Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 02 - Lösungen

Stilianos Louca

29. April 2008

Aufgabe 04

Zeigen zuerst: $b := \langle \cdot, \cdot \rangle : P_n \times P_n \to \mathbb{R}$ ist Bilinearform. Dabei sei P_n der Raum aller Polynome $p \in \mathbb{R}[X]$ vom Grad$\leq n$. Offensichtlich ist b symmetrisch, da $fg = gf$. Bilinearität folgt direkt aus Linearität des Riemann Integrals:

$$\langle af + bg, h \rangle = \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} (af + bg) \cdot h \; dx = a \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} fh \; dx + b \int_{\mathbb{R}} gh \; dx = a \langle f, h \rangle + b \langle g, h \rangle$$

Aus Bilinearität folgt auch sofort $\langle 0, f \rangle = 0 \; \forall \; f \in P_n$, insbesondere für $f = 0$.
Sei $f \in P_n$ mit $f \neq 0$, das heißt $\exists \; x_0 \in \mathbb{R}$ mit $f(x_0) \neq 0$. Da f stetig ist (da Polynom) gibt es ein $\varepsilon > 0$ mit $f(y) \neq 0$ für $y \in [x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$, woraus folgt

$$\langle f, f \rangle = \int_{\mathbb{R} \setminus [x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]} \underbrace{e^{-x^2} \cdot (f(x))^2}_{\geq 0} dx + \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \underbrace{e^{-x^2} \cdot (f(x))^2}_{> 0} dx > 0$$

Somit ist b eine positiv definite, symmetrische Bilinearform bzw. ein Skalarprodukt, und somit insbesondere nicht ausgeartet.
Betrachten nun die *Standardbasis* $f_1 := 1, f_2 := x, f_3 := x^2, .., f_{n+1} := x^n \in P_n$ des $(n+1)$-dimensionalen Vektorraumes P_n für $n = 4$ und die Matrix von b bzgl. dieser. Allgemein gilt:

$$\text{Für } f \in \mathcal{C}(\mathbb{R}) \text{ ungerade } : \int_{\mathbb{R}} f(x) \; dx = \int_{-\infty}^{0} f(x) \; dx + \int_{0}^{\infty} f(x) \; dx$$

$$= \int_{0}^{-\infty} f(-x) \; dx + \int_{0}^{\infty} f(x) \; dx \overset{u:=-x}{=} - \int_{0}^{\infty} f(u) \; du + \int_{0}^{\infty} f(x) \; dx = 0$$

$$\text{Für } n \in \mathbb{N} \text{ ungerade} : \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^n \; dx = 0 \quad \text{(da Integrant ungerade)}$$

$$\text{Für } 2 \leq n \in \mathbb{N} \text{ gerade} : \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^n \; dx = -\frac{1}{2} \left[e^{-x^2} x^{n-1} \, |_{-\infty}^{\infty} - \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} (n-1) x^{n-2} \; dx \right] = \frac{(n-1)}{2} \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^{n-2} \; dx$$

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} \; dx = \sqrt{\pi} \quad \text{(Siehe Übungsserie 01)}$$

Somit ist dann speziell:

$$\langle 1,1\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2}\ dx = \sqrt{\pi}$$

$$\langle 1,x\rangle = \langle x,1\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x\ dx = 0$$

$$\left\langle 1,x^2\right\rangle = \left\langle x^2,1\right\rangle = \langle x,x\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^2\ dx = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2}\ dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\left\langle 1,x^3\right\rangle = \left\langle x^3,1\right\rangle = \left\langle x,x^2\right\rangle = \left\langle x^2,x\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^3\ dx = 0$$

$$\left\langle 1,x^4\right\rangle = \left\langle x^4,1\right\rangle = \left\langle x,x^3\right\rangle = \left\langle x^3,x\right\rangle = \left\langle x^2,x^2\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^4\ dx = \frac{3}{2}\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^2\ dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$$

$$\left\langle x,x^4\right\rangle = \left\langle x^4,x\right\rangle = \left\langle x^2,x^3\right\rangle = \left\langle x^3,x^2\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^5\ dx = 0$$

$$\left\langle x^2,x^4\right\rangle = \left\langle x^4,x^2\right\rangle = \left\langle x^3,x^3\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^6\ dx = \frac{5}{2}\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^4\ dx = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}$$

$$\left\langle x^3,x^4\right\rangle = \left\langle x^4,x^3\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^7\ dx = 0$$

$$\left\langle x^4,x^4\right\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^8\ dx = \frac{7}{2}\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-x^2} x^6\ dx = \frac{105\sqrt{\pi}}{16}$$

woraus sich die Matrix von b ergibt als:

$$B := (b_{ij}) = b(f_i,f_j) = \sqrt{\pi}\cdot\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{3}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{3}{4} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{3}{4} & 0 & \frac{15}{8} \\ 0 & \frac{3}{4} & 0 & \frac{15}{8} & 0 \\ \frac{3}{4} & 0 & \frac{15}{8} & 0 & \frac{105}{16} \end{pmatrix}$$

Somit ist für beliebige Polynome $p = p^i f_i,\ q = q^j f_j \in P_4$:

$$\langle p,q\rangle = p^i q^j b_{ij}$$

Wenden nun das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren an um eine Orthogonalbasis $e_1, ..e_5$ zu finden:

$$e_1 := f_1$$

$$e_2 := f_2 - \frac{\langle e_1, f_2 \rangle}{\langle e_1, e_1 \rangle} \cdot e_1 = f_2 - 0 \cdot e_1 = f_2$$

$$e_3 := f_3 - \frac{\langle e_1, f_3 \rangle}{\langle e_1, e_1 \rangle} \cdot e_1 - \frac{\langle e_2, f_3 \rangle}{\langle e_2, e_2 \rangle} \cdot e_2 = f_3 - \frac{1}{2} e_1 - 0 \cdot e_2 = f_3 - \frac{1}{2} f_1$$

$$e_4 := f_4 - \frac{\langle e_1, f_4 \rangle}{\langle e_1, e_1 \rangle} \cdot e_1 - \frac{\langle e_2, f_4 \rangle}{\langle e_2, e_2 \rangle} \cdot e_2 - \frac{\langle e_3, f_4 \rangle}{\langle e_3, e_3 \rangle} \cdot e_3 = f_4 - 0 \cdot e_1 - \frac{3}{2} \cdot e_2 - 0 \cdot e_3 = f_4 - \frac{3}{2} f_2$$

$$e_5 := f_5 - \frac{\langle e_1, f_5 \rangle}{\langle e_1, e_1 \rangle} \cdot e_1 - \frac{\langle e_2, f_5 \rangle}{\langle e_2, e_2 \rangle} \cdot e_2 - \frac{\langle e_3, f_5 \rangle}{\langle e_3, e_3 \rangle} \cdot e_3 - \frac{\langle e_4, f_5 \rangle}{\langle e_4, e_4 \rangle} \cdot e_4 = f_5 - \frac{3}{4} \cdot e_1 - 0 \cdot e_2 - \frac{\frac{3}{2}}{\frac{1}{2}} \cdot e_3 - 0 \cdot e_4$$

$$= \frac{3}{4} f_1 - 3 f_3 + f_5$$

und bekommen so eine Orthogonalbasis

$$\boxed{1, \ x, \ -\frac{1}{2} + x^2, \ -\frac{3}{2} x + x^3, \ \frac{3}{4} - 3x^2 + x^4}$$

Um eine Orthonormalbasis $e'_1, .., e'_5$ zu konstruieren normieren wir einfach die jeweiligen Vektoren, das heißt setzen

$$e'_i := \frac{1}{\sqrt{\langle e_i, e_i \rangle}} \cdot e_i$$

und erhalten

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}, \ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot x, \ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot \left[-\frac{1}{2} + x^2 \right], \ \frac{2}{\sqrt{3}\sqrt[4]{\pi}} \cdot \left[-\frac{3}{2} x + x^3 \right], \ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt[4]{\pi}} \cdot \left[\frac{3}{4} - 3x^2 + x^4 \right]}$$

Aufgabe 05

a) Betrachten einen beliebigen linearen Differentialoperator $\mathcal{L} : f(\vec{r}, t) \to g(\vec{r}, t)$ (bzgl. der Variablen $\vec{r}, t$) und die Funktion

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f_k(\vec{r}, t) \cdot \tilde{\Psi}(k) \ dk$$

wobei $\tilde{\Psi}(k)$ erstmal beliebig sein soll. Gilt allgemein $\mathcal{L}\Psi(\vec{r}, t) = 0$ so muss gelten

$$0 = \mathcal{L}\Psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} f_k(\vec{r}, t) \cdot \tilde{\Psi}(k) \ dk = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) \cdot \mathcal{L} f_k(\vec{r}, t) \ dk$$

Da $\tilde{\Psi}(k)$ beliebig sein kann, muss insbesondere $\mathcal{L} f_k(\vec{r}, t) = 0$ für alle k gelten.
Betrachten nun den Spezialfall

$$\mathcal{L} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right]$$

im eindimensionalen Fall, für $V(\vec{r}, t) = 0$ (freies Teilchen) und

$$f_k(x, t) := e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad \text{(Grundmode)}$$

Gehen damit in die DGL ein:

$$\mathcal{L}f_k(x,t) = 0 \;\Rightarrow\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \omega\hbar\Psi(x,t) \overset{!}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi(x,t)$$

woraus sich direkt die Dispersionsrelation

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

ergibt.

b) Es muss stets gelten:

$$\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x,t)|^2 \; dx = 1$$

woraus insbesondere für $t = 0$ folgt:

$$1 \overset{!}{=} \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x,0)|^2 \; dx = \int_{\mathbb{R}} A^2 e^{-\frac{x^2}{b^2}} \underbrace{\left|e^{ik_0 x}\right|^2}_{1} \; dx = A^2 \cdot b\sqrt{\pi}$$

$$\Rightarrow \; A = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}$$

c) Betrachten eine beliebige Gaussförmige Funktion

$$f(x) = F_0 e^{-\frac{c}{2}x^2 + ik_0 x}$$

berechnen deren Fouriertransformierte

$$\mathcal{F}(f)(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-ikx} \; dx = \frac{F_0}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{c}{2}x^2 + i(k_0-k)x} \; dx = \frac{F_0}{\sqrt{c}}e^{-\frac{1}{2c}(k_0-k)^2} = \frac{F_0}{\sqrt{c}}e^{-\frac{k_0^2}{2c}} \cdot e^{-\frac{1}{2c}k^2 + \frac{k_0}{c}k}$$

und sehen dass diese auch die Gestalt einer Gauss-Glocke hat.
Zum Zeitpunkt $t = 0$ gilt

$$\frac{\Psi(0,x)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}e^{ik_0 x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{ikx}\tilde{\Psi}(k) \; dk$$

das heißt $\tilde{\Psi}(k)$ ist genau die Fouriertransformierte der Gaussförmigen Funktion

$$f(x) := \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2b^2} + ik_0 x}$$

und somit nach obiger Überlegung auch Gaussförmig.

d) Es ist nach obiger Rechnung

$$\tilde{\Psi}(k) = \mathcal{F}(f)(k) = \frac{A\,|b|}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{k_0^2 b^2}{2}} \cdot e^{-\frac{b^2}{2}k^2 + k_0 b^2 k} \in \mathbb{R}$$

$$\rightarrow \; \mathcal{S}(k) := \left|\tilde{\Psi}(k)\right|^2 = \frac{A^2 b^2}{2\pi}e^{-k_0^2 b^2} \cdot e^{-b^2 k^2 + 2k_0 b^2 k}$$

Der Maximalwert von $\mathcal{S}(k)$ liegt genau dort wo $-b^2k^2 + 2k_0b^2k$ maximal ist. Ableiten und annullieren ergibt genau ein Maximum bei $k = k_0$. Sei $k \in \mathbb{R}$ so dass $\mathcal{S}(k) = \dfrac{\mathcal{S}(k_0)}{e}$ ist, also

$$e^{-b^2k^2 + 2k_0 b^2 k} = \frac{1}{e}e^{-b^2k_0^2 + 2k_0^2 b^2} = e^{k_0^2 b^2 - 1}$$

Dies ergibt die quadratische Gleichung

$$b^2k^2 - 2b^2k_0k + (b^2k_0^2 - 1) = 0$$

deren Lösungen die Werte $k = k_0 \pm \dfrac{1}{|b|}$ sind. Somit ergibt sich für $\mathcal{S}$ die Breite

$$\boxed{\Delta k = \frac{2}{|b|}}$$

Aufgabe 06

Seien α, β, γ jeweils die Wahrscheinlichkeitskoeffizienten (Einstein Koeffizienten) der spontanen Emission, der induzierten Emission und der induzierten Absorption eines Photons von einem Atom für gegebene Frequenz ν - entsprechend einem Energieniveau Unterschied $h\nu$ - zwischen den Zuständen $z_1 \xrightarrow{h\nu} z_2$. Dabei sind diese Koeffizienten so zu deuten, dass die Wahrscheinlichkeit des jeweiligen Übergängangs dW pro Zeiteinheit gegeben ist durch

$$dW^{\alpha} = \alpha d\Omega \ , \ dW^{\beta} = \beta\rho(\nu, T, \Omega)d\Omega \ , \ dW^{\gamma} = \gamma\rho(\nu, T, \Omega)d\Omega$$

wobei $\rho_i(\nu, T, \Omega) = \dfrac{dE}{d\nu \ dV \ d\Omega}$ die spektrale Energiedichte im Raum pro Raumwinkel, für den Polarisationszustand i, bei gegebener Temperatur T ist. Im Gleichgewicht muss gelten:

$$N_{z_1}\left(dW^{\alpha} + dW^{\beta}\right) = N_{z_2} dW^{\gamma} \quad : \ N_{z_j} : \text{Anzahl der Atome im Zustand } z_j$$

Dabei ist die Anzahl N_{z_j} der Atome im Zustand z_j (entsprechend der Energie E_j) durch die Boltzmann-Verteilung gegeben:

$$N_{z_j} \sim e^{-\frac{E_j}{kT}} \ , \ k : \text{Boltzmann-Konstante}$$

so dass folgt:

$$e^{\frac{h\nu}{kT}}\gamma\rho(\nu, T, \Omega) = e^{\frac{E_1 - E_2}{kT}}\gamma\rho(\nu, T, \Omega) = \alpha + \beta\rho(\nu, T, \Omega) \tag{1}$$

Vernachlässigt man nun die induzierte Emission, das heißt $b_i \to 0$, so erhält man

$$e^{\frac{h\nu}{kT}}\gamma\rho(\nu, T, \Omega) \approx \alpha \ \to \ \rho(\nu, T, \Omega) = \frac{\alpha}{\gamma}e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

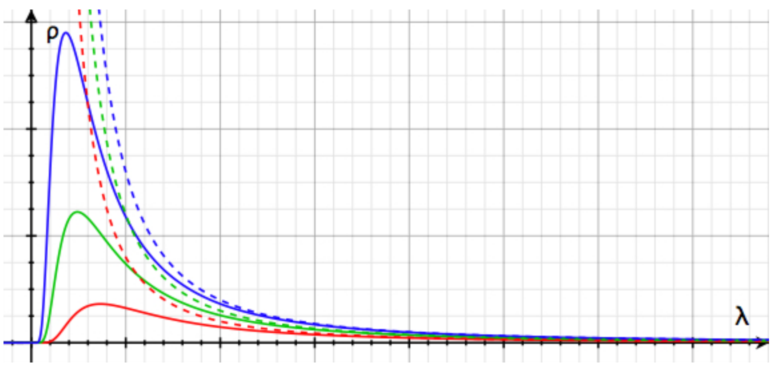
- Fordern wir die Übereinstimmung zwischen oberem Ergebnis und dem Rayleight-Jeans Gesetz für niedrige Frequenzen $\nu \to 0$, muss gelten

$$\rho(\nu \to 0, T, \Omega) \approx \frac{\alpha}{\gamma} \cdot \left(1 - \frac{h\nu}{kT}\right) \stackrel{!}{=} \underbrace{\frac{2kT}{c^3}\nu^2}_{\substack{\text{R.J. Spektrale} \\ \text{Energiedichte} \\ \text{pro Raumwinkel} \\ \text{und Frequenz}}} \quad \to \ \frac{\alpha}{\gamma} = \frac{2kT\nu^2}{c^3} \cdot \left(1 - \frac{h\nu}{kT}\right)^{-1} \approx \frac{2kT\nu^2}{c^3} \cdot \left(1 + \frac{h\nu}{kT}\right) = \frac{2\nu^2}{c^3}(kT + h\nu)$$

Die spektrale Energiedichte (beide Polarisationszustände) pro Raumwinkel ergibt sich also für $b \to 0$ als

$$\boxed{\rho(\nu, T, \Omega) = \frac{2\nu^2}{c^3} \cdot (kT + h\nu) \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}}$$

Qualitativ sieht diese Verteilung für 3 verschiedene $T \sim \{1, 1.5, 2\}$: {rot,grün,blau} wie folgt aus (kontinuierliche Kurven):



Bemerke: Für sehr kleine Frequenzen $\nu \to 0$, $\lambda \to \infty$ bzw. sehr hohe Temperaturen $T \to \infty$ geht oberes in das Rayleigh-Jeans Gesetz über (gestrichene Kurven):

$$\rho(\nu, T, \Omega) \overset{\nu \to 0}{\longrightarrow} \frac{2kT\nu^2}{c^3}$$

- Vernachlässigen wir andernfalls den Einfluss der Temperatur auf $\frac{\alpha}{\gamma}$, das heißt

$$\frac{\alpha}{\gamma} \approx \frac{2\nu^2}{c^3} h\nu$$

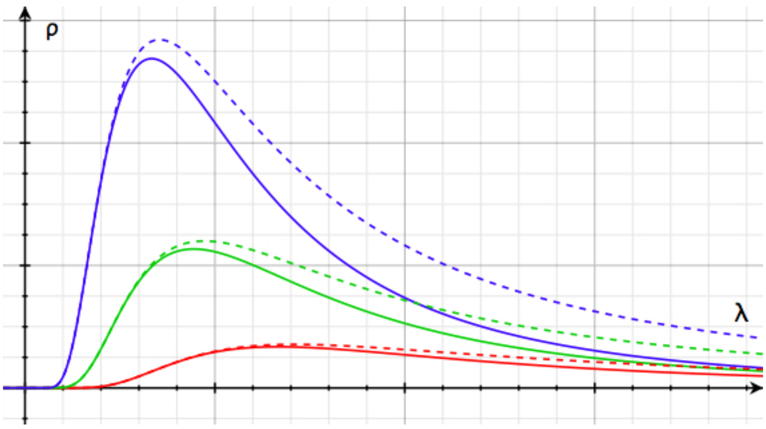
(trifft eigentlich nur für niedrige Temperaturen bzw. $h\nu >> kT$ zu) so ergibt sich das Wiensche Strahlungsgesetz:

$$\boxed{\rho(\nu, T, \Omega) = \frac{2h\nu^3}{c^3} \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}}$$

Nach Erwartungen, stimmt dies nur für niedrige Temperaturen bzw. hohe Frequenzen mit dem Planckschen Gesetz überein:

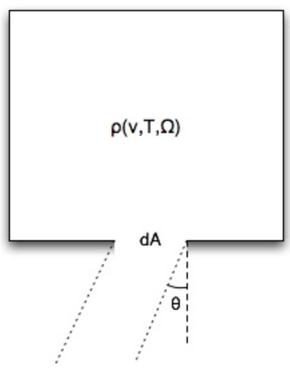
$$\frac{2h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \overset{h\nu \to \infty}{\longrightarrow} \frac{2h\nu^3}{c^3} \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

Oberer Sachverhalt wird in folgender Abbildung (Parameter analog zu vorhin) verdeutlicht:



wobei die unterbrochenen Kurven dem Planckschen und die kontinuierlichen dem Wienschen Strahlungsgesetz entsprechen.

Bemerkung: Bei gegebener spektraler Energiedichte $\rho(\nu, T, \Omega)$ pro Raumwinkel in einem Hohlraum ergibt sich die pro Flächeneinheit dA, pro Zeiteinheit dt und Frequenzeinheit $d\nu$ emittierte Energie dE durch einfache geometrische Überlegungen:



als Summation der abgestrahlten Leistung über die Halbkugel über dem Flächenelement dA, gemäß

$$J(\nu, T) := \frac{dE}{d\nu\ dA\ dt} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} c\rho(\nu, T, \Omega) \cos\vartheta \cdot \sin\vartheta\ d\vartheta\ d\varphi = \pi c \rho(\nu, T, \Omega)$$