Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik 23. April 2014

Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD
Mathias Hayn, Judith Lehnert, Andrea Vüllings, Samuel Brem, Zeynep Cetinkaya

2. Übungsblatt – Quantenmechanik I

Abgabe: Mo. 5. Mai 2014 bis 10:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

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

Aufgabe 4 (3+2+3=8 Punkte): *Kontinuitätsgleichung*

In der Vorlesung wurde aus der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen der Masse m in den (elektromagnetischen) Potentialen $\phi(\boldsymbol{r}, t)$ und $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r}, t) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = 0$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\boldsymbol{r}, t) = |\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2im}(\Psi^* \boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*) - \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\Psi^*\Psi$ hergeleitet.

(a) Zeigen Sie, dass die Kontinuitätsgleichung invariant unter Eichtransformation mit einer hinreichend oft differenzierbaren und stetigen Funktion $G(\boldsymbol{r}, t)$ ist. **Hinweis:** Die entsprechenden Eichtransformationen finden Sie in der Vorlesung.

(b) Zeigen Sie unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit $\int \mathrm{d}^3r|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ zeitlich erhalten ist. Nehmen Sie dabei an, dass die Wahrscheinlichkeitsstromdichte hinreichend schnell abfällt, d.h. $|\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)|r^2 \to 0$ für $r \to \infty$. Interpretieren Sie das Ergebnis physikalisch.

(c) Berechnen Sie für eine auf das Volumen V normierte ebene Welle die Wahrscheinlichkeitsstromdichte und führen Sie diese auf die anschauliche Form $\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v}$ zurück.

Aufgabe 5 (3+3+2+4+5=17 Punkte): *Symmetrisches Pöschl-Teller-Potential*

Die gebundenen Zustände eines Teilchens in der eindimensionalen Potentialmulde der Form

$$V(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)} \qquad \text{mit} \qquad U_0 = \frac{s(s+1)}{2m}(\hbar\alpha)^2 \tag{1}$$

können analytisch bestimmt werden. Erarbeiten Sie diese Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\psi = E\psi$ und stellen Sie die Energieeigenwerte $E < 0$ in Abhängigkeit von der Potentialtiefe U_0 dar.

Arbeitsprogramm:

(a) Zeigen Sie, dass die Schrödinger-Gleichung durch die Substitution $y = \tanh(\alpha x)$ und die Notation $\epsilon = \sqrt{-2mE/(\hbar\alpha)^2}$ in die verallgemeinerte Legendre'sche Differentialgleichung

$$\frac{d}{dy}\left[(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}\right] + \left[s(s+1) - \frac{\epsilon^2}{1-y^2}\right]\psi = 0$$

übergeht.

(b) Führen Sie weiterhin die Funktion w durch $(1-y^2)^{\epsilon/2}w(y) = \psi(y)$ ein und setzen Sie $u = (1-y)/2$. Leiten Sie damit aus der Schrödinger-Gleichung die Differentialgleichung

$$u(1-u)w''(u) + [c - (a+b+1)u]\, w'(u) - abw(u) = 0$$

für die Funktion $w(u)$ ab, wobei $a = \epsilon - s$, $b = \epsilon + s + 1$ und $c = \epsilon + 1$ gelten muss.

(c) Die Lösung dieser Differentialgleichung, die zu einer für $x \to -\infty$ gegen Null konvergierenden Wellenfunktion führt, heißt *hypergeometrische Funktion* ${}_2F_1(a, b, c, u)$. Damit diese Lösung auch zu einer für $x \to +\infty$ gegen Null konvergierenden Wellenfunktion führt, muss $a = \epsilon - s$ eine nichtpositive ganze Zahl sein. Bestimmen Sie mit dieser Kenntnis die möglichen negativen Energieeigenwerte.

(d) Berechnen Sie die Energieeigenwerte E_n für ein Elektron der Masse $m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31} kg$ und $\alpha = 10^9 m^{-1}$ in einem Bereich $0 < U_0 < 1eV$. Stellen Sie das Ergebnis mit einem Computerprogramm Ihrer Wahl grafisch dar.

(e) Berechnen Sie für die Fälle $s = 2$ und $s = 3$ im Pöschl-Teller-Potential (Gleichung (1)) alle normierten Wellenfunktionen $\psi(x)$ zu den existierenden negativen Energieeigenwerten. Drücken Sie die Lösungen durch elementare Funktionen (z.B. rationale, trigonometrische, e-Funktion,...) aus. Sie dürfen bei der Berechnung Mathematica verwenden (bitte den Computercode mit abgeben) und denken Sie an die Rücktransformation. Stellen Sie die Ergebnisse mit einem Computerprogramm Ihrer Wahl grafisch dar.

Bemerkungen:

- Die Lösung der in (b) angebenen Differentialgleichung läßt sich in *Mathematica* mit dem Befehl DSolve bestimmen:

$$\begin{aligned} \text{In}[1] = {} & \text{DSolve}[u(1-u)w''[u] + (c - (a+b+1)u)w'[u] - abw[u] == 0, w[u], u] \\ \text{Out}[1] = {} & \{\{w[u] \to C[1]\text{Hypergeometric2F1}[a, b, c, u] \\ & \quad + (-1)^{1-c} u^{1-c} C[2]\text{Hypergeometric2F1}[1 + a - c, 1 + b - c, 2 - c, u]\}\}\,. \end{aligned}$$

- Die hypergeometrische Funktion ${}_2F_1$ kann folgendermaßen als Reihe dargestellt werden:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k k!} z^k.$$

  Dabei bedeuten:

$$\begin{aligned} (a)_k &= a(a+1)(a+2)\dots(a+k-1), \\ (b)_k &= b(b+1)(b+2)\dots(b+k-1), \\ (c)_k &= c(c+1)(c+2)\dots(c+k-1) \qquad \text{mit} \qquad k \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

- Diese Potenzreihe besitzt den Konvergenzradius $R = 1$.