Universität
Konstanz

Übungen zur Physik IV: Integrierter Kurs (Exp)
Sommersemester 2023

Prof. Dr. Mikhail Fonin

Übungsblatt 5, Ausgabe: 15.05.2023, Abgabe: 22.05.2023
Besprechung in den Übungen am 24.05.2023

Aufgabe 1: Bouncing Buckyballs (schriftlich abzugeben, **10 Punkte**)

Ein Buckminster-Fulleren (C_{60}, auch Buckyball genannt) ist ein Kohlenstoff-Molekül, dessen Struktur der Form eines klassischen Lederfußballs ähnelt. Wir nehmen an, ein solcher Buckyball befinde sich im Gravitationsfeld oberhalb eines Substrates, in das es nicht eindringen kann. Das Potential lautet somit näherungsweise:

$$V(z) = \begin{cases} mgz & z \geq 0 \\ \infty & z < 0. \end{cases} \tag{1}$$

Die Schrödingergleichung für $z > 0$,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + mgz\right)\ \varphi(z) = E\ \varphi(z) \tag{2}$$

soll im Folgenden (eindimensional) gelöst werden. Dies gelingt leichter im Impulsraum, d.h. durch Lösung der Gleichung

$$\left(\frac{p_z^2}{2m} + i\hbar mg\frac{\partial}{\partial p_z}\right)\ \tilde{\varphi}(p_z) = E\ \tilde{\varphi}(p_z) \tag{3}$$

a) Berechnen Sie die Lösung $\tilde{\varphi}(p_z)$ der Differentialgleichung (2). *Hinweis*: Probieren Sie es mit einer Exponentialfunktion mit einem Polynom in p_z im Exponenten. Die Normierungskonstante muss nicht explizit berechnet werden. **(3 Punkte)**

b) Führen Sie die inverse Fouriertransformation aus, um die Wellenfunktion im Ortsraum zu erhalten, d.h. berechnen Sie

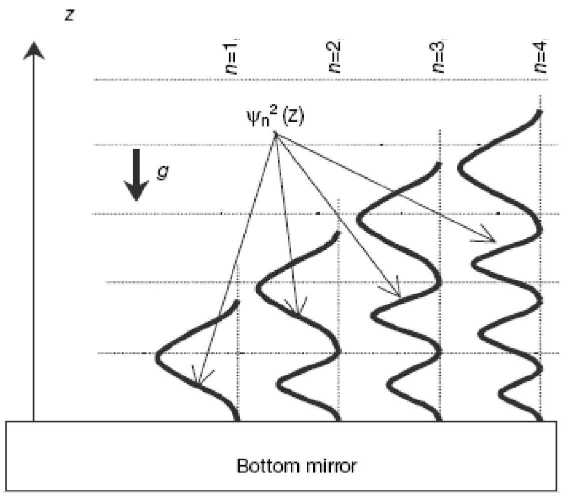
$$\varphi(z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp_z\ \tilde{\varphi}(p_z)\ e^{ip_z z/\hbar}. \tag{4}$$

Ein Ausdruck der Form $Ai(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} d\tau\ \ \cos(\omega\tau + \frac{\tau^3}{3})$, die sogenannte Airy-Funktion, darf als Integral stehenbleiben. Finden Sie den Parameter ω in unserem Fall. **(2 Punkte)**

c) Beschaffen Sie sich einen Graphen der Airy-Funktion. **(1 Punkt)**

d) Wegen $V = \infty$ für $z < 0$ muss $\varphi(0) = 0$ sein, somit muss das Argument ω für $z = 0$ so sein, dass Ai dort eine Nullstelle aufweist. Geben Sie aus dieser Bedingung die vier kleinstmöglichen Werte für E an. (Die Nullstellen lesen Sie aus Ihrem Graphen ab, und für m ist die Masse von 60 C-Atomen einzusetzen.) **(2 Punkte)**

e) Die Eigenfunktionen sind "nach oben verschobene" Airy-Funktionen. Geben Sie wiederum durch Ablesen aus ihrem Graphen der Airy-Funktion und entsprechendes Umrechnen des Arguments für die ersten vier Zustände jeweils die Höhe z an, bei der das Maximum der Wellenfunktion liegt, das am weitesten vom Substrat entfernt ist (gleichzeitig das größte Maximum). **(2 Punkte)**

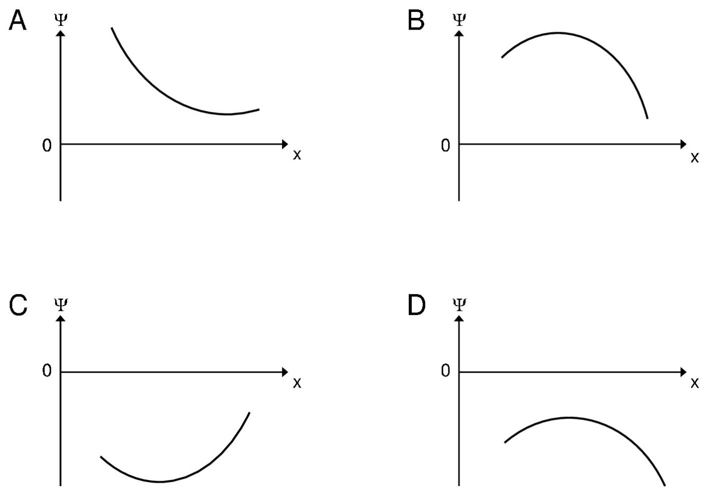


Aufgabe 2: Graphische Lösung der Schrödingergleichung (1 Kreuzchen)

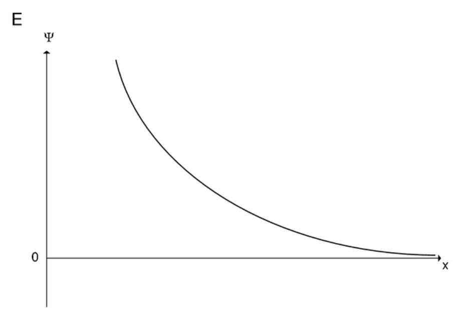
a) In dieser Aufgabe wollen wir nur rein reelle Wellenfunktionen betrachten. Aus

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\,(V(x) - E)\,\Psi(x)$$

ersehen wir, dass für $V(x) - E > 0$ die Krümmung von Ψ, also $\Psi''(x)$, dasselbe Vorzeichen hat wie $\Psi(x)$ und für $V(x) - E < 0$ die Krümmung $\Psi''(x)$ entgegengesetztes Vorzeichen zu $\Psi(x)$ hat. In welche der beiden eben genannten Kategorien fallen die im Folgenden skizzierten vier Funktionenstücke A bis D?



Eine Kurve fehlt noch, das ist jener Teil E, der sich asymptotisch (also für $x \to \infty$), von oben der Achse nähert, dessen Krümmung immer geringer wird, jedoch immer positiv bleibt. Zu welcher Kategorie gehört diese Kurve?

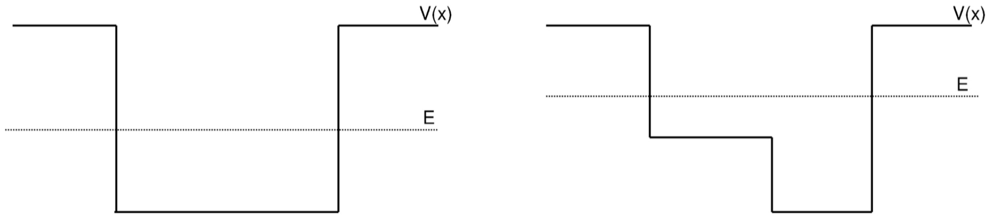


b) i) Für welchen Fall, $V - E > 0$ oder $V - E < 0$, können Sie verschiedene der gezeigten Stücke zu einer stetigen Wellenfunktion zusammensetzen in einem Bereich, in dem $V - E$ sein Vorzeichen nicht ändert? Skizzieren Sie, wie dies z.B. aussehen könnte (Sie dürfen eine Art Funktionenstück auch mehrfach verwenden).

ii) Welche Art von Funktionenstücken können Sie für einen Halbraum, $]-\infty, 0]$ oder $[0, \infty[$, in dem $V - E$ sein Vorzeichen nicht ändert, nicht gebrauchen, weil Sie diese Stücke unter der Bedingung, dass die Wellenfunktion stetig sein und endlich bleiben soll, nicht fortsetzen können?

iii) Gehen Sie jetzt von einer Potentiallandschaft aus, bei der $V(x) - E$ sein Vorzeichen bei $x = a$ von negativ auf positiv wechselt. Skizzieren Sie auf einem endlichen Bereich um $x = a$ herum, auf dem die Wellenfunktion $\Psi(x)$ positiv sein soll, ein mögliches $\Psi(x)$. Welche mathematische Eigenschaft muss $\Psi(x)$ bei $x = a$ haben?

c) Aus expliziten Wellenfunktionen für bestimmte Potentiale wie z.B. dem Kasten, sollten sie bereits wissen, dass sich für $E > V(x)$ "oszillierende" Lösungen ergeben, und dass $\Psi(x)$ umso "schneller" oszilliert, je größer $E - V(x)$ ist. Skizzieren Sie qualitativ die Wellenfunktionen, die zu den eingezeichneten Energien (die natürlich jeweils Eigenwerte der Schrödingergleichung sein sollen) in den beiden unten gezeigten Potentialtöpfen passen. Die Wellenfunktionen sollen hier sowohl für $x \to \infty$ als auch für $x \to -\infty$ positiv sein. Sie dürfen jedoch irgendeine beliebige Anzahl von Nullstellen wählen. Kennzeichnen Sie in Ihren Skizzen, wo Sie Funktionsstücke der Arten A bis E verwendet haben.



Aufgabe 3: Normierung der Wellenfunktion (1 Kreuzchen)

a) In der Normierungsbedingung

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

steckt implizit die Annahme, dass die Norm zeitlich konstant ist.

Zeigen Sie, dass das Normierungsintegral in der Tat zeitunabhängig ist. Gehen Sie dabei von der Wellenfunktion aus

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}. \tag{5}$$

Benutzen Sie dabei folgenden Ansatz für die Energie $E = E_0 - i\Gamma$ (wobei E_0 die wahre potenzielle Energie und Γ eine positive reelle Kostante ist). Welches Γ erfüllt die Forderung

$$\frac{dP}{dt} = 0$$

für alle Zeiten t?

b) Was passiert wenn Sie $\Gamma \neq 0$ annehmen? Bestimmen Sie $P(t)$ aus

$$\frac{d}{dt}P(t) = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx \tag{6}$$

und diskutieren Sie das Ergebnis.