Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 07

Klausur 2 - Lösungen

Stilianos Louca

Juli 2007

Aufgabe 01

- Der Hamilton Operator $\mathcal{H}$ des harmonischen Oszillators
$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2$$
mit den Eigenwerten
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \ , \ n \in \mathbb{N}$$
hat ein rein diskretes Spektrum.
- Der Hamilton Operator eines freien Teilchens
$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m}$$
hat ein rein kontinuierliches Spektrum: $[0, \infty)$.
- Der Hamilton Operator des Wasserstoffatoms mit den negativen (diskreten) Eigenwerten
$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2 n^2} \ , \ n \in \mathbb{N}$$
und den positiven (kontinuierlichen) Eigenwerten $(0, \infty)$ hat ein teilweise diskretes, teilweise kontinuierliches Spektrum.

Aufgabe 02

$$\left[L_i, \vec{R}^2\right] = \left[L_i, X^j X_j\right] = X^j\left[L_i, X_j\right] + \left[L_i, X^j\right]X_j = X^j\left[X^l P^m \varepsilon_{lmi}, X_j\right] + \left[X^l P^m \varepsilon_{lmi}, X^j\right]X_j$$

$$= \varepsilon_{lmi} X^j X^l \underbrace{\left[P^m, X_j\right]}_{-i\hbar\delta_{mj}} + \varepsilon_{lmi} X^j \underbrace{\left[X^l, X_j\right]}_{0} P^m + \varepsilon_{lmi} X^l \underbrace{\left[P^m, X^j\right]}_{-i\hbar\delta_{mj}} X_j + \varepsilon_{lmi} \underbrace{\left[X^l, X^i\right]}_{0} P^m X_i$$

$$= -i\hbar\varepsilon_{lmi}\delta_{mj} \underbrace{\left[X^j X^l + X^l X^j\right]}_{2X^l X^j} = -2i\hbar\varepsilon_{lmi} X^l X^m = -2i\hbar \underbrace{\left(\vec{R} \times \vec{R}\right)_i}_{0} = 0$$

Die beiden, den Observablen $L_i, \vec{R}^2$ entsprechenden Größen können also gleichzeitig gemessen werden.

Aufgabe 03

Annahme: Die Zustände $|L\rangle\,,|R\rangle$ sind orthonormal.
Der entsprechende Zustandsraum $\mathcal{H} = \text{span}\{|L\rangle\,,|R\rangle\}$ ist offensichtlich 2-dimensional. In der Basis $\{|L\rangle\,,|R\rangle\}$ nimmt dann der Hamiltonoperator H die Matrix

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

an. Die Eigenwertgleichung lautet somit

$$\det(\lambda\,\mathrm{Id} - \hat{H}) = \det \begin{pmatrix} \lambda & -\hbar\omega \\ -\hbar\omega & \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \hbar^2\omega^2 \overset{!}{=} 0$$

woraus sofort die Eigenwerte $\lambda_\pm = \pm\hbar\omega$ abzulesen sind. Diese entsprechen den (normierten) Eigenvektoren $v_\pm$ mit der Darstellung

$$\hat{v}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\ ,\ \hat{v}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

bzw.

$$\boxed{v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}|L\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|R\rangle\ ,\ v_- = \frac{1}{\sqrt{2}}|L\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|R\rangle}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist der Zustand des Teilchens gegeben durch

$$\Psi = |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}v_+ - \frac{1}{\sqrt{2}}v_-$$

und allgemein bei $t > 0$ durch

$$\Psi = c_+(t)v_+ + c_-(t)v_-\ ,\ c_\pm \in \mathbb{C}$$

Seine Entwicklung ist gegeben durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$$

so dass folgt

$$\partial_t c_\pm(t) = \partial_t \langle v_\pm, \Psi(t)\rangle \overset{\partial_t v_\pm = 0}{=} \langle v_\pm, \partial_t\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle v_\pm, H\Psi\rangle \overset{H^\dagger = H}{=} \frac{1}{i\hbar}\langle Hv_\pm, \Psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \lambda_\pm v_\pm, \Psi\rangle$$

$$\overset{\lambda_\pm \in \mathbb{R}}{=} \frac{\lambda_\pm}{i\hbar}\underbrace{\langle v_\pm, \Psi\rangle}_{c_\pm} = -i\underbrace{\frac{\lambda_\pm}{\hbar}}_{\pm\omega} c_\pm \quad\rightarrow\quad c_\pm(t) = e^{\mp i\omega t}c_\pm(0)$$

das heißt

$$\boxed{\Psi(t) = \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}v_+ - \frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2}}v_-}$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt $t > 0$ in der linken Hälfte des Kastens zu finden ist dann gegeben durch

$$\mathcal{P}_l = |\langle L, \Psi\rangle|^2 = \left|\left\langle L, \frac{e^{-i\omega t}}{2}\left[|L\rangle + |R\rangle\right] - \frac{e^{i\omega t}}{2}\left[|L\rangle - |R\rangle\right]\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{e^{-i\omega t}}{2} - \frac{e^{i\omega t}}{2}\right|^2 = \sin^2(\omega t)$$

Aufgabe 04

Nennen: $|\alpha\rangle =: \Psi_\alpha$.
Beginnen mit den Eigenschaften

$$\left[a, a^\dagger\right] = \mathrm{Id} \ \rightarrow\ \left[a, (a^\dagger)^n\right] = n(a^\dagger)^{n-1} \tag{1}$$

$$a\Psi_0 = 0 \tag{2}$$

schreiben

$$a\Psi_\alpha = a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}(a^\dagger)^n\Psi_0 = a\Psi_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\left[n(a^\dagger)^{n-1}+(a^\dagger)^n a\right]\Psi_0 \overset{(2)}{=} \alpha\underbrace{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^{n-1}}{(n-1)!}(a^\dagger)^{n-1}}_{e^{\alpha a^\dagger}}\Psi_0 = \alpha\Psi_\alpha$$

und sehen dass Ψ_α Eigenvektor von a zum Eigenwert α ist. Demnach folgt

$$\langle\Psi_\alpha,\Psi_\beta\rangle = \left\langle e^{\alpha a^\dagger}\Psi_0,\Psi_\beta\right\rangle = \left\langle \Psi_0,\left(e^{\alpha a^\dagger}\right)^\dagger\Psi_\beta\right\rangle = \left\langle\Psi_0, e^{(\alpha a^\dagger)^\dagger}\Psi_\beta\right\rangle$$

$$= \left\langle\Psi_0, e^{\overline{\alpha}a}\Psi_\beta\right\rangle \overset{a\Psi_\beta=\beta\Psi_\beta}{=} \left\langle\Psi_0, e^{\overline{\alpha}\beta}\Psi_\beta\right\rangle = e^{\overline{\alpha}\beta}\left\langle\left(e^{\beta a^\dagger}\right)^\dagger\Psi_0,\Psi_0\right\rangle = e^{\overline{\alpha}\beta}\left\langle e^{\overline{\beta}a}\Psi_0,\Psi_0\right\rangle \overset{a\Psi_0=0}{=} e^{\overline{\alpha}\beta}\underbrace{\langle\Psi_0,\Psi_0\rangle}_{1} = e^{\overline{\alpha}\beta}$$

Mit $N := a^\dagger a$ folgt dann

$$\langle N\rangle = \left\langle\Psi_\alpha, a^\dagger a\Psi_\alpha\right\rangle = \alpha\left\langle\Psi_\alpha, a^\dagger\Psi_\alpha\right\rangle = \alpha\left\langle a\Psi_\alpha,\Psi_\alpha\right\rangle = |\alpha|^2\underbrace{\langle\Psi_\alpha,\Psi_\alpha\rangle}_{e^{|\alpha|^2}} = |\alpha|^2 e^{|\alpha|^2}$$

$$\left\langle N^2\right\rangle = \left\langle\Psi_\alpha, a^\dagger a a^\dagger a\Psi_\alpha\right\rangle = \alpha\left\langle\Psi_\alpha, a^\dagger a a^\dagger\Psi_\alpha\right\rangle = \alpha\left\langle a\Psi_\alpha, a a^\dagger\Psi_\alpha\right\rangle = |\alpha|^2\left\langle\Psi_\alpha, a a^\dagger\Psi_\alpha\right\rangle$$

$$= |\alpha|^2\left\langle\Psi_\alpha,\left[a^\dagger a + \mathrm{Id}\right]\Psi_\alpha\right\rangle = |\alpha|^2\underbrace{\langle\Psi_\alpha, N\Psi_\alpha\rangle}_{\langle N\rangle} + |\alpha|^2\underbrace{\langle\Psi_\alpha,\Psi_\alpha\rangle}_{1} = |\alpha|^4 e^{|\alpha|^2} + |\alpha|^2$$

und schließlich

$$(\Delta N)^2 = \left\langle N^2\right\rangle - \langle N\rangle^2 = |\alpha|^4 e^{|\alpha|^2} + |\alpha|^2 - |\alpha|^4 e^{2|\alpha|^2}$$

Aufgabe 05

Die Größen $\vec{p}, m$ und r haben jeweils die Bedeutung des relativen Impulses, der effektiven Masse und des relativen Abstandes des Proton-Elektron Systems. Dabei ist

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}\ ,\ \vec{p} = m\dot{\vec{r}}$$

wobei m_e und m_p jeweils die Masse des Elektrons und des Protons ist. Zwei dabei nicht berücksichtigte Eigenschaften realer Wasserstoffatome sind die Spin-Eigenschaften des Elektrons und die durch die relative Bewegung auftretenden relativistischen Effekte!

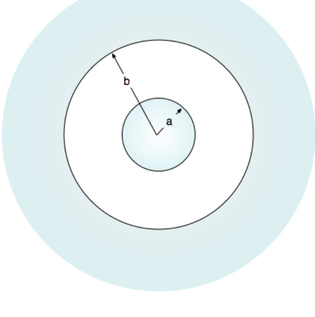
Aufgabe 06

Beginnen mit dem Hamilton Operator

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

und der (zeitfreien) Schrödingergleichung

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



Außerhalb des Gebietes $G := B_b^o \setminus B_a$ macht die Schrödingergleichung nur Sinn wenn $\Psi = 0$ ist. Innerhalb G lautet dann die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r^2}r\Psi(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\underbrace{\left[\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\tan\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}_{\mathcal{L}}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Durch den Ansatz $\Psi(\vec{r}) = \frac{f(r)}{r}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$, mit den Kugelflächenfunktionen Y_{lm}, für die bekanntlich gilt $\mathcal{L}Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$, erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\frac{\partial}{\partial r^2}f(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^3}l(l+1)f(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) - \frac{E}{r}f(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightarrow\ -\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial}{\partial r^2}f(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^3}l(l+1)f(r) - \frac{E}{r}f(r) \stackrel{!}{=} 0$$

Im Grundzustand ($l = m = 0$) vereinfacht sich diese zu

$$f''(r) = -\frac{E2m}{\hbar^2}f(r)$$

Fall: $E < 0$. Dann ist die allgemeine Lösung gegeben durch

$$f(r) = Ae^{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}r} + Be^{-\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r}$$

Durch die Randbedingung $f(a) = f(b) = 0$ (Stetigkeit an den Rändern) folgt dann $A = B = 0$.

Fall: $E = 0$, das heißt $f''(r) = 0$. Dann ist die allgemeine Lösung gegeben durch

$$f(r) = A + Bx$$

Durch die Randbedingungen folgt dann wie vorhin $A = B = 0$. Somit sind die Energieeigenwerte notwendigerweise alle positiv.

Fall: $E > 0$. Dann folgt die allgemeine Lösung

$$f(r) = Ae^{i\Omega r} + Be^{-i\Omega r}\ ,\ \Omega := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

und durch die Randbedingung $f(a) = f(b) = 0$ ergibt sich die Bedingung

$$e^{2i\Omega a} \stackrel{!}{=} e^{2i\Omega b}\ \rightarrow\ \Omega = \frac{\pi n}{b-a}\ ,\ n \in \mathbb{N}$$

und somit die (abzählbaren) Energieeigenwerte

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m(b-a)^2}\ ,\ n \in \mathbb{N}}$$

Speziell ist die Grundzustands-Energie gegeben durch

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2}$$

Aufgabe 07

In quadratischer Näherung können wir schreiben

$$T_r = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} - mc^2 = mc^2\left[\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} - 1\right] \approx mc^2\left[1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4} - 1\right] = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

so dass sich die Hamilton Funktion des Systems ergibt als

$$H_r = T + V = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

Im Quanten-Formalismus ist also der Hamilton Operator gegeben durch

$$\mathcal{H}_r = \underbrace{\frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2}_{\mathcal{H}} - \frac{P^4}{8m^3c^2}$$

wobei $\mathcal{H}$ der Hamilton Operator des *nicht-relativistischen* Oszillators sei. In erster Näherung ergibt sich dann der n-te Energieeigenwert E_n^r gemäß

$$E_n^r = E_n + \underbrace{\langle \Psi_n, [\mathcal{H}_r - \mathcal{H}]\,\Psi_n\rangle}_{\Delta E_n} \tag{3}$$

wobei E_n und Ψ_n jeweils der (nicht-entartete) nicht-relativistische Energieeigenwert und der dazugehörige (normierte) Eigenvektor ist. Aus $P = i \cdot \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \cdot (a^\dagger - a)$ folgt

$$\frac{4}{m^2\omega^2\hbar^2} \cdot P^4 = \left(a^\dagger - a\right)^4 = \left[(a^\dagger)^2 + a^2 - a^\dagger a - aa^\dagger\right]^2$$

$$= (a^\dagger)^4 + a^4 + \underbrace{(a^\dagger a)^2}_{N^2} + \underbrace{(aa^\dagger)^2}_{\substack{(N+\mathrm{Id})^2 \\ =N^2+2N+\mathrm{Id}}} + \underbrace{(a^\dagger)^2 a^2}_{a^\dagger N a} + \underbrace{a^2(a^\dagger)^2}_{\substack{a(N+\mathrm{Id})a^\dagger \\ =aa^\dagger aa^\dagger + aa^\dagger \\ =(N+\mathrm{Id})^2+(N+\mathrm{Id}) \\ =N^2+3N+2\,\mathrm{Id}}} - (a^\dagger)^2 a^\dagger a - a^\dagger a (a^\dagger)^2 - (a^\dagger)^2 aa^\dagger - aa^\dagger (a^\dagger)^2$$

$$- a^2 a^\dagger a - a^\dagger a a^2 - a^2 aa^\dagger - aa^\dagger a^2 + \underbrace{a^\dagger a}_{N}\,\underbrace{aa^\dagger}_{N+\mathrm{Id}} + \underbrace{aa^\dagger}_{N+\mathrm{Id}}\,\underbrace{a^\dagger a}_{N}$$

$$= (a^\dagger)^4 + a^4 + 5N^2 + 7N + 3\,\mathrm{Id} + a^\dagger N a - (a^\dagger)^2 a^\dagger a - a^\dagger a (a^\dagger)^2 - (a^\dagger)^2 aa^\dagger - aa^\dagger (a^\dagger)^2 - a^2 a^\dagger a - a^\dagger a a^2 - a^2 aa^\dagger - aa^\dagger a^2$$

und somit

$$\frac{4}{m^2\omega^2\hbar^2} \cdot \underbrace{\langle P^4\rangle_n}_{\langle \Psi_n, P^4\Psi_n\rangle} = \underbrace{\langle (a^\dagger)^4\rangle_n}_{\substack{\sim\langle \Psi_n, \Psi_{n+4}\rangle \\ =0}} + \underbrace{\langle a^4\rangle_n}_{\substack{\sim\langle \Psi_n, \Psi_{n-4}\rangle \\ =0}} + 5\underbrace{\langle N^2\rangle_n}_{\substack{\langle \Psi_n, n^2\Psi_n\rangle \\ =n^2}} + 7\underbrace{\langle N\rangle_n}_{\substack{\langle \Psi_n, n\Psi_n\rangle \\ =n}} + 3\underbrace{\langle \mathrm{Id}\rangle_n}_{1} + \underbrace{\langle a^\dagger N a\rangle_n}_{\substack{\langle \Psi_n, \sqrt{n}a^\dagger N\Psi_{n-1}\rangle \\ =\sqrt{n}(n-1)\langle \Psi_n, a^\dagger\Psi_{n-1}\rangle \\ =n(n-1)\langle \Psi_n, \Psi_n\rangle \\ =n(n-1)}}$$

$$- \underbrace{\langle (a^\dagger)^2 a^\dagger a + a^\dagger a (a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 aa^\dagger + aa^\dagger (a^\dagger)^2\rangle_n}_{\sim\langle \Psi_n, \Psi_{n+3}\rangle = 0} - \underbrace{\langle a^2 a^\dagger a + a^\dagger a a^2 + a^2 aa^\dagger + aa^\dagger a^2\rangle_n}_{\sim\langle \Psi_n, \Psi_{n-3}\rangle = 0}$$

$$= 6n^2 + 6n + 3$$

Eingesetzt in Gleichung (3) ergibt

$$\Delta E_n = -\frac{1}{8m^3c^2}\left\langle \Psi_n, P^4\Psi_n\right\rangle = -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2} \cdot \left(6n^2 + 6n + 3\right)$$