JINMING LU, KONRAD SCHÖNLEBER

Repetitorium Theoretische Quantenmechanik, WS 08/09

Lösung

1.1 (Freie Teilchenströme)

a) Leiten sie aus folgender Kontinuitätsgleichung einen Ausdruck für die quantenmechanische Teilchenstromdichte $j(x,t)$ (in 1d) her:

$$\partial P(x,t) + \partial_x j(x,t) = 0$$

Lösung:

Wir setzen ein:

$$\partial_t P(x,t) = \partial_t(\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)) = \Psi^*\partial_t\Psi + \Psi\partial_t\Psi^* = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi\partial_x^2\Psi^* - \Psi^*\partial_x^2\Psi\right) =$$

$$= -\partial_x\left(\frac{\hbar}{2im}(\Psi^*\partial_x\Psi - \Psi\partial\Psi^*)\right)$$

$$\Rightarrow j(x,t) = \frac{\hbar}{2im}(\Psi(x,t)^*\partial_x\Psi(x,t) - \Psi(x,t)\partial_x\Psi(x,t)^*)$$

b) Berechnen sie die Stromdichten der Teilchenströme, die beschrieben sind durch:

$$\Psi_1(x) = e^{ikx} \quad ; \quad \Psi_2(x) = e^{-ikx}$$

Lösung:

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2im}(e^{\mp ikx}(\pm ik)e^{\pm ikx} - e^{\pm ikx}(\mp ik)e^{\mp ikx}) = \frac{\pm\hbar k}{m}$$

Dies entspricht anschaulich (für nicht zu große k) der Geschwindigkeit der Teilchen des Stromes.

1.2 (Potentialstufe)

Ein von links einlaufender Teilchenstrom aus Teilchen der Energie E treffe auf folgendes Potential:

$$V(x) = V_0 \cdot \Theta(x)$$

a) Beschreiben Sie die Stromdichte links und rechts von der Potentialstufe im Falle

$$E =\geq V_0$$

Lösung:

Im Bereich mit $V(x) = 0$ erhalten wir für die Wellenfunktion:

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x \Psi(x) \Rightarrow \Psi(x) = a \cdot e^{ikx} + b \cdot e^{-ikx}$$

mit $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$.
Wir setzen $a = 1$ und $b =: R$ als Reflexionskoeffizient, erhalten also:

$$\Psi_{x\leq 0}(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

Im Bereich mit $V(x) = V_0$ ergibt sich die Schrödingergleichung zu:

$$E\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x + V_0\right)\Psi(x) \Rightarrow \Psi(x) = c \cdot e^{iqx} + d \cdot e^{-iqx}$$

mit $q = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}$.
Da von rechts kein Teilchenstrom einläuft, folgt $d = 0$. Wir definieren noch den Transmissionskoeffizienten $T := c$ und erhalten:

$$\Psi_{x\geq 0}(x) = Te^{iqx}$$

Nun gilt also für die Stromdichten:

$$j_{x\leq 0}(x) = \frac{\hbar}{2im}\left((e^{-ikx} + R^*e^{ikx})(ik)(e^{ikx} - Re^{-ikx}) - (e^{ikx} + Re^{-ikx})(ik)(-e^{-ikx} + R^*e^{ikx})\right) =$$

$$= \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2)$$

und

$$j_{x\geq 0}(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(T^*e^{-iqx}(iq)Te^{iqx} - Te^{iqx}(-iq)T^*e^{-iqx}\right) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2$$

b) Folgern Sie aus der Erhaltung der Stromdichte und der stetigen Differenzierbarkeit von Ψ Formeln für Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Lösung:

Aus der Stromdichteerhaltung sehen wir sofort:

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2$$

Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion lesen wir sofort ab:

$$1 + R = T$$

Die Stetigkeit der Ableitung liefert:

$$ik(1 - R) = iqT$$

Wir können nun berechnen:

$$R = T - 1 = \frac{k}{q}(1 - R) - 1 \Leftrightarrow qR = k - q - kR \Leftrightarrow R = \frac{k - q}{k + q}$$

und damit:

$$T = \frac{2k}{k + q}$$

c) Welcher Anteil des Teilchenstromes wird bei $V_0 = \frac{E}{2}$ transmittiert?

Lösung:

Wir vergleichen die einlaufende Stromdichte mit der transmittierten.

$$\frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{\hbar q}{m}|T^2| / \frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar q}{m}\frac{4k^2}{(k+q)^2} / \frac{\hbar k}{m} = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

Wegen $V_0 = \frac{E}{2}$ haben wir $q = \frac{1}{\sqrt{2}}k$ und damit:

$$\frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{\sqrt{2}^5}{(1+\sqrt{2})^2} \approx 0,97$$

1.3 (Potentialtopf)

Berechnen Sie für folgenden Hamiltonoprator die Eigenzustände und Eigenenergieen

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

mit $V(x) = \infty$ falls $|x| > a$ und $V(x) = 0$ falls $|x| \leq a$

Lösung:

Es gilt: $\Psi(x) = 0$ falls $|x| > a$.
Im Inneren des Topfes reduziert sich die Schrödingergleichung zu:

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

Die Lösungen haben also in reeller Schreibweise die folgende Form:

$$\Psi(x) = Asin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + Bcos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

Da die Lösungen bei $x = \pm a$ gleich 0 sein müssen, erkennen wir zunächst $A = 0$ oder $B = 0$, da allgemein gilt:

$$0 = Asin(-y) + Bcos(-y) = -Asin(y) + Bcos(y) = Asin(y) + Bcos(y) = 0$$

$$\Rightarrow A = 0 \ oder \ sin(y) = 0$$

Im 2.Fall ist dann $cos(y) \neq 0$ also $B = 0$. Wir erhalten also nur gerade und ungerade Lösungen.
Mit den Randbedingungen $\Psi(\pm a) = 0$ folgt zunächst:

$$\Psi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2a}x\right) \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\Psi_u(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad n \in \mathbb{N}$$

Wir erhalten also für die Energie der Zustände:

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2} \quad m \in \mathbb{N}$$

1.4 (Kronig-Penney-Modell)

Das Kronig-Penney-Modell ist ein stark vereinfachtes Modell eines kristallinen Festkörpers. Dazu wird ein periodisches Potential aus lauter repulsive δ-Funktionen angenommen:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{a}\sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0\delta(x-na)$$

Wir werden nun mit diesem Modell schrittweise das Auftreten von "Energiebändern" in Festkörpern erklären.

a) Überlegen Sie wie sich $\Psi(x)$ und $\Psi(x+a)$ unterscheiden

Lösung:

Da gilt $V(x) = V(x+a)$ und auch der kinetische Term im Hamiltonoperator Translationsinvariant ist, ist der gesamte Hamiltonoperator translationsinvariant. Dies bedeutet aber auch, dass alle Observablen Translationsinvariant sind. Insbesondere ist:

$$|\Psi(x)|^2 = P(x) = P(x+a) = |\Psi(x+a)|^2 \Rightarrow \Psi(x+a) = e^{i\phi}\Psi(x)$$

Die Wellenfunktion ändert sich also nur um einen Phasenfaktor.

b) Zeigen Sie, dass $\partial_x\Psi(x)|_{x=na}$ unstetig ist und berechnen Sie $\partial_x\Psi(x)|_{x\geq na} - \partial_x\Psi(x)|_{x\leq na}$

(Hinweis: Integrieren Sie über die 2.Ableitungen)

Lösung:

Wir betrachten die Differenz aus linksseitiger und rechtsseitiger Ableitung von $\Psi(x)$ an einem beliebigen δ-Peak:

$$\lim_{h\to 0}\frac{1}{h}(\Psi(na+h)-\Psi(na)-\Psi(na-h)+\Psi(na)) = \lim_{h\to 0}\left(\int_{na}^{na+h}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)dx - \int_{na}^{na-h}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)dx\right)$$

$$= \lim_{h\to 0}\int_{na-h}^{na+h}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)dx \underbrace{=}_{Schr.-Gl.} \lim_{h\to 0}\int_{na-h}^{na+h}\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\Psi(x)dx = \lim_{h\to 0}\frac{\lambda}{a}V_0\Psi(na) = \frac{\lambda}{a}\Psi(na)$$

c) Teilen Sie die x-Achse in Bereiche zwischen Delta-Peaks ein und folgern Sie aus den Ergebnissen aus a) und b), dass es Werte von k bzw. E gibt, die nicht erlaubt sind (Bandlücken)

(Hinweis: Verwenden Sie für die freien Teilchen Lösungen zwischen den δ-Peaks die reelle Schreibweise)

Lösung:

Wir teilen die x-Achse in die Bereiche $R_n = [(n-1)a, na]$ ein.
Innerhalb dieser Bereiche erhalten wir die Lösungen:

$$\Psi_n(x) = a_n sin(k(x-(n-1)a)) + b_n cos(k(x-(n-1)a))$$

$$\Psi_{n+1}(x) = a_{n+1} sin(k(x-na)) + b_{n+1} cos(k(x-na))$$

Aus der Stetigkeit von $\Psi(x)$ im Punkt $x = na$ und dem Ergebnis von b) erhalten wir:

$$a_n sin(ka) + b_n cos(ka) = b_{n+1}$$

$$ka_{n+1} - ka_n cos(ka) + kb_n sin(ka) = \frac{\lambda}{a} V_0 b_{n+1}$$

Wir erhalten (über $sin^2 + cos^2 = 1$):

$$a_n = \left(sin(ka) - \frac{\lambda V_0}{ka} cos(ka) \right) b_{n+1} + a_{n+1} cos(ka)$$

$$b_n = \left(\frac{\lambda V_0}{ka} sin(ka) + cos(ka) \right) b_{n+1} - a_{n+1} sin(ka)$$

Nun verwenden wir ds Ergebnis aus a) und stellen fest:

$$a_n = e^{i\phi} a_{n+1}$$

$$b_n = e^{i\phi} b_{n+1}$$

Damit erhalten wir:

$$(e^{i\phi} - cos(ka)) a_{n+1} = \left(sin(ka) - \frac{\lambda V_0}{ka} cos(ka) \right) b_{n+1}$$

$$a_{n+1} sin(ka) = \left(\frac{\lambda V_0}{ka} sin(ka) + cos(ka) \right) b_{n+1} - e^{i\phi} b_{n+1}$$

Kreuzweise Multiplikation ergibt:

$$(e^{i\phi} - cos(ka)) \left(\frac{\lambda V_0}{ka} sin(ka) + cos(ka) - e^{i\phi} \right) a_{n+1} b_{n+1} = sin(ka) \left(sin(ka) - \frac{\lambda V_0}{ka} cos(ka) \right) a_{n+1} b_{n+1}$$

$$\Rightarrow -e^{2i\phi} + e^{i\phi}(2cos(ka) + \frac{\lambda V_0}{ka} sin(ka)) - 1 = 0$$

$$\Leftrightarrow cos(ka) + \frac{1}{2} \frac{\lambda V_0}{ka} sin(ka) = cos(\phi)$$

Der Term auf der rechten Seite kann höchstens 1 werden. Damit gibt es unerlaubte Werte für k und somit auch für E.

1.5 (Wichtige Rechenregeln für Kommutatoren)

a) Formen Sie folgende Terme so um, dass nur noch Summen von Kommutatoren mit einzelnen Operatoren vorkommen:

$$[A, BC] \quad ; \quad [\lambda A + B, C]$$

Lösung:

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C]$$

$$[\lambda A + B, C] = (\lambda A + B)C - C(\lambda A + B) = [\lambda A, C] + [B, C] = \lambda [A, C] + [B, C]$$

b) Zeigen Sie folgende Identitäten:

$$[[A, B], C] + [[C, A], B] + [[B, C], A] = 0 \quad ; \quad [A^\dagger, B^\dagger] = [B, A]^\dagger \quad ; \quad [H, A^\dagger] = -[H, A^\dagger]$$

Lösung:

$$[[A,B],C]+[[C,A],B]+[[B,C],A] = ABC-BAC-CAB+CBA+CAB-ACB-BCA+BAC+$$

$$+BCA-CBA-ABC+ACB=0$$

$$[A^\dagger,B^\dagger] = A^\dagger B^\dagger - B^\dagger A^\dagger = (BA)^\dagger - (AB)^\dagger = [B,A]^\dagger$$

$$[H,A^\dagger] = HA^\dagger - A^\dagger H = (AH)^\dagger - (HA)^\dagger = -[H,A]^\dagger$$

c) Zeigen Sie, dass sich jeder Operator in eine Summe aus einem hermiteschen und einem anti-hermiteschen (d.h. $A^\dagger = -A$) Operator zerlegen lässt

Lösung:

Setze:

$$A_H = \frac{1}{2}(A + A^\dagger)$$

$$A_{AH} = \frac{1}{2}(A - A^\dagger)$$

Dann ist $A_H + A_{AH} = A$ mit hermiteschem A_H und anti-hermiteschen A_{AH}.

1.6 (Berechnung von Kommutatoren)

a) Berechnen Sie (in 1d)

$$[x^2,p] \quad ; \quad [x,Pol(p)]$$

wobei $Pol(p)$ ein beliebiges Polynom in p ist.

Lösung:

Wir müssen jeweils die Wirkung des Kommutators auf eine Ortswellenfunktion $\Psi(x)$ betrachten:

$$[x^2,p]\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}(x^2\partial_x - \partial_x x^2)\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}(x^2\partial_x - 2x - x^2\partial_x)\Psi(x) = 2x\frac{\hbar}{i}\Psi(x)$$

$$\Rightarrow [x^2,p] = 2x\frac{\hbar}{i}$$

Wir betrachten nun zunächst den Term:

$$[x,p^n]\Psi(x) = \frac{\hbar^n}{i^n}(x\partial_x^n - \partial_x^n x)\Psi(x) = \frac{\hbar^n}{i^n}x\partial_x^n\Psi(x) - \frac{\hbar^n}{i^n}\partial_x^{n-1}(\Psi(x) + x\partial_x\Psi(x)) =$$

$$\frac{\hbar^n}{i^n}x\partial_x^n\Psi(x) - \frac{\hbar^n}{i^n}\partial_x^{n-1}\Psi(x) - \frac{\hbar^n}{i^n}\partial_x^{n-1}x\partial_x\Psi(x)$$

Induktiv erhält man also:

$$\partial_x^n(x\Psi(x)) = n\partial_x^{n-1}\Psi(x) + x\partial_x^n\Psi(x)$$

Es ergibt sich also für den gesuchten Kommutator mit $Pol(p) = \sum_{n=0}^N a_n p^n$:

$$[x,Pol(p)] = -\sum_{n=0}^{N}\frac{a_n\hbar^n}{i^n}n\partial_x^{n-1}$$

b) Berechnen Sie die Kommutatoren

$$[A, A^\dagger] \quad , \quad [H, A] \quad , \quad [H, A^\dagger]$$

Mit den Operatoren:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}$$

(Hinweis: finden Sie zunächst einen Zusammenhang zwischen H und A bzw. $A^\dagger$)

Lösung:

Es gilt:

$$A^\dagger A = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}m\omega x^2 + \frac{p^2}{2m\omega} + \frac{i}{2}[x, p] = \frac{1}{2}m\omega x^2 + \frac{p^2}{2m\omega} - \frac{1}{2}\hbar = \frac{H}{\omega} - \frac{1}{2}\hbar$$

$$\Rightarrow H = \omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Damit folgen nun die gesuchten Kommutatoren:

$$[A, A^\dagger] = AA^\dagger - A^\dagger A = \frac{i}{2}[p, x] - \frac{i}{2}[x, p] = \hbar$$

$$[H, A] = [\omega A^\dagger A, A] \underbrace{=}_{1.5a)} \omega(-[A, A^\dagger]A - A^\dagger \underbrace{[A, A]}_{=0}) = -\hbar\omega A$$

$$[H, A^\dagger] \underbrace{=}_{1.5b)} -[H, A]^\dagger = \hbar\omega A^\dagger$$