B genauer bestimmt werden:

$$B = \frac{U_0}{1 - \frac{m}{n}} r_0^m \tag{30}$$

b) Das Oszillatorpotential hat die Form einer Parabel. Im Allgemeinen lässt es sich als

$$V = \frac{1}{2} C (r - r_0)^2 + U_0 \tag{31}$$

anschreiben (V steht für die potentielle Energie des Oszillators). Dieses soll nun an der Stelle r_0 exakt dem Lennard-Jones-Potential entsprechen und in näherer Umgebung dieses möglichst gut approximieren. Die erste Ableitung dieses Potentials muss demnach an der Stelle r_0 auch 0 sein. Weiterhin setzen wir voraus, dass die zweite Ableitung ebenfalls der des Lennard-Jones-Potentials im Punkt r_0 entspricht. Da die zweite Ableitung ein Maß der Änderung der ersten Ableitung, oder auch der „Krümmung der Kurve“ ist, verpassen wir damit dem Oszillatorpotential die ähnlichst-mögliche Form zum Lennard-Jones-Potential.

$$\begin{aligned} V''(r_0) &= C && (32) \\ U''(r_0) &= -n(n+1)Ar_0^{-(n+2)} + m(m+1)Br_0^{-m+2)} = \\ &= -\frac{mnU_0}{r_0^2} = C && (33) \end{aligned}$$

c) Einsetzen der Werte liefert mit

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{m}} \tag{34}$$

als Ergebnis:

$$E_1 = \frac{\hbar}{2} \omega = 8{,}84 \cdot 10^{19} \mathrm{J} = 5{,}5 eV \tag{35}$$

Die Gleichung der Energie E_1 wurde bereits in Aufgabe 2 hergeleitet.

Aufgabe 4

Wir nehmen die Wellenfunktion, die bereits in Aufgabe 1 hergeleitet wurde (a sei die Länge des Potentialtopfes)

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) \tag{36}$$

und bilden das Skalarprodukt mit $\Psi_m(x)$:

$$\int_0^\infty \Psi_n^\star(x)\Psi_m(x)\,\mathrm{d}\,x = \frac{2}{a}\int_0^\infty \sin(k_n x)\sin(k_m x)\,\mathrm{d}\,x \tag{37}$$

Da die Wellenfunktion in der Aufgabenstellung auch von der Zeit abhängt, aber nur nach x integriert wird, kann der Zeitanteil herausgezogen werden:

$$\Xi(x,t) \quad =: \quad \Psi(x)\Phi(t) \tag{38}$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty \Xi^\star(x,t)\Xi(x,t)\,\mathrm{d}\,x \quad = \quad \int_0^\infty \Psi^\star(x)\Psi(x)\underbrace{\Phi^\star(t)\Phi(t)}_{=:A(t)}\,\mathrm{d}\,x = \tag{39}$$

$$= \quad A(t)\int_0^\infty \Psi^\star(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}\,x \tag{40}$$

Im Folgenden betrachten wir nur den Integranden, der für die Betrachtung der Orthogonalität ausreichend ist. Wie in Aufgabe 1 gezeigt, lässt sich Gleichung 37 folgendermaßen schreiben (wobei nur bis zum Rand des Potentialtopfes integriert wird):

$$\frac{1}{a}\int_0^a (\cos[(k_n - k_m)x] - \cos[(k_m + k_n)x])\,\mathrm{d}\,x \tag{41}$$

Die Argumente der Kosinus sind:

$$(k_n - k_m)x \quad = \quad (n-m)\frac{\pi}{a}x =: D \tag{42}$$

$$(k_n + k_m)x \quad = \quad (n+m)\frac{\pi}{a}x =: E \tag{43}$$

Für den Fall, dass $n = m$ ist, gilt:

$$D \quad = \quad 0 \tag{44}$$

$$E \quad = \quad 2n\frac{\pi}{a}x \tag{45}$$

Es ist also hier:

$$\frac{1}{a}\int_0^a \left(\cos(0) - \cos\left(2n\pi\frac{x}{a}\right)\right)\mathrm{d}\,x = \frac{1}{a}\left[x - \underbrace{\frac{a}{2n\pi}\sin\left(2n\pi\frac{x}{a}\right)}_{=0}\right]_0^a = 1 \tag{46}$$

Für den Fall, dass $n \neq m$:

$$D = d\pi \frac{x}{a} \tag{47}$$

$$E = (d + 2m)\pi \frac{x}{a} \tag{48}$$

mit $d := n - m$. Nun gilt:

$$\frac{1}{a} \int_0^a \left(\cos\left(d\pi \frac{x}{a} \right) - \cos\left((d+2m)\pi \frac{x}{a} \right) \right) \mathrm{d}\, x = 0 \tag{49}$$

Hier wurde verwendet:

$$\begin{aligned} \cos\left((d+2m)\pi \frac{x}{a} \right) = \frac{1}{2} \left[e^{i(d+2m)\pi \frac{x}{a}} + e^{-i(d+2m)\pi \frac{x}{a}} \right] = \\ = \frac{1}{2} \left[e^{id\pi \frac{x}{a}} \cdot e^{i2m\pi \frac{x}{a}} + e^{-i(d+2m)\pi \frac{x}{a}} \cdot e^{-i2m\pi \frac{x}{a}} \right] = \\ = \frac{1}{2} \left[e^{id\pi \frac{x}{a}} \cdot \left(\underbrace{e^{i2m\pi}}_{=1} \right)^{\frac{x}{a}} + e^{-id\pi \frac{x}{a}} \cdot \left(\underbrace{e^{-i2m\pi}}_{=1} \right)^{\frac{x}{a}} \right] = \\ = \cos\left(d\pi \frac{x}{a} \right) \end{aligned} \tag{50}$$