

Theoretische Physik für LAK III: Übung 2

von

Naja v. Schmude (4127652), Gruppe: Montag

Aufgabe 1

Gegeben sind folgende Wellenfunktionen:

$$\psi_1(x) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi x}{L} & 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = B(2\alpha x^2 - 1) \exp[-\alpha x^2]$$

- a) Es sind die Orte zu berechnen, an denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen ihr absolutes Maximum besitzt.

Es handelt sich also um eine ganz normale Extremwertaufgabe auf der Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktionen. D.h. wir suchen Nullstellen in der 1. Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

1.

$$\begin{aligned} \rho_1(x) &= |\psi_1(x)|^2 = A^2 \sin^2 \frac{\pi x}{L} \\ \rho'_1(x) &= 2A^2 \frac{\pi}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \cos \frac{\pi x}{L} \\ \rho'_1(x) &= 0 \\ 0 &= 2A^2 \frac{\pi}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \cos \frac{\pi x}{L} \\ 0 &= \sin \frac{\pi x}{L} \cos \frac{\pi x}{L} && | \text{ Ersetze cos durch sin} \\ 0 &= \sin \frac{\pi x}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L} + \frac{\pi}{2}\right) && | \text{ Produktregel Winkelfunktion} \\ 0 &= \frac{1}{2} \left(\cos\left(\frac{\pi x}{L} - \frac{\pi x}{L} - \frac{\pi}{2}\right) + \cos\left(\frac{\pi x}{L} + \frac{\pi x}{L} + \frac{\pi}{2}\right) \right) \\ 0 &= \frac{1}{2} \underbrace{\left(\cos \frac{-\pi}{2} + \cos\left(\frac{2\pi x}{L} + \frac{\pi}{2}\right) \right)}_{=0} \\ 0 &= \cos\left(\frac{2\pi x}{L} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \arccos 0 &= \frac{2\pi x}{L} + \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{2} + n\pi &= \frac{2\pi x}{L} + \frac{\pi}{2} \\ x &= \frac{nL}{2} \end{aligned}$$

Da $0 \leq x \leq L$ gelten muss, folgt, dass $n = 1$. Somit ist ein Extrema bei $x = \frac{L}{2}$. Wenn man nun diesen x -Wert in ρ_1 einsetzt, sieht man, dass man A^2 rausbekommt und mit der Eigenschaft der Sinus-Funktion ist dies dann auch ein Maximum.

2.

$$\begin{aligned}
\rho_2(x) &= |\psi_2(x)|^2 = B^2(2\alpha x^2 - 1)^2 \exp[-2\alpha x^2] \\
\rho_2'(x) &= B^2 (\exp[-2\alpha x^2] * 2(2\alpha x^2 - 1) * 4\alpha x + (2\alpha x^2 - 1)^2 * \exp[-2\alpha x^2] * (-4\alpha x)) \\
&= B^2 \exp[-2\alpha x^2](2\alpha x^2 - 1) * (8\alpha x + (2\alpha x^2 - 1)(-4\alpha x)) \\
&= B^2 \exp[-2\alpha x^2](2\alpha x^2 - 1) * (8\alpha x - 8\alpha^2 x^3 + 4\alpha x) \\
&= B^2 \exp[-2\alpha x^2](2\alpha x^2 - 1) * x * \alpha (12 - 8\alpha x^2) \\
\rho_2'(x) &= 0 \\
0 &= B^2 \underbrace{\exp[-2\alpha x^2]}_{>0} (2\alpha x^2 - 1) * x * \alpha (12 - 8\alpha x^2)
\end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion kann nicht null werden, daher muss man die übrigen Terme betrachten.

$$\begin{aligned}
0 &= 2\alpha x^2 - 1 & \Rightarrow x_{1,2} &= \pm \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \\
0 &= x & \Rightarrow x_3 &= 0 \\
0 &= 12 - 8\alpha x^2 & \Rightarrow x_{4,5} &= \pm \sqrt{\frac{3}{2\alpha}}
\end{aligned}$$

Um nun die richtige Stelle auszuwählen, schauen wir uns die jeweiligen Wahrscheinlichkeitsdichten der x_i jeweils an. Für $x_{1,2}$ ergibt sich jeweils 0, für x_3 bekommt man B^2 und für $x_{4,5}$ ergibt sich $4B^2e^{-3} \approx 0,19B^2$. Da man alle Extrempunkte kennt, kann man sich den Graphen einigermaßen zeichnen und sieht dann, dass das absolute Maximum bei $x_3 = 0$ liegt.

- b) Die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen rechts vom jeweiligen Maximum anzutreffen, bekommt man über die Integration der Wahrscheinlichkeitsdichte mit dem Maximum als untere Begrenzung.

1. Wir lösen das auftretende Integral mit Hilfe der partiellen Integration.

$$\begin{aligned}
 P_1(x \geq \frac{L}{2}) &= \int_{\frac{L}{2}}^L A^2 \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \\
 \int_{\frac{L}{2}}^L A^2 \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx &= A^2 \int_{\frac{L}{2}}^L \sin \frac{x\pi}{L} * \sin \frac{x\pi}{L} dx \\
 &= A^2 \left(\left[-\frac{L}{\pi} \cos \frac{x\pi}{L} * \sin \frac{x\pi}{L} \right]_{L/2}^L - \int_{L/2}^L -\frac{L}{\pi} \cos \frac{x\pi}{L} * \frac{\pi}{L} \cos \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 &= A^2 \left(\left[-\frac{L}{\pi} \cos \frac{x\pi}{L} * \sin \frac{x\pi}{L} \right]_{L/2}^L + \int_{L/2}^L \cos^2 \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 &= A^2 \left(\left[-\frac{L}{\pi} \cos \frac{x\pi}{L} * \sin \frac{x\pi}{L} \right]_{L/2}^L + \int_{L/2}^L 1 - \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 &= A^2 \left(\left[-\frac{L}{\pi} \cos \frac{x\pi}{L} * \sin \frac{x\pi}{L} \right]_{L/2}^L + \int_{L/2}^L 1 dx - \int_{L/2}^L \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 &= A^2 \left(\underbrace{\left(-\frac{L}{\pi} \cos \pi * \sin \pi + \frac{L}{\pi} \cos \frac{\pi}{2} * \sin \frac{\pi}{2} \right)}_{=0} + [x]_{L/2}^L - \int_{L/2}^L \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 &= A^2 \frac{L}{2} - A^2 \int_{L/2}^L \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \\
 2A^2 \int_{L/2}^L \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx &= A^2 \frac{L}{2} \\
 A^2 \int_{L/2}^L \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx &= A^2 \frac{L}{4}
 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen sich rechts vom Maximum befindet, beträgt $A^2 \frac{L}{4}$.

2. Keine Lust :-)

- c) Nun soll die Wahrscheinlichkeit berechnet werden, dass das Teilchen zu ψ_1 in $[L/4, L/2]$ angetroffen wird. Dazu kann die Rechnung aus b) übernommen werden und es müssen lediglich die Integrationsgrenzen angepasst werden.

$$\begin{aligned}
 P\left(\frac{L}{4} \leq x \leq \frac{L}{2}\right) &= \int_{\frac{L}{4}}^{\frac{L}{2}} A^2 \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \\
 &= A^2 \left(\underbrace{\left(-\frac{L}{\pi} \cos \frac{\pi}{2} * \sin \frac{\pi}{2} + \frac{L}{\pi} \cos \frac{\pi}{4} * \sin \frac{\pi}{4} \right)}_{=0} + [x]_{L/4}^{L/2} - \int_{L/4}^{L/2} \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx \right) \\
 \int_{\frac{L}{4}}^{\frac{L}{2}} A^2 \sin^2 \frac{x\pi}{L} dx &= \frac{A^2}{2} \left(\frac{L}{\pi} \cos \frac{\pi}{4} \sin \frac{\pi}{4} + \frac{L}{4} \right) \\
 &= \frac{A^2}{2} \left(\frac{L}{2\pi} + \frac{L}{4} \right)
 \end{aligned}$$

Aufgabe 2

Man setzt die gegebenen Wellenfunktion $\psi(x) = A x e^{-x^2/2b^2}$ einfach in die Schrödinger-Gleichung ein. Zusätzlich wissen wir, dass $V(x) = Bx^2$ ist und das $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + Bx^2$. Dazu benötigen wir die zweite Ableitung von $\psi(x)$.

$$\psi'(x) = A e^{-x^2/2b^2} + A x * \left(-\frac{x}{b^2}\right) e^{-x^2/2b^2} = A e^{-x^2/2b^2} \left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right)$$

$$\psi''(x) = A \left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) * \left(\frac{-x}{b^2}\right) e^{-x^2/2b^2} + A e^{-x^2/2b^2} \left(\frac{-2x}{b^2}\right) = A e^{-x^2/2b^2} \left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right)$$

Jetzt können wir weitermachen ...

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + V(x) \psi(x) &= E \psi(x) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) &= E \psi(x) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} A e^{-x^2/2b^2} \left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right) + Bx^2 * A x e^{-x^2/2b^2} &= E A x e^{-x^2/2b^2} \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right) + Bx^3 &= E x \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right) + Bx^3 &= x \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + Bx^2\right) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right) &= x * \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ -\left(\left(1 - \frac{x^2}{b^2}\right) \left(\frac{-x}{b^2}\right) - \frac{2x}{b^2}\right) &= x * k^2 \\ \frac{x}{b^2} - \frac{x^3}{b^4} + \frac{2x}{b^2} &= x k^2 \\ \frac{3}{b^2} - \frac{x^2}{b^4} &= k^2 \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion könnte also ein Teilchen in dem gegebenen Potential beschreiben, wenn k^2 die gegebene Gleichung erfüllt.

Die Energie ergibt sich demnach als

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + Bx^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{b^2} - \frac{x^2}{b^4}\right) + Bx^2$$