Quantenmechanik I, WS 2023/24

Prof. Dr. Michael Bonitz

Übungszettel 4 (Abgabe: Montag 13.11. 10:00)

1. **Wiederholung (mündlich)**: *Schrödingergleichung, 1d-Kastenpotential*

   (a) Diskutieren Sie die Ableitung der Schrödingergleichung und die dabei gemachten Annahmen. Erläutern Sie die physikalische Interpretation der Gleichung.

   (b) Diskutieren Sie die mathematischen Eigenschaften der Schrödingergleichung.

   (c) Definieren Sie die Breite der Wahrscheinlichkeitsdichte eines Mikroteilchens. Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen der Breite im Ortsraum und im Impulsraum.

   (d) Diskutieren Sie die Lösung der Schrödingergleichung für den Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden.

   (e) Diskutieren Sie die Lösung der Schrödingergleichung und die Stetigkeitsanforderungen an die Wellenfunktion für ein Teilchen in einem stückweise stetigen Potential (z.B. Potential bestehend aus n Kästen endlicher Höhe/Tiefe).

2. **Aufgaben (20 Punkte)**: *Zeitabhängige und stationäre Schrödingergleichung*

   (a) Ein freies Teilchen befinde sich in einem Zustand, der eine Überlagerung von Funktionen, $\tilde{\psi}(k) = Ce^{-\Gamma|k-k_0|-ikx_0}$, mit verschiedenen kontinuierlichen k darstellt, wobei C die Normierungskonstante ist. Hier bezeichnet k die Wellenzahl (rell, eindimensionales Problem). Die Wellenfunktion im Ortsraum ("Wellenpaket") ergibt sich durch Fourier-Transformation

$$\psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k)\, e^{ikx}. \tag{1}$$

   i. Man bestimme die Normierungskonstant C.

   ii. Man berechne die Wellenfunktion $\psi(x)$ und diskutiere den Zusammenhang zwischen dem Parameter Γ und der Breite des Wellenpakets. Für letztere benutze man die Standardabweichung σ_x. Hinweis: als eine grobe Abschätzung kann für σ_x auch FWHM benutzt werden, d.h. die Breite des Peaks von $|\psi(x)|^2$ auf halber Höhe.

   iii. Man zeichne die Realteil der Funktionen $\psi(x)$ und $\tilde{\psi}(k)$.

   iv. Man berechne die Erwartungswerte im k-Raum, $\langle k \rangle_k$ und $\langle k^2 \rangle_k$, wobei $\langle \ldots \rangle_k$ definiert ist durch $\langle A \rangle_k = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}^*(k) A(k) \tilde{\psi}(k)$.

   v. Man vergleiche die Standardabweichung σ_k, definiert durch:

$$\sigma_k = \sqrt{\langle k^2 \rangle_k - [\langle k \rangle_k]^2} \tag{2}$$

   mit der Breite des Wellenpakets, die in Punkt (ii) berechnet wurde.

vi. Untersuchen Sie die Abhängigkeit des Produktes $\sigma_x \sigma_k$ von Γ.

(Punkte: 12)

(b) Zeigen Sie, dass die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen die Energie erhält. Dazu betrachte man die lokale Energiedichte, $\epsilon(\mathbf{r},t) = \psi^*(\mathbf{r},t)\hat{H}\psi(\mathbf{r},t)$, leite für sie eine Bilanzgleichung der Form

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_\epsilon = 0\,, \tag{3}$$

ab und find einen Ausdruck für die Energiestromdichte $\mathbf{j}_\epsilon$. Für die Energieerhaltung untersuche man die Gesamtenergie, d.h. das Integral von ϵ über den ganzen Raum. (8 Punkte).

3. **Zusatzaufgabe: Quantenmechanik nach Bohm und Madelung.**

Für ein quantenmechanisches Teilchen in einem Potential $V(\mathbf{r},t)$ zeige man, dass sich die Schrödingergleichung auf die Form hydrodynamischer Gleichungen für Dichte n und Impuls $\mathbf{p}$ bringen lässt und vergleiche mit den Gleichungen der klassischen Hydrodynamik. Man verwende für die Wellenfunktion den Ansatz

$$\psi(\mathbf{r},t) = A(\mathbf{r},t)\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r},t)\right\}, \qquad A, S \in \mathcal{R}\,, \tag{4}$$

und identifiziere $n = A^2$, sowie $\mathbf{p} = \nabla S$.