Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 01

Klausur - Lösungen

Stilianos Louca

Juli 2007

Aufgabe 01

Zwei Operatoren $T : D(T) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H},\ S : D(S) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ heißen zu einander *formal adjungiert* (hermitesch konjugiert) falls für $x \in D(T)$ und $y \in D(S)$ gilt:

$$\langle y, Tx \rangle = \langle Sy, x \rangle$$

Ein zu sich selbst formal adjungierter Operator heißt *hermitesch*.
Es seien ∂_x und X jeweils die Operatoren mit der Ortsdarstellung

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{ bzw. } x$$

Es ist

$$a^\dagger = (\beta\partial_x + \gamma X)^\dagger = \overline{\beta}\,(\partial_x)^\dagger + \overline{\gamma}\,\underbrace{X^\dagger}_{X}$$

Zu bestimmen bleibt noch: $(\partial_x)^\dagger$. Für differenzierbare, quadratintegrable Funktionen f, g ist

$$\langle f, \partial_x g \rangle = \int_{\mathbb{R}} f^*(x) g'(x)\ dx = \underbrace{f^*(x)g(x)\ |_{-\infty}^{\infty}}_{0} - \int_{\mathbb{R}} \frac{df^*}{dx}(x) g(x)\ dx = -\langle \partial_x f, g \rangle = \langle -\partial_x f, g \rangle$$

das heißt $-\partial_x = (\partial_x)^\dagger$. Somit folgt schließlich

$$a^\dagger = -\overline{\beta}\partial_x + \overline{\gamma}X$$

Wegen

$$([X, \partial_x]\,\Psi)(x) = x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) - \frac{\partial}{\partial x}x\Psi(x) = x\Psi'(x) - x\Psi'(x) - \Psi(x) = -\Psi(x)$$

folgt ferner

$$\left[a^\dagger, a\right] = \left[-\overline{\beta}\partial_x + \overline{\gamma}X, \beta\partial_x + \gamma X\right] = -|\beta|^2 \underbrace{[\partial_x, \partial_x]}_{0} + |\gamma|^2 \underbrace{[X, X]}_{0} - \overline{\beta}\gamma\,[\partial_x, X] + \overline{\gamma}\beta\,[X, \partial_x]$$

$$= \left(\overline{\gamma}\beta + \overline{\beta}\gamma\right) \underbrace{[X, \partial_x]}_{-\,\mathrm{Id}} = -\left(\overline{\gamma}\beta + \overline{\beta}\gamma\right)$$

Aufgabe 02

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

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

und schreiben für Sie erfüllende Zustände Ψ:

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

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

Aufgabe 03

In den Bereichen $\mathbb{R}_-, \mathbb{R}_+$ sei die (stationäre) Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right]\Psi(x) \overset{V=0}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) \overset{!}{=} E\Psi(x)s$$

erfüllt. Wir gehen von einer positiven Energie $E > 0$ aus, so dass deren allgemeine Lösung sich ergibt als

$$\Psi_\pm(x) = A_\pm e^{i\omega x} + B_\pm e^{-i\omega x}\ ,\ \omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Fordern die Stetigkeit auf $\mathbb{R}$ und erhalten so die Bedingung

$$\Psi_-(0) \overset{!}{=} \Psi_+(0)\ \rightarrow\ A_- + B_- \overset{!}{=} A_+ + B_+$$

Fordern außerdem die Beschränktheit von Ψ auf $\mathbb{R}$ und integrieren die Schrödingergleichung über die Kugel $B_\varepsilon(0),\ \varepsilon > 0$:

$$\int\limits_{B_\varepsilon(0)} E\Psi(x)\ dx = \int\limits_{B_\varepsilon(0)} \mathcal{H}\Psi(x)\ dx = \int\limits_{B_\varepsilon(0)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + U_0\delta(x)\Psi(x)\right]\ dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'(x)\ |_{-\varepsilon}^{\varepsilon} + U_0\Psi(0) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi'(-\varepsilon) - \Psi'(\varepsilon)\right] + U_0\Psi(0)$$

Durch Grenzwertbildung erhalten wir

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int\limits_{B_\varepsilon(0)} E\Psi(x)\ dx \overset{\Psi \text{ beschränkt}}{=} 0$$

und somit die Bedingung

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\Psi'(\varepsilon)-\Psi'(-\varepsilon)\right] \stackrel{!}{=} \frac{2mU_0}{\hbar^2}\Psi(0) \tag{1}$$

das heißt

$$i\omega(A_+-B_+)-i\omega(A_--B_-) \stackrel{!}{=} \frac{2mU_0}{\hbar^2}\Psi(0)=\frac{2mU_0}{\hbar^2}\left(A_-+B_-\right) \;\to\; A_+-B_+-A_-+B_- = \underbrace{\frac{2mU_0}{i\omega\hbar^2}}_{\lambda}(A_-+B_-) \tag{2}$$

Identifizieren ferner

$$e^{i\omega x} \;\text{ bzw. }\; e^{-i\omega x}$$

ein nach rechts bzw. nach links propagierendes Teilchen. Betrachten o.B.d.A ein von *links* ankommendes Teilchen, das heißt insbesondere erwarten $B_+=0$ (keine Reflexion jenseits der Barriere). Durch kurze algebraische Manipulation erhält man schließlich

$$B_-(2-\lambda)=\lambda A_- \stackrel{\lambda\neq 0}{\Longrightarrow} B_-=\frac{\lambda A_-}{2-\lambda}$$

das heißt der Reflexionskoeffizient ist gegeben durch

$$R=\frac{|B_-|^2}{|A_-|^2}=\frac{|\lambda|^2}{|2-\lambda|^2}=\frac{m^2U_0^2}{m^2U_0^2+\omega^2\hbar^4}=\frac{mU_0^2}{mU_0^2+2\hbar^2E}$$

Aufgabe 04

Beginnen mit der Ortsdarstellung

$$L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\mathbf{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\mathcal{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\vec{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{r^2\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]+U(r)=-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}+U(r)$$

und schreiben

$$L_z\mathbf{L}^2=i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]\stackrel{\text{Schwarz}}{=}i\hbar^3\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^3}{\partial\varphi^3}\right]$$

$$=-\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]=\mathbf{L}^2L_z$$

$$L_z\mathcal{H}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right]+L_z\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}U(r)\stackrel{\substack{\text{Schwarz}\\ \partial_\vartheta U=0\\ \partial_\varphi U=0}}{=}\frac{i\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\frac{\partial}{\partial\varphi}+L_z\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}-i\hbar U(r)\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\stackrel{[L_z,\mathbf{L}^2]=0}{=}-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]+\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}L_z+U(r)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]=\mathcal{H}L_z$$

$$\mathbf{L}^2\mathcal{H}=-\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+U(r)\right]+\mathbf{L}^2\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}$$

$$\stackrel{\substack{\text{Schwarz}\\ \partial_\vartheta U=0\\ \partial_\varphi U=0}}{=}\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+U(r)\right]\left(-\hbar^2\right)\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]+\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}\mathbf{L}^2=\mathcal{H}\mathbf{L}^2$$

Aufgabe 05

Beginnen mit dem Hamilton Operator

$$\mathcal{H} = \frac{P_s^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X_s^2$$

und den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen

$$\partial_t X_h = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, X_h] + \underbrace{\partial_t X_s}_{0} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, X_s]_h = \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{i\hbar}{m} P_s \right]_h = \frac{P_h}{m}$$

$$\partial_t P_h = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, P_h] + \underbrace{\partial_t P_s}_{0} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, P_s]_h = \frac{i}{\hbar} \left[i\hbar m\omega^2 X_s \right]_h = -m\omega^2 X_h$$

deren allgemeine Lösung sich durch Differenzieren der ersten Differentialgleichung ergibt als

$$X_h(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t) \ , \ P_h(t) = -m\omega A\sin(\omega t) + m\omega B\cos(\omega t)$$

wobei A und B beliebige, zeitlich konstante, Operatoren sind. Dabei ist leicht zu sehen:

$$X_s = X_h(0) = A \ , \ X_s = P_h(0) = m\omega B$$

das heißt

$$X_h(t) = \cos(\omega t) \cdot X_s + \frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \cdot P_s$$

$$P_h(t) = -m\omega\sin(\omega t) \cdot X_s + \cos(\omega t) \cdot P_s$$

Dabei gilt:

$$[P_h(t), X_s] = -m\omega\sin(\omega t) \underbrace{[X_s, X_s]}_{0} + \cos(\omega t) \underbrace{[P_s, X_s]}_{-i\hbar} = -i\hbar\cos(\omega t) \cdot \mathrm{Id}$$

$$[X_h(t), X_s] = \cos(\omega t) \underbrace{[X_s, X_s]}_{0} + \frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \underbrace{[P_s, X_s]}_{-i\hbar} = -\frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t) \cdot \mathrm{Id}$$

Bzgl. der *Ortsbasis* $|\vec{r}\rangle$ sind die *Matrizenelemente* von X bzw. P in der Schrödingertheorie gegeben durch

$$x_{\alpha\beta} = \langle\alpha| X |\beta\rangle = \alpha \langle\alpha |\beta\rangle = \alpha \cdot \delta(\alpha - \beta)$$

$$p_{\alpha\beta} = \langle\alpha| P |\beta\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\alpha} \langle\alpha |\beta\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\alpha} \delta(\alpha - \beta)$$