

Aufgabe 5.1 Unschärferelation

Die Heisenbergsche Unschärferelation besagt, dass für einen beliebigen Zustand ω und die Observablen \hat{q} und \hat{p} aufgrund ihrer Vertauschungsrelation $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ folgende Ungleichung gilt:

$$\Delta\hat{q}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{4}, \quad (1)$$

wobei $\Delta\hat{q}$ die Varianz der Wahrscheinlichkeitsverteilung bei Messung der Observable \hat{q} im Zustand ω ist. In dieser Aufgabe soll gezeigt werden, dass nicht für alle Observablen, die die obige Vertauschungsrelationen erfüllen, automatisch eine solche Unschärferelation gilt.

Betrachte die Winkelobservablen $\hat{\theta}$ und $\hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{d}{d\theta}$ auf dem Raum $C^2([0, 2\pi])$, der zweimal stetig differenzierbaren Funktionen auf dem Intervall $[0, 2\pi]$. Auf diesem ist das folgende Skalarprodukt gegeben:

$$\langle u, v \rangle := \int_0^{2\pi} u^*(\theta)v(\theta)d\theta \quad (2)$$

Nun soll gezeigt werden, dass diese Observablen keiner Unschärferelation genügen und warum dies der Fall ist.

- Bestimme den Definitionsbereich des Operators \hat{p}_θ auf dem dieser selbstadjungiert ist. Berechne den Kommutator $[\hat{\theta}, \hat{p}_\theta]$.
- Berechne die (normierten) Eigenfunktionen $\phi_m(\theta)$ von \hat{p}_θ .
- Berechne die Varianzen $\Delta\hat{p}_\theta$ und $\Delta\hat{\theta}$ für die Zustände die durch die Eigenfunktionen $\phi_m(\theta)$ gegeben sind.
- Das Produkt der Varianzen ist also Null, obwohl die Observablen nicht vertauschen. Wo liegt das Problem? Betrachte dazu den Definitionsbereich der Observable p_θ .

Aufgabe 5.2 Harmonischer Oszillator

Hier soll der eindimensionale harmonische Oszillator, anders als in der Vorlesung, mit der sogenannten Polynommethode gelöst werden. Der Hamiltonoperator in der Ortsdarstellung ist gegeben durch

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (3)$$

- Stelle die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Wellenfunktion $\psi(x)$ auf und führe dimensionslose Variablen q für den Ort und ε für die Energie ein. Führe außerdem eine neue Funktion $\chi(q) = \psi(q)e^{q^2/2}$ ein, stelle die Differentialgleichung für $\chi(q)$ auf und begründe die obige Wahl von $\chi(q)$ durch Betrachtung des asymptotischen Verhaltens von $\psi(q)$.
- Löse die Differentialgleichung

$$\chi''(q) - 2q\chi'(q) + (2\varepsilon - 1)\chi(q) = 0 \quad (4)$$

durch den Potenzreihenansatz $\chi(q) = \sum_{m=0}^{\infty} q^m (a_{2m} q^{2m})$ und begründe die Form dieses Ansatzes. Dies führt auf Gleichungen für die Koeffizienten a_{2m} .

- Betrachte den Quotienten aufeinanderfolgender Koeffizienten für grosse m und begründe damit warum die möglichen Energien ε quantisiert sind. Bestimme die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators. Bestimme und skizziere die ersten drei Eigenfunktionen.

Aufgabe 5.3 Kastenpotential und Energiemessung

In dieser Aufgabe sollen die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamiltonoperators für ein Teilchen mit Masse m im Kastenpotential gefunden werden. Für eine gegebene Wellenfunktion soll dann die Wahrscheinlichkeitsverteilung für eine Energiemessung berechnet werden. Das Potential ist gegeben durch

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} . \quad (5)$$

- (a) Gib Eigenwerte und -funktionen (normiert) an. Löse dazu die Schrödingergleichung unter Berücksichtigung der Randbedingungen, die sich aus dem Potential ergeben.
- (b) Sei nun das Teilchen im Kasten zu einem gegebenen Zeitpunkt t_0 durch die Wellenfunktion

$$\psi(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt{a}} \quad (6)$$

beschrieben. Zu diesem Zeitpunkt wird eine Energiemessung durchgeführt. Berechne mit welcher Wahrscheinlichkeit welche Ergebnisse auftreten.

Aufgabe 5.4 Molekülbindung

Betrachte ein stark vereinfachtes Modell für ein Elektron, das ein Orbital in einem zweiatomigen Molekül (z.B. H_2^+) besetzt. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 [\delta(x - a) + \delta(x + a)] . \quad (7)$$

- (a) Gib einen Ansatz für die Berechnung der Eigenfunktionen zu negativen Eigenwerten $E < 0$ an und unterscheide dabei die drei durch die δ -Potentiale getrennten Bereiche. Bestimme die Stetigkeits- und Sprungbedingungen an den Bereichsgrenzen.
- (b) Betrachte gerade Eigenfunktionen ($\psi(x) = \psi(-x)$) und ungerade ($\psi(x) = -\psi(-x)$) getrennt. Leite in beiden Fällen eine Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte her und überlege wie diese grafisch zu lösen sind. (Es gibt eine gerade Eigenfunktion mit $E < 0$ und höchstens eine ungerade.)
- (c) Was hat das mit Molekülbindung zu tun? Skizziere außerdem grob die beiden möglichen Lösungstypen, um zu verstehen wie sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für die beiden Fälle unterscheiden.