Universität Regensburg, Fakultät für Physik
Prof. Dr. Tilo Wettig WS 2023/24

Übungen zur Quantenmechanik für LA und Nanoscience
Blatt 7 (für die Übungen in der Woche 04.12.-08.12.)

---

1 Gebundene Zustände

a) Betrachten Sie ein System mit der Grundzustandsenergie E_0 (d.h. E_0 ist der kleinste Eigenwert des Hamilton-Operators). Zeigen Sie, dass jeder normierte Zustand $|\psi\rangle$ die Bedingung $\langle\psi|H|\psi\rangle \geq E_0$ erfüllt.

Hinweis: Entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in der Eigenbasis von H.

b) Zeigen Sie, dass jedes rein attraktive Potential in einer Dimension wenigstens einen gebundenen Zustand besitzt.

Hinweis: Da V attraktiv ist, definieren wir $V(\infty) = 0$ und haben damit $V(x) = -|V(x)|$ für alle x. Betrachten Sie nun Wellenfunktionen der Form $\psi_\alpha(x) = (\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$ mit $\alpha > 0$ und berechnen Sie $E(\alpha) = \langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle$. Schreiben Sie $E(\alpha) = \langle T\rangle_\alpha + \langle V\rangle_\alpha$ und finden Sie eine obere Grenze für $\langle V\rangle_\alpha$, indem Sie über eine endliche Region in der Nähe von $x = 0$ integrieren. Zeigen Sie, dass $E(\alpha)$ durch eine geeignete Wahl von α negativ gemacht werden kann. Erinnern Sie sich dann an den ersten Teil dieser Aufgabe.

2 Ultralokale Potentiale

a) Betrachten Sie ein eindimensionales System mit einem repulsiven Potential der Form $V(x) = \lambda\delta(x)$ mit $\lambda > 0$.

i) Zeigen Sie, dass die erste Ableitung der Wellenfunktion $\psi(x)$ die Gleichung

$$\Delta\psi'(0) \equiv \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$$

erfüllt, wobei m die Masse des Teilchens ist, das durch $\psi(x)$ beschrieben wird.

Hinweis: Integrieren Sie die Schödinger-Gleichung über das Intervall $[-\varepsilon, +\varepsilon]$ und betrachten Sie den Grenzfall $\varepsilon \to 0$.

ii) In Analogie zum Fall der Potentialstufe können wir die Wellenfunktion $\psi(x)$ aufteilen in einen einlaufenden und einen reflektierten Anteil,

$$\psi(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad (x < 0)\,,$$

sowie einen transmittierten Anteil

$$\psi(x) = Te^{ikx} \quad (x > 0)\,.$$

Wie hängen k und E zusammen (für $E > 0$)? Berechnen Sie die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sowie die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten $|R|^2$ und $|T|^2$.

Hinweis: Die Wellenfunktion muss am Ursprung stetig sein.

b) Betrachten Sie nun das attraktive Potential $V(x) = -\lambda\delta(x)$ mit $\lambda > 0$.

i) Wir beschränken uns zunächst auf Lösungen mit $E > 0$. Berechnen Sie die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sowie $|R|^2$ und $|T|^2$.

ii) Zeigen Sie, dass das attraktive Potential genau einen gebundenen Zustand hat, d.h. einen Zustand mit negativer Energie

$$E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} \,.$$

Hinweis: Lösen Sie die Schrödinger-Gleichung außerhalb des Potentials für $E < 0$ und behalten Sie nur diejenige Lösung, die am Ursprung stetig ist und für $x \to \pm\infty$ das richtige Verhalten zeigt. Bestimmen Sie danach $\Delta\psi'(0)$ und verwenden Sie eine Gleichung ähnlich wie in Teilaufgabe a)i).

3 Drei Theoreme

a) Betrachten Sie einen hermiteschen Operator $H(\lambda)$, der von einem Parameter λ abhängt, so dass seine Eigenvektoren $|\psi_E(\lambda)\rangle$ und Eigenwerte $E(\lambda)$ auch von λ abhängen. Beweisen Sie das *Feynman-Hellmann-Theorem*

$$\langle\psi_E(\lambda)|\frac{dH(\lambda)}{d\lambda}|\psi_E(\lambda)\rangle = \frac{dE(\lambda)}{d\lambda} \,.$$

Nehmen Sie dabei an, dass der Zustand $|\psi_E(\lambda)\rangle$ normiert ist, d.h. $\langle\psi_E(\lambda)|\psi_E(\lambda)\rangle = 1$.

Hinweis: Beginnen Sie mit $E(\lambda) = \langle\psi_E(\lambda)|H(\lambda)|\psi_E(\lambda)\rangle$.

b) Zeigen Sie, dass die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H in der Ortsbasis rein reell gewählt werden können.

Hinweis: Betrachten Sie die Schrödinger-Gleichung für $\psi(x)$ und $\psi^*(x)$.

c) Zeigen Sie, dass in eindimensionalen Systemen gebundene Zustände nicht entartet sein können.

Dazu nehmen wir zunächst an, dass wir zwei linear unabhängige Lösungen $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ der Schrödinger-Gleichung zum gleichen Eigenwert E des Hamilton-Operators haben, also

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) + V(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x) \,,$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x) \,.$$

„Linear unabhängig“ bedeutet $\psi_1(x) \neq a\psi_2(x)$, wobei a eine beliebige Konstante ist.

i) Zeigen Sie, dass die Größe $W(x)$, genannt Wronski-Determinante und gegeben durch

$$W(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) \,,$$

konstant ist, d.h. $W(x) = c$ mit einer Zahl c.

Hinweis: Zeigen Sie, dass die Ableitung der Wronski-Determinante verschwindet.

ii) Welchen Wert hat c?

Hinweis: Benutzen Sie das Verhalten von $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ im Unendlichen.

iii) Zeigen Sie mit Hilfe von Teilaufgabe ii), dass $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ proportional sind, im Widerspruch zu unserer ursprünglichen Annahme.