Theoretische Physik III
– Quantenmechanik (SoSe 2015) –

Übungsblatt 4 (24 Punkte)

Ausgabe: 11.05.15 – Abgabe: 18.05.15 – Besprechung: n.V.

▷ **Aufgabe 4.1** – Wellenmechanik am δ-Potential (6 Punkte)

Die stationäre Schrödingergleichung

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + b\delta(x-a)\psi \tag{1}$$

mit δ "Deltafunktion" ist die einfachste Aufgabe, das man sich in einer Dimension vorstellen kann.

(a) Man leite die sog. *Anschlussbedingung* bei $x = a$ her,

$$\psi'(a_+) - \psi'(a_-) = \frac{2mb}{\hbar^2}\psi(a) \tag{2}$$

worin $\psi'(a_\pm) = \lim_{\varepsilon\to 0_+} \frac{d\psi}{dx}\big|_{x=a\pm\varepsilon}$.

Hinweis: Integrieren Sie die stationäre Schrödingergleichung $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}$. Benutzen Sie, dass ψ beschränkt und stetig, auch bei $x = a$.

(b) Zeigen Sie, dass für $b < 0$ ("anziehendes Potential") ein gebundener Zustand an einer Energie E_b von der Größenordnung $E_b \sim -\frac{mb^2}{\hbar^2}$ existiert. Machen Sie sich ein Bild der Wellenfunktion.

(c) Konstruieren Sie die Lösung der Schrödingergleichung für eine Energie $E > 0$ und geben Sie Reflexions- und Transmissions-Koeffizienten an.

▷ **Aufgabe 4.2** – Kronig-Penney Modell (8 Punkte)

Ein Elektron in einem Metall "sieht" ein periodisches Potential. Obgleich seine Bewegung unbegrenzt ist, sind aufgrund der Periodizität des Potentials nur bestimmte Energiebänder erlaubt.

(a) Bestimmen Sie die elektronische Bandstruktur für das sog. Kronig-Penney Modell

$$V(x) = \alpha \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(x - ja) \tag{3}$$

Hinweis: Erinnern Sie sich beizeiten an das Bloch'sche Theorem. Die Blochfunktion berechnen Sie zweckmäßigerweise im Intervall $(0, a]$. Da steht dann nur eine Deltafunktion, und zwar am rechten Intervallende. Die verarzten Sie dann einfach über die Anschlussbedingung im δ-Potential.

(b) Machen Sie sich ein Bild der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons für stationäre Zustände an der oberen bzw. unteren Bandkante im "anziehenden" Potential, $\alpha < 0$.

▷ **Aufgabe 4.3** – Vertauschende Operatoren (6 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie gelernt, dass vertauschende Operatoren einen Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen haben. Im Zusammenhang mit Symmetrien des Hamiltonoperators wird diese Aussage ausgenutzt, um die stationäre Schrödingergleichung zu lösen.

(a) Zeigen Sie, dass für ein freies Teilchen der Hamiltonoperator in drei Dimensionen mit den drei Komponenten $\hat{p}_i$ des Impulsoperators kommutiert. Wie steht es mit dem Verschiebeoperator $\hat{T}_{\vec{a}}$ um einen Vektor $\vec{a}$?

(b) Erinnern Sie sich daran, dass ebene Wellen Eigenfunktionen zum Impulsoperator sind, und bestimmen Sie die Wirkung einer Verschiebung im Ortsraum um den Vektor $\vec{a}$ auf eine ebene Welle. Verifizieren Sie die Operatorbeziehung

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \exp(-\mathrm{i}\vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}/\hbar) \tag{4}$$

(c) Überprüfen Sie, dass im Kronig-Penney-Modell aus Gl.(3) der Hamiltonoperator mit Verschiebungen $\hat{T}_j$ um die Gittervektoren ja, $j \in \mathbb{Z}$ kommutiert und bestimmen Sie die Struktur der Eigenfunktionen und Eigenwerte von der Operatoren $\hat{T}_j$ (Stichwort "Bloch-Theorem").

▷ **Aufgabe 4.4** – Ehrenfest-Theoreme (4 Punkte)

Paul Ehrenfest formulierte in den 1920er Jahren zwei Theoreme, die die Verbindung zwischen der gerade entstehenden Quantenmechanik und der klassischen Mechanik herstellen. Dazu betrachten wir ein Teilchen in einer Dimension mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$.

(a) **(Ehrenfest'sches Theorem I)** Die klassische Bewegungsgleichung der Newton'schen Mechanik gilt *im Mittel*,

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{q}\rangle = \langle\hat{F}\rangle\,, \qquad \hat{F} = -\frac{\partial V(\hat{q})}{\partial\hat{q}} \tag{5}$$

Für den Beweis vergewissern Sie sich zuerst, dass $[V(\hat{q}), \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\partial V/\partial\hat{q}$ gilt.

(b) **(Ehrenfest'sches Theorem II)** Für genügend langsam veränderliche Kraftfelder,

$$\varepsilon := \frac{F''(q)}{2F(q)} \delta_\psi^2 q \ll 1 \tag{6}$$

(δ_ψ^2 ist die Varianz im Zustand ψ, und F'' ist die zweite Ableitung von F) bewegt sich der Erwartungswert $\langle q \rangle_\psi := q$ gemäß der Newton'schen Bewegungsgleichung, $m\ddot{q} = F(q)$.

Hinweis: Machen Sie eine Taylorentwicklung von $F(\hat{q})$ um den Mittelwert q und arbeiten Sie in der niedrigsten Ordnung in ε.