Prof. Dr. Tobias Brandes
Dr. Judith Lehnert, Dr. Marten Richter, Mathias Hayn, Alexander Kraft
Sina Böhling, Jonas Rezacek

1. Übungsblatt – Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Abgabe: Di. 3. Mai 2016 vor der Vorlesung im Hörsaal EW 201

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden **Zwischenschritte** *und* **ausführliche Kommentare** *zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es Punkte! Die Zettel müssen in 3er-Gruppen abgegeben werden. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und das Tutorium an!*

Aufgabe 1 (2+2=4 Punkte): *Delta-Distribution & Zustandsdichte*
In der Vorlesung wurde die Zustandsdichte für ein System in einem Volumen V durch

$$\varrho(\omega) = \frac{1}{V}\sum_{n=1}^{N}\delta(\omega - \omega_n) \tag{1}$$

definiert. Hier sind ω_n die Energien der N Zustände. Im thermodynamischen Limes wird aus den diskreten Energien die kontinuierliche Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k})$.

(a) Bevor Sie die Zustandsdichte für ein konkretes System berechnen, zeigen Sie zunächst, dass für die Delta-Distribution folgende Relation gilt:

$$\delta\big(f(x)\big) = \sum_{m=1}^{M}\frac{\delta(x - x_m)}{|f'(x_m)|}. \tag{2}$$

Hier wird über die M einfachen Nullstellen x_m der Funktion $f(x)$ summiert.

Hinweis: Zerlegen Sie das Integral $\int_{\mathbb{R}}\delta\big(f(x)\big)g(x)\,\mathrm{d}x$ in Intervalle $[a_n, a_{n+1})$, in welchen jeweils nur eine Nullstelle x_n liegt und entwickeln Sie $f(x)$ in eine Taylor-Reihe um das jeweilige x_n. Hier ist $g(x)$ eine Testfunktion.

(b) Berechnen Sie nun die Zustandsdichte für ein nicht-relativistisches freies Teilchen in drei Raumdimensionen. Dieses hat die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Verwenden Sie dazu das Ergebnis aus der vorherigen Teilaufgabe. Rechnen Sie dabei wie im Skript im thermodynamischen Limes.

Aufgabe 2 (2+3+2=7 Punkte): *Fourier-Transformation & freie Schrödinger-Gleichung*

Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen in drei Raumdimension lautet:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t). \tag{3}$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung im Ortsraum mit der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r},t)$ im Ortsraum. Die (nur im Ort) Fourier-Transformierte $\tilde{\psi}(\mathbf{k},t)$ der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r},t)$ ist definiert über:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k},t) \equiv \int_{\mathbb{R}^3}\psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\mathrm{d}^3r. \tag{4}$$

Diese wird als Wellenfunktion im Impulsraum bezeichnet. Entsprechend gilt für die Rücktransformation:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3}\tilde{\psi}(\mathbf{k},t)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\mathrm{d}^3k. \tag{5}$$

(a) Stellen Sie die Schrödinger-Gleichung im Impulsraum auf. Diese ist eine Differentialgleichung nur noch in der Zeit für $\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t)$.

(b) Betrachten Sie nun einen beliebigen Anfangswert $\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t = 0)$ und lösen Sie die Differentialgleichung aus (a). Zeigen Sie damit, dass die allgemeine Lösung im Ortsraum gegeben ist durch:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t' = 0)\, \psi(\mathbf{r}', t' = 0)\, \mathrm{d}^3 r', \tag{6}$$

mit

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t')}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{t - t'}\right], \quad t > t'. \tag{7}$$

(c) Zeigen Sie, dass sich die Funktion U aus Aufgabenteil (b) allein durch die klassische Wirkung $S = S(\mathbf{r}, t; , \mathbf{r}', t') = \int_{t'}^{t} L(\mathbf{r}(\tau), \dot{\mathbf{r}}(\tau), \tau)\, \mathrm{d}\tau$ des freien Teilchen ausdrücken lässt:

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sqrt{\det\left[\frac{1}{2\pi i\hbar}\frac{-\partial^2 S}{\partial x'_m \partial x_n}\right]}\, \mathrm{e}^{iS/\hbar}. \tag{8}$$

Dabei ist $\det[A_{n,m}]$ die Determinante der Matrix A.

Aufgabe 3 (3+1+3+3+2=12 Punkte): *Gauß'sches Wellenpaket*
In dieser Aufgabe soll die zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpakets untersucht werden. Dazu betrachten wir ein Gauß'sches Wellenpaket in einer Raumdimension.

(a) Benutzen Sie die allgemeine Lösung aus Aufgabe (2b) (Passen Sie das Ergebnis auf eine Raumdimension an!), um $\psi(x, t)$ für den speziellen Anfangswert $\psi(x, t = 0) = N^{-1/2} \exp[-\frac{x^2}{2\Delta^2} + ik_0 x]$ zu berechnen. Zeigen Sie, dass sich die Wellenfunktion in der Form

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{N}}\frac{\Delta}{\Delta(t)} \exp\left[-\frac{(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2}{2\,\Delta(t)^2}\right] \exp\left[ik_0\left(x - \frac{1}{2}\frac{\hbar k_0}{m}t\right)\right] \tag{9}$$

darstellen lässt. Dabei ist $\Delta(t) = \Delta\sqrt{1 + i\hbar t/(m\Delta^2)}$.

(b) Bestimmen Sie N, so dass die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ auf Eins normiert ist.
Hinweis: Die Norm eines Zustands bleibt unter der Dynamik der Schrödinger-Gleichung erhalten.

(c) Berechnen Sie den Mittelwert $\langle x \rangle$ und die Varianz $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ des Ortes in diesem Zustand. Hier ist $\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\, A\, \psi(x, t)\, \mathrm{d}x$ der Erwartungswert der Größe A im normierten Zustand ψ.
Hinweis: Beachten Sie, dass $\Delta(t)$ komplex ist.

(d) Zeichnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x, t)|^2$ für verschiedene k_0 und Zeiten t. Diskutieren Sie in diesem Zusammenhang Ihre Ergebnisse aus Teilaufgabe (c). Was ist die physikalische Bedeutung von k_0?

(e) Nun beschreibe dieses Gauß'sche Wellenpaket ein Teilchen der Masse m. Die Größe des Teilchens sei durch $\sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$ bestimmt. Nach welcher Zeit ist die Größe (i) eines Elektrons, (ii) eines Fußballs um 10% angewachsen, wenn man sie durch die freie Schrödinger-Gleichung beschreiben würde? Diskutieren Sie Ihr Ergebnis.