Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 2000

Klausur - Lösungen

Stilianos Louca

Juli 2007

Aufgabe 01

Lemma 1

Betrachten einen beliebigen linearen Operator der Art

$$\mathcal{L} := \sum_k \alpha_k(\vec{r}) \cdot \mathscr{D}_k(\vec{r}) + \sum_l \eta_l(\vec{r})$$

wobei die $\mathscr{D}_k$ reelle, lineare Differentialoperatoren (das heißt für reelle u ist auch $\mathscr{D}_k u$ reell und Ableitungen sind als reelle Ableitungen zu deuten) und die α_k, η_l skalare Funktionen seien. Ist $f(\vec{r}) = u(\vec{r}) + iv(\vec{r}),\ u(\vec{r}), v(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ eine Lösung von $\mathcal{L}f = 0$, so ist $\overline{f} := u - iv$ eine Lösung von $\overline{\mathcal{L}}\ \overline{f} = 0$, mit

$$\overline{\mathcal{L}} := \sum_k \overline{\alpha_k(\vec{r})} \cdot \mathscr{D}_k(\vec{r}) + \sum_l \overline{\eta_l(\vec{r})}$$

Beweis:

$$\overline{\mathcal{L}}\ \overline{f} = \sum_k \overline{\alpha_i} \cdot \mathscr{D}_k \overline{f} + \sum_l \overline{\eta_l} \cdot \overline{f} = \sum_k \overline{\alpha_k} \cdot (\mathscr{D}_k u - i\mathscr{D}_k v) + \sum_l \overline{\eta_l \cdot f} = \sum_k \overline{\alpha_k}\overline{(\mathscr{D}_k u + i\mathscr{D}_k v)} + \overline{\sum_l \eta_l f}$$

$$= \overline{\sum_k \alpha_k \mathscr{D}_k f} + \overline{\sum_l \eta_l f} = \overline{\sum_k \alpha_k \mathscr{D}_k f + \sum_l \eta_l f} = 0 \quad \square$$

Kontinuitätsgleichung

Beginnen mit der Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m im Potential V

$$i\hbar \partial_t \Psi(t) = \mathcal{H}\Psi(t)\ ,\ \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

und schreiben für Sie erfüllende Zustände Ψ:

$$\partial_t \underbrace{|\Psi(\vec{r},t)|^2}_{\rho(\vec{r},t)} = \partial_t(\Psi^*\Psi) = \Psi^* \underbrace{\partial_t\Psi}_{\frac{1}{i\hbar}\mathcal{H}\Psi} + \Psi \underbrace{\partial_t\Psi^*}_{-\frac{1}{i\hbar}\overline{\mathcal{H}}\Psi^*} = \frac{\Psi^*}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r})\Psi\right] - \frac{\Psi}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + V(\vec{r})\Psi^*\right]$$

$$= \underbrace{\frac{\hbar}{2im}\left[\Psi\Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi\right]}_{-\operatorname{div}\vec{j}}\ ,\ \ \vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right]$$

Dabei ist $\rho = |\Psi(\vec{r},t)|^2$ laut Kopenhagener Deutung die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte und $\vec{j}(\vec{r},t)$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichte für das Teilchen am Ort $\vec{r}$ zum Zeitpunkt t. Die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \operatorname{div}\vec{j}(\vec{r},t) = 0$$

drückt dann die *Wahrscheinlichkeitserhaltung* für ein Teilchen aus, das nicht ohne weiteres Verschwinden bzw. Erscheinen kann.

Aufgabe 02

Betrachten die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\Psi(t) = \mathcal{H}(t)\Psi(t)$$

mit dem Hamilton Operator $\mathcal{H} = \mathcal{H}(t)$. Durch den Separationsansatz

$$\Psi(t) = \underbrace{\Psi_0}_{\substack{\text{Zeit-}\\\text{unabhängig}}} \cdot T(t)\ ,\ T : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

erhält man in Ortsdarstellung

$$i\hbar\Psi_0(\vec{r})T'(t) = T(t)\mathcal{H}(t)\Psi_0(\vec{r})$$

Ist jetzt $\mathcal{H}$ <u>zeitunabhängig</u>, so schreiben wir

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{1}{i\hbar\Psi_0(\vec{r})} \cdot \mathcal{H}\Psi_0(\vec{r})$$

Da linke und rechte Seite von unabhängigen Variablen abhängen, müssen beide konstant sein, das heißt

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{1}{i\hbar\Psi_0(\vec{r})} \cdot \mathcal{H}\Psi_0(\vec{r}) =: \frac{E}{i\hbar} \in \mathbb{C} \quad \to \quad \mathcal{H}\Psi_0(\vec{r}) = E\Psi_0(\vec{r})$$

Die Eigenwertgleichung

$$\mathcal{H}\Psi_0 = E\Psi_0$$

ist genau die Zeitfreie Schrödingergleichung. Ersichtlich ist: Die daraus resultierenden Energieeigenfunktionen Ψ_0 sind ebenfalls zeitunabhängig.

Aufgabe 03

Ein für das Wasserstoffatom (allgemein: Kugelsymmetrisches Potential $V(r)$) vollständiger Satz kommutierender Observablen sind der Hamilton-Operator $\mathcal{H}$ und die Drehimpulsoperatoren $\mathbf{L}^2, L_z$. Die stationären Zustände Ψ_{nlm}, gekennzeichnet durch die ganzen Zahlen n, l, m mit $n \in \mathbb{N}\ ,\ l = 0, .., n-1$ und $m = -l, .., l$ besitzen die Ortsdarstellung

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

mit den Kugelflächenfunktionen Y_{lm} und den entsprechenden, von n und l abhängigen Radialen Funktionen R_{nl}. Dabei gelten die Eigenwertgleichungen

$$\mathcal{H}\Psi_{nlm} = \frac{E_1}{n^2}\Psi_{nlm}\ ,\ \mathbf{L}^2\Psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\Psi_{nlm}\ ,\ L_z\Psi_{nlm} = m\hbar\Psi_{nlm}$$

mit der Grundzustandsenergie

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}$$

der reduzierten Masse μ des Proton-Elektron Systems und dem Bohrschen Radius a_0. Zu erkennen ist die Entartung der Energie: Der Eigenraum $E_n(\mathcal{H})$ des Hamilton-Operators $\mathcal{H}$ zum Energieeigenwert E_n wird durch genau

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

orthonormale Vektoren aufgespannt:

$$E_n(\mathcal{H}) = \operatorname{span}\{\Psi_{nlm} : l = 0, .., n-1\ ,\ m = -l, .., l\}$$

und ist somit n^2-dimensional.

Aufgabe 04

Harmonische Oszillator

Wir schreiben

$$[\mathcal{H}, a] = \hbar\omega \left[a^\dagger a + \frac{1}{2}, a\right] = \hbar\omega \left[a^\dagger a, a\right] + \frac{\hbar\omega}{2} \underbrace{[\mathrm{Id}, a]}_{0} = \hbar\omega a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{0} + \hbar\omega \underbrace{[a^\dagger, a]}_{-\mathrm{Id}} a = -\hbar\omega a$$

$$\left[\mathcal{H}, a^\dagger\right] = \hbar\omega \left[a^\dagger a, a^\dagger\right] + \frac{\hbar\omega}{2} \underbrace{[\mathrm{Id}, a^\dagger]}_{0} = \hbar\omega a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{\mathrm{Id}} + \hbar\omega \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{0} a = \hbar\omega a^\dagger$$

Für beliebigen Eigenvektor Ψ von $\mathcal{H}$ zum Eigenwert λ betrachten wir die Vektoren $a\Psi, a^\dagger\Psi$:

$$\mathcal{H}a\Psi = \{[\mathcal{H}, a] + a\mathcal{H}\}\Psi = -\hbar\omega a\Psi + a \underbrace{\mathcal{H}\Psi}_{\lambda\Psi} = (\lambda - \hbar\omega) \cdot a\Psi$$

$$\mathcal{H}a^\dagger\Psi = \left\{\left[\mathcal{H}, a^\dagger\right] + a^\dagger\mathcal{H}\right\}\Psi = \hbar\omega a^\dagger\Psi + a^\dagger \underbrace{\mathcal{H}\Psi}_{\lambda\Psi} = (\lambda + \hbar\omega) \cdot a^\dagger\Psi$$

Somit spielen a und $a^\dagger$ jeweils die Rolle eines *Vernichtungsoperators* und eines *Erzeugungsoperators*, der den Eigenvektor Ψ jeweils in den Eigenraum $E_{\lambda-\hbar\omega}(\mathcal{H})$ runtersetzt bzw. in den Eigenraum $E_{\lambda+\hbar\omega}(\mathcal{H})$ hinaufsetzt.

Drehimpuls

Beginnen mit der Definition von $L_\pm$, schreiben

$$L_+^\dagger = [L_x + iL_y]^\dagger = L_x^\dagger - iL_y^\dagger \overset{L_i^\dagger = L_i}{=} L_x - iL_y = L_- \quad \to \quad L_-^\dagger = \left(L_+^\dagger\right)^\dagger = L_+$$

und sehen dass $L_\pm$ <u>nicht</u> hermitesch sind! Dabei gilt:

$$\left[L_i, \mathbf{L}^2\right] = \left[L_i, L^j L_j\right] = L^j \underbrace{[L_i, L_j]}_{i\hbar\varepsilon_{ijk}L^k} + \underbrace{[L_i, L_j]}_{i\hbar\varepsilon_{ijk}L^k} L^j = i\hbar \left[\varepsilon_{ijk}L^j L^k + \varepsilon_{ijk}L^k L^j\right]$$

$$= i\hbar \left[\varepsilon_{ijk}L^j L^k + \varepsilon_{ikj}L^j L^k\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk} \left[L^j L^k - L^j L^k\right] = 0 \quad , \quad i = x, y, z$$

$$\left[L_+, \mathbf{L}^2\right] = \left[L_x + iL_y, \mathbf{L}^2\right] = \underbrace{\left[L_x, \mathbf{L}^2\right]}_{0} + i \underbrace{\left[L_y, \mathbf{L}^2\right]}_{0} = 0$$

$$\left[L_-, \mathbf{L}^2\right] \overset{\text{Analog}}{=} 0$$

$$[L_\pm, L_z] = \underbrace{[L_x, L_z]}_{-i\hbar L_y} \pm i \underbrace{[L_y, L_z]}_{i\hbar L_x} = \mp\hbar \underbrace{[L_x \pm iL_y]}_{L_\pm} = \mp\hbar L_\pm$$

Analog zu vorhin betrachten wir für einen Eigenzustand Ψ_m von L_z zum Eigenwert $m\hbar$ die Zustände $L_\pm\Psi$:

$$L_z L_\pm \Psi_m = \{L_\pm L_z - [L_\pm, L_z]\}\Psi_m = m\hbar L_\pm\Psi_m - \mp\hbar L_\pm\Psi_m = \hbar(m \pm 1)\Psi_m$$

und sehen dass $L_\pm$ auch hier als *Erzeugungs*- bzw. *Vernichtungs*- Operatoren auf den Eigenvektoren von L_z wirken.

Aufgabe 05

Annahme: $\mathbb{R} \ni a > 0$

Aus

$$\langle X\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\,(X\psi)\,(x)\;dx = \int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)x\psi(x)\;dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\cdot \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} \underbrace{xe^{-ax^2}}_{\text{ungerade}}\;dx}_{0} = 0$$

$$\left\langle X^2\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)x^2\psi(x)\;dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\cdot \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} x^2e^{-ax^2}\;dx}_{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}} = \frac{1}{2a}$$

$$\langle P\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\,(P\psi)\,(x)\;dx = \frac{\hbar}{i}\int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\;dx = ia\hbar \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} \underbrace{xe^{-ax^2}}_{\text{ungerade}}\;dx}_{0} = 0$$

$$\left\langle P^2\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\left(P^2\psi\right)(x)\;dx = -\hbar^2\int\limits_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\;dx = -\hbar^2\sqrt{\frac{a}{\pi}}\cdot \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} \left[-a+a^2x^2\right]\cdot e^{-ax^2}\;dx}_{-\frac{\sqrt{a\pi}}{2}} = \frac{\hbar^2 a}{2}$$

folgt

$$(\Delta X)^2 = \left\langle X^2\right\rangle - \langle X\rangle^2 = \frac{1}{2a}\;,\;(\Delta P)^2 = \left\langle P^2\right\rangle - \langle P\rangle^2 = \frac{\hbar^2 a}{2}$$

und somit die Beziehung

$$\boxed{\Delta X\cdot\Delta P = \frac{\hbar}{2}}$$

was auch dem durch die Heisenbergsche Unschärferelation vorgeschriebenen Mindestwert entspricht!

Aufgabe 06

δ-Potential

Beginnen mit der zeitfreien Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x) - U_0\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

In den Gebieten $G_1 := \mathbb{R}_-,\ G_2 := \mathbb{R}_+$ vereinfacht sich diese zu

$$\Psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)$$

so dass sich die allgemeine Lösung in G_1 bzw. G_2 ergibt als

$$G_1 : \Psi_1(x) = A_1e^{\gamma x} + B_1e^{-\gamma x}$$

$$G_2 : \Psi_2(x) = A_2e^{\gamma x} + B_2e^{-\gamma x}\;,\;\gamma = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

wobei wir nur den Fall $E < 0$ betrachten (gebundener Zustand). Fordern die Beschränktheit der Lösungen ($\to$ Quadratintegrierbarkeit), das heißt setzen $B_1 = A_2 = 0$. Durch die Stetigkeitsforderung in $\mathbb{R}$ erhalten wir die Bedingung

$$A_1 \overset{!}{=} B_2 \tag{1}$$

Ferner ist bekannt (vgl. Übungsserien):

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\Psi(\varepsilon) - \Psi(-\varepsilon)\right] = -\frac{2mU_0}{\hbar^2}\Psi(0)$$

so dass wir die Bedingung

$$A_1 + B_2 \overset{!}{=} \frac{2mU_0}{\gamma\hbar^2} A_1 \tag{2}$$

erhalten. Das heißt es muss gelten

$$2A_1 = \frac{2mU_0}{\gamma\hbar^2} A_1$$

Um nicht-triviale Lösungen zu erhalten, muss also

$$\frac{mU_0}{\gamma\hbar^2} \overset{!}{=} 1$$

sein, das heißt der einzige Energieeigenwert ist

$$\boxed{E = -\frac{mU_0^2}{2\hbar^2}}$$

Der entsprechende Eigenzustand ist ferner gegeben durch

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\gamma x} & : x < 0 \\ A_1 e^{-\gamma x} & : x \geq 0 \end{cases}$$

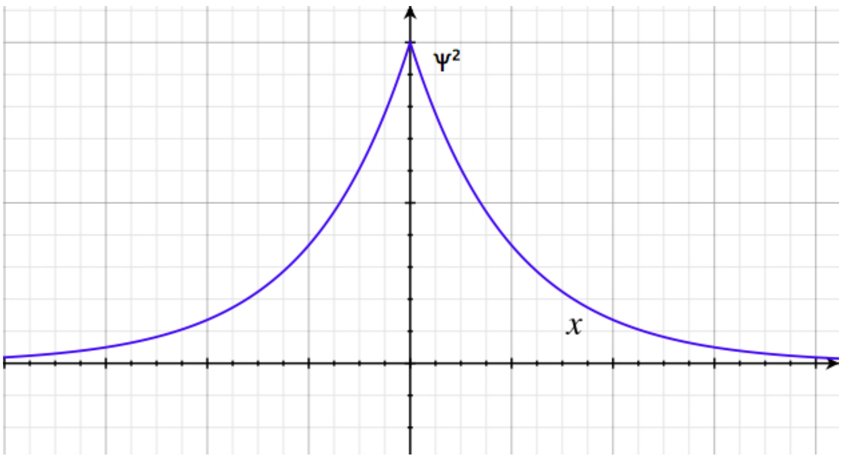
Fordern wir die Normierung von Ψ so erhalten wir durch

$$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 \; dx = 2\,|A_1|^2 \underbrace{\int_0^\infty e^{-2\gamma x} \; dx}_{\frac{1}{2\gamma}} = \frac{|A_1|^2}{\gamma}$$

die Bedingung $|A_1| \overset{!}{=} \sqrt{\gamma}$. Wir setzen o.B.d.A $0 < A_1 \in \mathbb{R}$ und erhalten so den normierten Eigenzustand

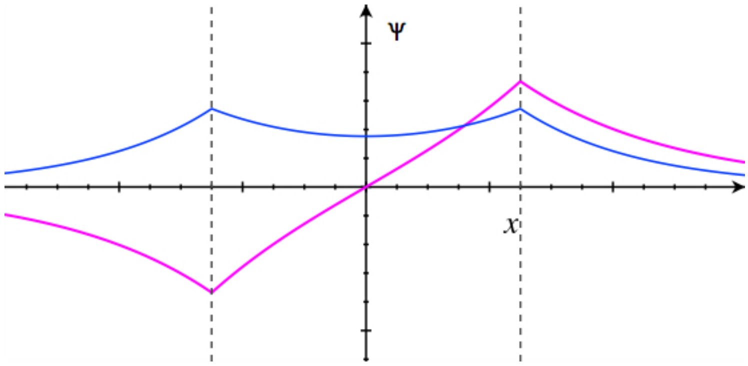
$$\boxed{\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\gamma} \cdot e^{\gamma x} & : x < 0 \\ \sqrt{\gamma} \cdot e^{-\gamma x} & : x \geq 0 \end{cases}}$$

Im folgenden ist qualitativ ($\gamma = 1$) die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x)|^2$ dargestellt:



Doppelter δ-Potentialtopf

Aufgrund der Symmetrie des Potentials ist der Hamilton-Operator gerade. Demnach müssen die Eigenzustände gerade oder ungerade Funktionen sein, die nicht desto trotz, analog wie vorhin für $|x| \to \infty$ exponentiell abfallen. Die Eigenwerte und die Eigenfunktionen werden abzählbar viele sein. Der Eigenzustand n-ter Ordnung (geordnet nach wachsendem Energieeigenwert) wir nach dem Knotensatz $(n-1)$ mal durch den Nullpunkt gehen.
Zu erwarten sind zwei linear unabhängige Lösungen, eine gerade und eine ungerade, die qualitativ wie folgt aussehen würden:



Aufgabe 07

Beginnen mit der zeitfreien Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

in den Gebieten $G_1 := \mathbb{R}_-,\ G_2 := \mathbb{R}_+$:

$$G_1 : \Psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) \ \rightarrow\ \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}\ ,\ k_1 := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$G_2 : \Psi''(x) = -\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\Psi(x) \ \rightarrow\ \Psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}\ ,\ k_2 := \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Betrachten ein von $-\infty$ kommendes Teilchen, das heißt erwarten nach der Barriere ($x > 0$) keine Reflexion und setzen somit $B_2 = 0$. Fordern die Stetigkeit und die Stetigkeit der Ableitung in $\mathbb{R}$ und erhalten so die Bedingungen

$$\Psi_1(0) \stackrel{!}{=} \Psi_2(0) \ \rightarrow\ A_1 + B_1 \stackrel{!}{=} A_2$$

$$\Psi_1'(0) \stackrel{!}{=} \Psi_2'(0) \ \rightarrow\ ik_1(A_1 - B_1) \stackrel{!}{=} ik_2 A_2$$

Algebraische Manipulation führt zu den Beziehungen

$$B_1 = \frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \cdot A_1 \quad , \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \cdot A_1$$

so dass sich die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten ergeben als

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{|k_1 - k_2|^2}{|k_1 + k_2|^2} = \frac{2E - U_0 - 2\sqrt{E(E-U_0)}}{2E - U_0 + 2\sqrt{E(E-U_0)}}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{E(E-U_0)}}{2E - U_0 + 2\sqrt{E(E-U_0)}}$$

Für $E \in (0, U_0)$ tritt der quantenmechanische *Tunneleffekt* auf, bei dem die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nach der Barriere ($x > 0$) <u>nicht</u> vollkommen verschwindet, obwohl rein klassisch das Gebiet wegen $E < U_0$ nicht zugänglich ist!