JINMING LU, KONRAD SCHÖNLEBER

Repetitorium Theoretische Quantenmechanik, WS 08/09

FORMELSAMMLUNG

1. Eindimensionaler harmonischer Oszillator

   (a) Analytische Behandlung:

   Hamiltonoperator: $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

   Energieeigenwerte: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

   Analytische Lösung:

   $$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \qquad H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}y^n}e^{-y^2}$$

   (b) Algebraische Behandlung:

   Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

   $$a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x + ip), \qquad a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x - ip)$$

   Umkehrformeln: $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^+ - a)$

   Hamiltonoperator: $\mathcal{H} = \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$

   Wirkung auf Eigenzustände:

   $$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \qquad a^+ a|n\rangle = n|n\rangle$$

   Vertauschungsrelationen: $[a, a^+] = 1 \quad [\mathcal{H}, a] = -\hbar\omega a \quad [\mathcal{H}, a^+] = \hbar\omega a^+$

2. Dreidimensionale Probleme

   (a) Separationsansatz für $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$

   $\Rightarrow$ Ansatz: $\psi(x,y,z) = u(x)v(y)w(z) \qquad E = E_1 + E_2 + E_3$

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V_1(x)u(x) = E_1 u(x)$$

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}v(y) + V_2(y)v(y) = E_2 v(y)$$

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}w(z) + V_3(z)w(z) = E_3 w(z)$$

(b) Zweiteilchenproblem und Zentralpotential

Hamiltonoperator für zwei Teilchen: $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 + -\frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + \mathcal{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$

Zweiteilchenpotential hängt nur vom Abstand ab: $\mathcal{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$

Schwerpunkts- und Relativbewegung:

$$\mathbf{X} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \qquad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \qquad M = m_1 + m_2 \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Vereinfachung als Zentralpotentialproblem: $V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|) = V(r)$

$\Rightarrow$ Ansatz: $\psi(x, y, z) = \underbrace{\frac{u(r)}{r}}_{R(r)} Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Radiale Schrödingergleichung: $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right) u(r) = E u(r)$

ZENTRALÜBUNG

2.1 Harmonischer Oszillator und Zeitentwicklung

Ein Teilchen befindet sich im Potential des eindimensionalen harmonischen Oszillators

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Die Wellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ ist gegeben durch:

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

Dabei sind

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \qquad H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, ...$$

die normierten Wellenfunktionen der stationären Zustände des harmonischen Oszillators.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante A. *Hinweis: Sie müssen die Integrale nicht explizit berechnen, führen Sie Symmetriebetrachtungen durch und benutzen Sie die Tatsache, dass ψ_0 und ψ_1 bereits normiert sind.*
2. Bestimmen Sie $\Psi(x, t)$ und $|\Psi(x, t)|^2$.
3. Berechnen Sie den Erwartungswert von x als Funktion der Zeit. *Führen Sie Symmetriebetrachtungen durch und benutzen Sie $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-a^2x^2)dx = \sqrt{\pi}/(2a^3)$.*
4. Bestimmen Sie den Erwartungswert von p als Funktion der Zeit und überprüfen Sie die Gültigkeit des Ehrenfest'schen Theorems für diese Wellenfunktion.

2.2 Landau-Niveaus

Für ein freies Elektron der Ladung $q = -e$ (mit $e > 0$) im Magnetfeld ist der Hamiltonoperator gegeben durch

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \tag{1}$$

Dabei ist $\mathbf{A}$ das Vektorpotential. Bestimmen Sie für ein Vektorpotential der Form:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{x} \qquad \mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$$

das Energiespektrum von $\mathcal{H}$.

2.3 Coulomb-Potential

Betrachten Sie ein einzelnes Elektron um einen Z-fach geladenen Kern. Das Problem lässt sich nach Separation in Schwerpunkts- und Relativbewegung letzt sich letztere beschreiben als Bewegung eines Teilchens mit reduzierter Masse μ im Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Nach Transformation der Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten erhält man bekanntlich durch den Ansatz:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

die radiale Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) u(r) = Eu(r)$$

1. Begründen Sie, dass die Größe

   $$\kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

   für gebundene Zustände reell ist und leiten Sie unter Verwendung von

   $$x = \kappa r \qquad x_0 = \frac{\mu Z e^2}{2\pi\varepsilon_0 \hbar^2 \kappa} \qquad \text{und} \qquad f(\underbrace{\kappa r}_{x}) = u(r)$$

   folgende reduzierte Form der Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten her:

   $$f''(x) = \left[1 - \frac{x_0}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2}\right] f(x)$$

2. Wie verhält sich f für $x \to 0$ und $x \to \infty$, wenn $\psi(r,\theta,\varphi) = [f(\kappa r)/r]\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$ Wellenfunktion eines gebundenden Zustands darstellen soll. Bestimmen Sie dazu Funktionen f_0 und f_∞, die das Verhalten von f bei $x \to 0$ und $x \to \infty$ charakterisieren.

3. Durch den Ansatz $f(x) = f_0(x) f_\infty(x) v(x)$ erhält man folgende neue Differentialgleichung in $v(x)$:

   $$xv''(x) + 2(l+1-x)v'(x) + [x_0 - 2(l+1)]\, v(x) = 0$$

   Lösen Sie diese Differentialgleichung mit einen Potenzreihenansatz der Form:

   $$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j$$

   und begründen Sie, dass die Reihe abbrechen muss (d.h. es existiert ein j_{max} sodass $\forall k > j_{max} : \; a_k = 0$) um eine physikalisch sinnvolle Wellenfunktion zu erhalten. Bestimmen Sie aus der Abbruchsbedingung die Energieeigenwerte.

4. Bestimmen Sie für $j_{max} = 0$ und $l = 0$ die zugehörige normierte Wellenfunktion ψ (Hinweis $Y_{00} = const$). Verwenden Sie dabei $n := j_{max} + l + 1$ und $a_B := 1/(\kappa n)$.

AUFGABEN ZUM SELBSTSTÄNDIGEN ÜBEN

2.4 d-dimensionaler harmonischer Oszillator

Geben Sie die Energieeigenwerte und den jeweiligen Entartungsgrad eines isotropen d-dimensionalen harmonischen Oszillators an, dessen Hamiltonoperator gegeben ist durch

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{d} p_i^2 + \frac{m}{2}\omega^2 \sum_{i=1}^{d} x_i^2$$

2.5 Harmonischer Oszillator und Zeitentwicklung (Klausur 2006)

Der Zustand eines eindimensionalen harmonischen Oszillators mit dem Hamiltonoperator

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

wird zur Zeit $t = 0$ durch

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \qquad c_n \in \mathbb{C}$$

beschrieben, wobei $|n\rangle$ der Eigenzustand von $\mathcal{H}$ zur Quantenzahl n bezeichnet. Nehmen Sie an, dass $\langle x \rangle_{t=0} < \infty$ gilt. Zeigen Sie, dass die Zeitentwicklung des Ortserwartungswerts gegeben ist durch

$$\langle x \rangle_t = \langle \psi(t)|x|\psi(t)\rangle = A\cos\left[\omega(t - t_0)\right]$$

mit reellen Konstanten A und t_0.

2.6 Sphärische Potentialtöpfe

1. Bestimmen Sie die $l = 0$ Eigenzustände und deren Energieeigenwerte eines Teilchens mit Masse m im unendlich hohen sphärischen Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{für } r < a \\ \infty & \text{für } r > a \end{cases}$$

2. Betrachten Sie nun den endlich hohen sphärischen Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{für } r \leq a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$

Bestimmen Sie die Grundzustandswellenfunktion, indem Sie die radiale Schrödingergleichung mit $l = 0$ lösen. Zeigen Sie, dass es keine gebundenen Zustände gibt, wenn $V_0 a^2 < \pi^2\hbar^2/(8m)$ gilt.