

1. Aufgabe: Eindimensionale Schrödingergleichung I

- a) Das Betragsquadrat der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Teilchens im quantenmechanischen Sinn. Die Wellenfunktion ψ ist Element des Hilbertraums, d.h. $\psi(x, t)$ ist normierbar und es gilt deshalb

$$\psi(x, t) \rightarrow 0$$

für $x \rightarrow \pm\infty$. Somit kann $\psi(x, t)$ als Fourierintegral dargestellt werden. Mit dem folgenden Fourieransatz

$$\psi(x, t) = \int dk \exp(ikx) \tilde{\psi}(k, t) \quad (*)$$

ergibt sich eingesetzt in die eindimensionale Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t)$$

die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \int dk \exp(ikx) \dot{\tilde{\psi}}(k, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dk (ik)^2 \exp(ikx) \tilde{\psi}(k, t) \\ \Leftrightarrow \dot{\tilde{\psi}}(k, t) + \frac{\hbar k^2}{2m} i \tilde{\psi}(k, t) &= 0 \end{aligned}$$

Mittels dem Fourieransatz wird also die partielle Differentialgleichung 2.Ordnung im Ortsraum in eine gewöhnliche Differentialgleichung 1.Ordnung im Impulsraum transformiert. Die allgemeine Lösung dieser gewöhnlichen Differentialgleichung folgt somit leicht zu

$$\tilde{\psi}(k, t) = C(k) \exp(-i \frac{\hbar k^2}{2m} t) = C(k) \exp(-i\omega t)$$

wobei die Integrationskonstante $C(k)$ eine beliebige Funktion von k ist und die Kreisfrequenz ω gegeben ist durch

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Schliesslich folgt durch Einsetzen von $\tilde{\psi}(k, t)$ in (*) die allgemeine Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung:

$$\psi(x, t) = \int dk \exp(ikx) \tilde{\psi}(k, t) = \int dk a(k) \exp[i(kx - \omega t)]$$

Wir haben in dieser Schlussformel die beliebige Funktion $C(k)$ mit $a(k)$ bezeichnet.

- b) Die Kreisfrequenz ω ist proportional zum Quadrat des Wellenvektors k und ist gegeben durch

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

- c) Die Gruppengeschwindigkeit ist die Änderung der Kreisfrequenz ω bezüglich der Veränderung von k .

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} \Rightarrow v_G = \frac{\hbar k}{m}$$

Die Phasengeschwindigkeit ist dabei

$$v_{Ph} = \frac{\omega}{k} \Rightarrow v_{Ph} = \frac{\hbar k}{2m}$$

- d) Gemäss den de Broglie Relationen gilt

$$E = \hbar\omega \quad ; \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (siehe b)) gilt für die Energie (*)

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Verwenden wir $\hbar k = mv_G$ (aus c)), folgt

$$E = \frac{m}{2} v_G^2 \quad \text{und} \quad p = mv_G$$

Wenn wir übrigens in (*) $\hbar k = p$ einsetzen, finden wir die klassische Relation

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

zwischen Energie und Impuls eines freien Teilchens.

2.Aufgabe: Eindimensionale Schrödingergleichung II

- a) Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung ist der Form

$$\psi(x, t) = \int dk a(k) \exp(ikx - i\omega t)$$

Speziell für $t = 0$ gilt

$$\psi(x, 0) = \int dk a(k) \exp(ikx)$$

Die Fourieramplitude $a(k)$ lässt sich also aus dem Anfangszustand $\psi(x, 0)$ gewinnen, d.h.

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int dx \exp(-ikx) \psi(x, 0)$$

Durch das Einsetzen des konkreten Anfangszustand

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2c^2} + ik_0x\right)$$

ergibt sich für $a(k)$

$$\begin{aligned} a(k) &= \frac{A}{2\pi} \int dx \exp\left[-\frac{x^2}{2c^2} + (k_0 - k)ix\right] \\ &= \frac{A}{2\pi} \int dx \exp\left\{-\frac{1}{2c^2}[x + c^2i(k - k_0)]^2 - \frac{c^2}{2}(k - k_0)^2\right\} \\ &= \frac{A}{2\pi} \exp\left[-\frac{c^2}{2}(k - k_0)^2\right] \int dx \exp\left\{-\frac{1}{2c^2}[x + c^2i(k - k_0)]^2\right\} = \% \end{aligned}$$

Wähle die Substitution $z = x + c^2i(k - k_0) \Rightarrow dz = dx$. Somit erhält man schliesslich mittels Gauss-Integral

$$\% = \frac{A}{2\pi} \exp\left[-\frac{c^2}{2}(k - k_0)^2\right] \int dz \exp\left(-\frac{z^2}{2c^2}\right)$$

die gesuchte Fourieramplitude zu

$$a(k) = A \sqrt{\frac{c^2}{2\pi}} \exp\left[-\frac{c^2}{2}(k - k_0)^2\right]$$

- b) Durch das Einsetzen der in 2a) gefundenen Fourieramplitude $a(k)$ in die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung aus 1a) folgt die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ zum Zeitpunkt t . Unter der Verwendung der Beziehung

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

folgt somit

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dk a(k) \exp[i(kx - \omega t)] \\ &= A \sqrt{\frac{c^2}{2\pi}} \int dk \exp\left[-\frac{c^2}{2}(k - k_0)^2 + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right] \\ &= A \sqrt{\frac{c^2}{2\pi}} \int dk \exp\left[-\frac{c^2}{2}k^2 + c^2kk_0 - \frac{c^2}{2}k_0^2 + ikx - it\frac{\hbar k^2}{2m}\right] \end{aligned}$$

$$= A \sqrt{\frac{c^2}{2\pi}} \exp\left(-\frac{c^2}{2} k_0^2\right) \int dk \exp\left[-\frac{1}{2}\left(c^2 + it \frac{\hbar}{m}\right) k^2 + (c^2 k_0 + ix)k\right] = \%$$

Durch das Benützen des Tipps

$$\int dk \exp\left(-\frac{\lambda}{2} k^2 + zk\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} \exp\left(\frac{z^2}{2\lambda}\right)$$

folgt schliesslich

$$\begin{aligned} \% &= A \sqrt{\frac{c^2}{2\pi}} \exp\left(-\frac{c^2}{2} k_0^2\right) \sqrt{\frac{2\pi}{c^2 + it \frac{\hbar}{m}}} \exp\left[\frac{(c^2 k_0 + ix)^2}{2(c^2 + it \frac{\hbar}{m})}\right] \\ &= \frac{A}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{mc^2}}} \exp\left[\frac{(c^2 k_0 + ix)^2}{2c^2(1 + \frac{i\hbar t}{mc^2})} - \frac{k_0^2 c^2}{2}\right] \end{aligned}$$

3.Aufgabe: Wellenpaket

Die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zum Zeitpunkt t am Ort x zu finden, ist gegeben durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion $\psi(x, t)$.

- a) Ein Gausspaket der Breite c zentriert um x_0 ist von der Form

$$\exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{c^2}\right)$$

Die Gruppengeschwindigkeit berechnet sich dabei aus der zeitlichen Änderung von x_0 . Betrachtet man das gegebene $|\psi(x, t)|^2$ sieht man, dass sich x_0 mit gleichmässiger Geschwindigkeit bewegt:

$$x_0 = \frac{k_0 \hbar t}{m} \Rightarrow v_G = \frac{k_0 \hbar}{m}$$

Dass das Paket mit dieser Geschwindigkeit propagiert, ist auch aus der allgemeinen Theorie ersichtlich. Das Paket ist zusammengesetzt aus Beiträgen, die k Vektoren haben, welche um k_0 konzentriert sind (siehe $a(k)$ in Aufgabe 2a)).

Die Propagierungsgeschwindigkeit ist die Gruppengeschwindigkeit

$$v_G = \left. \frac{dw}{dk} \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

- b) Betrachtet man erneut das gegebene $|\psi(x, t)|^2$, so identifiziert man mit Hilfe der Form des Gausspakets eine monoton wachsende Breite gegeben durch

$$a(t) := c \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 c^4}}$$

Das gegebene $|\psi(x, t)|^2$ bewegt sich für Zeiten $t > 0$ gleichmässig in positive x -Richtung und fliesst aufgrund der monoton wachsenden Breite aus 3b) ebenfalls für Zeiten $t > 0$ auseinander und wird immer breiter. Damit $|\psi(x, t)|^2$ stets auf 1 normiert bleibt, verkleinert sich bei zunehmender Breite die Amplitude. Wie diese Wellenpakete von der Form eines Gausspakets bei unterschiedlichen Zeiten t zueinander stehen ist in der unteren Abbildung visualisiert.

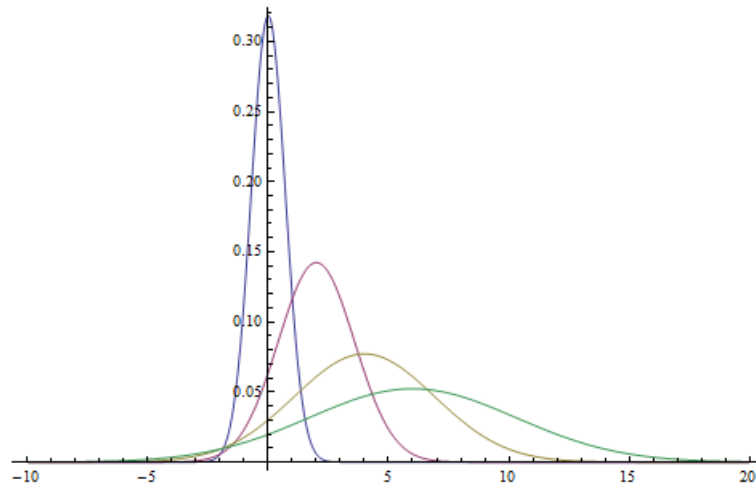


Abb.1: $|\psi(x, t)|^2$ zu unterschiedlichen Zeiten t