Übungen zur Theoretischen Physik 3 für das Lehramt L3 – Blatt 3

Aufgabe 1 (10 Punkte): Potentialtopf

Wir betrachten die eindimensionale Bewegung eines Teilchens auf der x-Achse in einem Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad x \in [0, a], \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \tag{1}$$

Damit ist die Bewegung des Teilchens auf das Intervall $x \in [0, a]$ beschränkt, und die Wellenfunktionen müssen die Randbedingungen

$$\psi(a) = \psi(0) = 0 \tag{2}$$

erfüllen. Der Hamilton-Operator ist innerhalb des Topfes der eines freien Teilchens

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2. \tag{3}$$

Bemerkung: In den Übungen bezeichnen wir Operatoren mit einem „Dach" über dem Symbol (also hier den Hamilton-Operator mit $\hat{H}$ statt mit $\mathbf{H}$), weil sich das beim Rechnen besser notieren lässt als fettgedruckte Symbole wie im Manuskript.

(a) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass $\hat{H}$ auf dem Hilbert-Raum der über das Intervall $[0, a]$ quadratintegrablen Funktionen $\mathrm{L}^2([0, a])$ selbstadjungiert ist.

Hinweis: Sie müssen zeigen, dass für zwei beliebige Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 stets $\left\langle \psi_1 \middle| \hat{H}\psi_2 \right\rangle = \left\langle \hat{H}\psi_1 \middle| \psi_2 \right\rangle$ gilt, wobei das Skalarprodukt zwischen zwei Wellenfunktionen durch

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_0^a \mathrm{d}x \, \psi_1^*(x) \psi_2(x) \tag{4}$$

definiert ist.

Lösung: Da $\hat{H} = -\hbar^2/(2m)\partial_x^2$ ist, genügt es zu zeigen, dass ∂_x^2 selbstadjungiert ist. Dies gelingt durch zweimalige partielle Integration:

$$\begin{aligned}
\left\langle \psi_1 \middle| \partial_x^2 \psi_2 \right\rangle &= \int_0^a \mathrm{d}x \, \psi_1^*(x) \partial_x^2 \psi_2(x) \\
&= \psi_1^*(x) \partial_x \psi_2(x) \,\Big|_{x=0}^{x=a} - \int_0^a \mathrm{d}x [\partial_x \psi_1^*(x)] \partial_x \psi_2(x) \\
&\stackrel{(2)}{=} -\int_0^a \mathrm{d}x [\partial_x \psi_1^*(x)] \partial_x \psi_2(x) \\
&= -\partial_x \psi_1^*(x) \psi_2(x) \Big|_{x=0}^{x=a} + \int_0^a \mathrm{d}x [\partial_x^2 \psi_1^*(x)] \psi_2(x) \\
&\stackrel{(2)}{=} \int_0^a \mathrm{d}x [\partial_x^2 \psi_1(x)]^* \psi_2(x) \\
&= \left\langle \partial_x^2 \psi_1 \middle| \psi_2 \right\rangle,
\end{aligned} \tag{5}$$

und das war zu zeigen.

(b) (3 Punkte) Bestimmen Sie alle Energie-Eigenzustände und die dazugehörigen Energie-Eigenwerte aus der entsprechenden Eigenwertgleichung

$$\hat{H} u_E(x) = E u_E(x). \tag{6}$$

Lösung: Setzen wir den Hamilton-Operator (3) in (6) ein, erhalten wir die DGL

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_E''(x) = E u_E(x) \Rightarrow \; u_E''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_E(x). \tag{7}$$

Für jedes $E > 0$ ist offenbar die allgemeine Lösung

$$u_E(x) = A\cos(k_E x) + B\sin(k_E x) \quad \text{mit} \quad k_E = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{8}$$

mit Konstanten A und B. Diese sind so zu bestimmen, dass die Randbedingungen (2) erfüllt sind. Aus $u_E(0) = 0$ folgt, dass $A = 0$ ist. Damit die zweite Randbedingung $u_E(a) = 0$ für $B \neq 0$ erfüllt ist, muss

$$k_n a = n\pi \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N} = \{1, 2, \ldots\} \tag{9}$$

sein. Die dazugehörigen Energie-Eigenwerte sind

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \tag{10}$$

(c) (3 Punkte) Normieren Sie die Energie-Eigenzustände so, dass

$$\int_0^a \mathrm{d}x \, |u_E(x)|^2 = 1 \tag{11}$$

ist.

Lösung: Wir müssen das Integral

$$\langle u_n \,|\, u_n \rangle = \int_0^a \mathrm{d}x |B|^2 \sin^2(k_n x) \tag{12}$$

berechnen. Dazu verwenden wir das Doppelwinkeltheorem für den Cosinus:

$$\cos(2k_n x) = \cos^2(k_n x) - \sin^2(k_n x) = 1 - 2\sin^2(k_n x) \;\Rightarrow\; \sin^2(k_n x) = \frac{1}{2}[1 - \cos(2k_n x)]. \tag{13}$$

Damit wird

$$\begin{aligned} \langle u_n \,|\, u_n \rangle &= \frac{1}{2}|B|^2 \int_0^a \mathrm{d}x[1 - \cos(2k_n x)] = \frac{1}{2}|B|^2 \left[x - \frac{1}{2k_n}\sin(2k_n x)\right]_{x=0}^{x=a} = \frac{a}{2}|B|^2 \stackrel{!}{=} 1 \\ \Rightarrow B &= \sqrt{\frac{2}{a}}. \end{aligned} \tag{14}$$

Die normierten Eigenzustände sind also

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x). \tag{15}$$

(d) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass erwartungsgemäß die Energie-Eigenzustände zu verschiedenen Energieeigenwerten orthogonal sind, d.h.

$$\int_0^a \mathrm{d}x\, u_{E_1}^*(x) u_{E_2}(x) = 0 \quad \text{falls} \quad E_1 \neq E_2. \tag{16}$$

Lösung: Es gilt

$$\left\langle u_{n_1} \middle| u_{n_2} \right\rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \mathrm{d}x \sin(k_{n_1} x) \sin(k_{n_2} x). \tag{17}$$

Hier verwenden wir das Additionstheorem für den Cosinus

$$\cos[(k_{n_1} + k_{n_2})x] = \cos(k_{n_1} x)\cos(k_{n_2} x) - \sin(k_{n_1} x)\sin(k_{n_2} x) \tag{18}$$

bzw.

$$\cos[(k_{n_1} - k_{n_2})x] = \cos(k_{n_1} x)\cos(k_{n_2} x) + \sin(k_{n_1} x)\sin(k_{n_2} x) \tag{19}$$

Subtrahiert man (18) von (19), erhält man

$$2\sin(k_{n_1} x)\sin(k_{n_2} x) = \cos[(k_{n_1} - k_{n_2})x] - \cos[(k_{n_1} + k_{n_2})x] \tag{20}$$

Damit wird für $n_1 \neq n_2$

$$\begin{aligned} \left\langle u_{n_1} \middle| u_{n_2} \right\rangle &= \frac{1}{a} \int_0^a \mathrm{d}x \left\{ \cos[(k_{n_1} - k_{n_2})x] - \cos[(k_{n_1} + k_{n_2})x] \right\} \\ &= \frac{1}{a} \left\{ \frac{\sin[(k_{n_1} - k_{n_2})x]}{k_{n_1} - k_{n_2}} + \frac{\sin[(k_{n_1} + k_{n_2})x]}{k_{n_1} + k_{n_2}} \right\}_{x=0}^{x=a} = 0, \end{aligned} \tag{21}$$

und das war zu zeigen.

(e) (Zusatzaufgabe: 3 Extrapunkte) Zeigen Sie, dass für diese (etwas überidealisierte und daher unphysikalische!) Situation keine Impulsobservable definiert werden kann, weil der Impulsoperator $\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\partial_x$ nicht selbstadjungiert ist. Verwenden Sie dazu, dass die oben ausgerechneten Energie-Eigenzustände eine vollständige Basis auf dem Hilbert-Raum der über das Intervall $[0, a]$ quadratintegrablen Funktionen, die die Randbedingungen (2) erfüllen, bilden, und dass für alle u_E die Anwendung von $\hat{p}$ aus diesem Raum herausführt, d.h. $\hat{p} u_E(x)$ nicht mehr die Randbedingungen erfüllt.

Lösung: Es ist

$$\hat{p} u_n(x) = -\mathrm{i}\hbar u_n'(x) = -\mathrm{i}\hbar \sqrt{\frac{2}{a}} k_n \cos(k_n x). \tag{22}$$

Damit ist aber $\hat{p} u_n(x)$ für $x = 0$ nicht Null, und folglich liegt $\hat{p} u_n(x)$ nicht mehr im Bereich der Wellenfunktionen für dieses Problem, da es nicht die Randbedingungen (2) erfüllt und damit $\hat{p}$ kein selbstadjungierter Operator auf diesem speziellen Hilbert-Raum ist.