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

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.

Lösung:
(Hinweis zur Notation: im folgenden wird $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$ durch $\int f(x)dx$ abgekürzt.)

1. Wir bestimmen die Normierungskonstante:

$$1 = \int |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int \left(9|\psi_0|^2 + 12\psi_0^*\psi_1 + 12\psi_1^*\psi_0 + 16|\psi_1|^2\right) dx =$$

$$= |A|^2(9 + 0 + 0 + 15) = 25|A|^2 \quad \Rightarrow A = 1/5$$

2. Die Zeitentwicklung eines stationären Zustands ist gegeben durch:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|\psi_n(0)\rangle$$

Daraus folgt

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{5}\left[3\psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + 4\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}\right] = \frac{1}{5}\left[3\psi_0(x)e^{-i\omega t/2} + 4\psi_1(x)e^{-3i\omega t/2}\right]$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{25}\left[9\psi_0^2 + 12\psi_0\psi_1 e^{+i\omega t/2}e^{-3i\omega t/2} + 12\psi_0\psi_1 e^{-i\omega t/2}e^{+3i\omega t/2} + 16\psi_1^2\right]$$

$$= \frac{1}{25}\left[9\psi_0^2 + 24\psi_0\psi_1\cos(\omega t) + 16\psi_1^2\right]$$

3. Wir berechnen den Erwartungswert von x

$$\langle x\rangle = \frac{1}{25}\left[9\int x\psi_0^2 dx + 16\int x\psi_1^2 dx + 24\cos(\omega t)\int x\psi_0\psi_1 dx\right]$$

aus Symmetriegründen verschwinden die ersten beiden Integrale. Man erhält für

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_0\psi_1 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2}}2xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} =$$

$$= \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi\hbar}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

Also ist

$$\langle x\rangle = \frac{24}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t)$$

4. Wir bestimmen den Erwartungswert des Impulses:

$$\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{24}{25}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sin(\omega t)$$

Nun überprüfen wir noch die Gültigkeit des Ehrenfest'schen Theorems:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\mathcal{H},p]\rangle + \left\langle\frac{\partial p}{\partial t}\right\rangle$$

Es ist $\langle\frac{\partial p}{\partial t}\rangle = 0$ und

$$[\mathcal{H},p] = \left[\frac{1}{2m}p^2 + V(x), p\right] = [V(x), -i\hbar\partial_x] = i\hbar\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

Also ist

$$\frac{i}{\hbar}\langle[\mathcal{H},p]\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle = -\langle m\omega^2 x\rangle = -m\omega^2\frac{24}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t) =$$

$$= -\frac{24}{25}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\omega\cos(\omega t)$$

und

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\left(-\frac{24}{25}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sin(\omega t)\right) = -\frac{24}{25}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\omega\cos(\omega t) = \frac{i}{\hbar}\langle[\mathcal{H},p]\rangle$$

2.2 Landau-Niveaus

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

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

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 $\mathcal{H}$.

Lösung:
Wir formen zuerst die Gleichung (1) um. Es gilt:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{x} \qquad \Rightarrow A_x = -\frac{1}{2}By, \quad A_y = \frac{1}{2}Bx, \quad A_z = 0 \tag{2}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(p_x - \frac{eB}{2}y\right)^2 + \left(p_y + \frac{eB}{2}x\right)^2 + p_z^2\right] =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2) + \frac{eB}{2m}(xp_y - yp_x)}_{\mathcal{H}_{xy}} + \underbrace{\frac{1}{2m}p_z^2}_{\mathcal{H}_z}$$

Man beachte, dass die Umformung $\left(p_x - \frac{eB}{2}y\right)^2 = p_x^2 - 2\frac{eB}{2}yp_x + \frac{e^2B^2}{4}x^2$ nur wegen $[p_x, y] = 0$ zulässig ist. Die Bewegung in z-Richtung ist von der in x- und y-Richtung unabhängig und die Wellenfunktion lässt sich separieren.

$$\Psi(x, y, z) = \Phi(x, y)f(z) \tag{3}$$

Füur die Bewegung in z-Richtung erhält man die freie eindimensionale Schrödingergleichung mit der Lösung

$$f(z) = \frac{1}{2\pi}e^{ik_z z} \text{ mit } E_z = E - E_{xy} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{4}$$

Wir betrachten nun die Energieeigenwerte von $\mathcal{H}_{xy}$. Mit der Abkürzung $\omega_L = eB/(2m)$ ist $\mathcal{H}_{xy}$ gegeben durch

$$\mathcal{H}_{xy} = \left[\frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega_L^2 x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega_L^2 y^2 + \omega_L(xp_y - yp_x)\right] \tag{5}$$

Wir führen nun folgende Operatoren ein

$$a_j := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_L}}(m\omega_L j + ip_j), \qquad a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_L}}(m\omega_L j - ip_j) \qquad j \in \{x, y\} \tag{6}$$

mit $[a_j, a_k] = [a_j^+, a_k^+] = 0$ und $[a_j, a_k^+] = \delta_{jk}$ Es gilt

$$a_x^+ a_x = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_L}}(m\omega_L x - ip_x)\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_L}}(m\omega_L x + ip_x) =$$

$$= \frac{1}{2m\hbar\omega_L}(m^2\omega_L^2 x^2 + im\omega_L \underbrace{(xp_x - p_x x)}_{i\hbar} + p_x^2) = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega_L^2 x^2 - \frac{1}{2}$$

Um den Term $\omega_L(xp_y - yp_x)$ durch die Operatoren a und a^+ auszudrücken, berechnen wir die Umkehrung der Gleichung (6):

$$j = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}}(a_j^+ + a_j), \qquad p_j = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_L}{2}}(a_j^+ - a_j)$$

Also ist

$$xp_y - yp_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}}(a_x^+ + a_x) i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_L}{2}}(a_y^+ - a_y) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}}(a_y^+ + a_y) i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_L}{2}}(a_x^+ - a_x) =$$

$$= -i(a_x^+ a_y - a_y^+ a_x)$$

Also lässt sich der Hamilton-Operator ausdrücken durch

$$\mathcal{H}_{xy} = \hbar\omega_L \left(a_x^+ a_x + a_y^+ a_y + 1 - i\left(a_x^+ a_y - a_y^+ a_x\right)\right) \tag{7}$$

Wir machen eine erneute Substitution:

$$b = 1/\sqrt{2}(a_x - ia_y) \qquad b^+ = 1/\sqrt{2}(a_x^+ + ia_y^+)$$

Es gilt:

$$b^+ b = 1/\sqrt{2}(a_x^+ + ia_y^+)1/\sqrt{2}(a_x - ia_y) = \frac{1}{2}\left[a_x^+ a_x + a_y^+ a_y - i(a_x^+ a_y - a_y^+ a_x)\right]$$

also erhalten wir

$$\mathcal{H}_{xy} = \hbar\omega_L \left(2b^+ b + 1\right) = \hbar\omega_c \left(b^+ b + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{mit } \omega_c = 2\omega_L \tag{8}$$

Dabei erfüllen die Operatoren

1. $[b, b^+] = 1$
2. $[\mathcal{H}, b] = -\hbar\omega_c b \qquad [\mathcal{H}, b^+] = \hbar\omega_c b^+$

Dies entspricht dem in der Vorlesung diskutierten Problem des harmonischen Oszillators. Die Energieeigenwerte lauten somit:

$$E_{xy,n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \qquad n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \tag{9}$$

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 $v(x)$:

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

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 $\forall k > j_{max}: \quad a_k = 0$) 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 $a_B := 1/(\kappa n)$.

Lösung:

1. Die Radiale Schrödingergleichung lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) u(r) = E u(r) \tag{10}$$

Wir suchen "physikalisch sinnvolle" Lösungen dieser Differentialgleichung. Wir dividieren zuerst die Gleichung (10) durch E:

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

Wir führen folgende Substitution ein:

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

Aufgrund der Tatsache, dass wir an gebundene Zustände interessiert sind und diese für $E < 0$ existieren, ist $\kappa \in \mathbb{R}$. Wir erhalten

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{d^2u}{dr^2} = \left[1 - \frac{\mu Z e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2}\right] u(r)$$

Wir führen nun folgende Substitution durch

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

und können die obige Gleichung in eine übersichtlichere Form überführen:

$$f''(x) = \left[1 - \frac{x_0}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2}\right] f(x) \tag{11}$$

2. Wir untersuchen das asymptotische Verhalten der Lösung:
   (a) Für $x \to \infty$erhalten wir

   $$\frac{d^2}{dx^2} f_\infty(x) = f_\infty(x) \qquad \Rightarrow f_\infty(x) = Ae^{-x} + Be^{x}$$

   Da die Wellenfunktion normierbar sein soll, muss $B = 0$ gelten. Also $f_\infty(x) \propto e^{-x}$.

   (b) Für $x \to 0$ erhalten wir

   $$\frac{d^2}{dx^2} f_0(x) = \frac{l(l+1)}{x^2} f_0(x)$$

   Diese ist eine EULER'sche Differentialgleichung, die mit dem Lösungsansatz $f_0(x) = Cx^\alpha$ gelöst werden kann. Wir erhalten als allgemeine Lösung

   $$f_0(x) = Cx^{l+1} + Dx^{-l}$$

   Da f im Ursprung nicht divergieren darf, muss $D = 0$ gelten. Also $f_0(x) \propto x^{l+1}$.

3. Wir machen also folgenden Ansatz:

   $$f(x) = f_0(x) f_\infty(x) v(x) = x^{l+1} e^{-x} v(x)$$

   Es gilt

$$f'(x) = (l+1)x^l e^{-x} v(x) - x^{l+1} e^{-x} v(x) + x^{l+1} e^{-x} v'(x) = x^l e^{-x}\left[(l+1-x)v(x) + xv'(x)\right]$$

$$\begin{aligned} f''(x) &= \left(lx^{l-1}e^{-x} - x^l e^{-x}\right)\left[(l+1-x)v(x) + xv'(x)\right] + \\ &+ x^l e^{-x}\left[(l+1-x)v'(x) + xv''(x) - v(x) + v'(x)\right] = \end{aligned}$$

$$= x^l e^{-x}\left\{\left[\left(\frac{l}{x} - 1\right)(l+1-x) - 1\right] v(x) + \left[\left(\frac{l}{x} - 1\right) x + (l+1-x) + 1\right] v'(x) + xv''(x)\right\} =$$

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

Einsetzen in die Gleichung (11) liefert

$$xv''(x) + 2(l+1-x)v'(x) + \left[x_0 - 2(l+1)\right] v(x) = 0 \tag{12}$$

Um die Lösung zu finden, machen wir einen Potenzreihenansatz

$$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \qquad \Rightarrow v'(x) = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} x^j \qquad \Rightarrow v''(x) = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} x^{j-1}$$

$$xv'(x) = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j x^j \qquad xv''(x) = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} x^j$$

eingesetzt in Gleichung (12) erhalten wir:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ j(j+1)a_{j+1} + 2(l+1)(j+1)a_{j+1} - 2ja_j + [x_0 - 2(l+1)]\, a_j \right\} x^j = 0$$

Um diese Gleichung zu erfüllen muss der Ausdruck in {} Null werden. Man erhält somit eine Beziehung zwischen a_{j+1} und a_j:

$$a_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - x_0}{(j+1)(j+2l+2)} a_j \tag{13}$$

Für große j erhält man:

$$a_{j+1} \sim \frac{2j}{(j+1)j} a_j = \frac{2}{j+1} a_j \qquad \Rightarrow a_j \sim \frac{2^j}{j!}$$

und somit eine Lösung der Form

$$v(x) \sim e^{2x} \qquad \Rightarrow f(x) \sim x^{l+1} e^x$$

welche im unendlichen divergiert. Um Normierbarkeit zu gewährleisten, muss die Potenzreihe abbrechen, d.h. Es existiert ein j_{max} sodass $\forall k > j_{max}: \; a_k = 0$. D.h. Aus der Rekursionsformel (13) folgt somit:

$$2(j_{max} + l + 1) - x_0 = 0 \qquad \Rightarrow x_0 = 2(j_{max} + l + 1)$$

Mit

$$x_0 = \frac{\mu Z e^2}{2\pi\varepsilon_0 \hbar^2 \kappa} = \frac{\mu Z e^2}{2\pi\varepsilon_0 \hbar \sqrt{-2mE}}$$

erhalten wir schließlich die Energieeigenwerte:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(2\pi\varepsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{(\underbrace{j_{max} + l + 1}_{n})^2} =: -\frac{\mu e^4}{2(2\pi\varepsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2} \qquad \text{und} \qquad \kappa = \frac{\mu Z e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n} =: \frac{1}{a_B n}$$

mit der Hauptquantenzahl n und dem Bohrradium a_B.

4. Für $j_{max} = 0$ und $l = 0$ erhalten wir $n = 1$ und $v(x) = a_0$

$$f(x) = a_0 x^{0+1} e^{-x} \qquad \Rightarrow u(r) = a_0 \kappa r e^{-\kappa r} \qquad R(r) = \frac{u(r)}{r} = a_0 \frac{1}{a_B} e^{-r/a_B}$$

Wegen $Y_{00} = const$ erhalten wir aus der Normierungsbedingung (mit $A = a_0 Y_{00}$):

$$1 = \int_{\mathbb{R}^3} \left| A \frac{1}{a_B} e^{-r/a_B} \right|^2 d^3r = |A|^2 \frac{4\pi}{a_B^2} \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a_B} dr = |A|^2 \frac{4\pi}{a_B^2} \left(\frac{a_B}{2}\right)^3 \int_0^{\infty} s^2 e^{-s} ds$$

$$= |A|^2 \frac{\pi a_B}{2} 2! \qquad \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B}}$$

Wir erhalten somit die Grundzustandswellenfunktion

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B}$$

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

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

Lösung

Der Hamiltonoperator $\mathcal{H}$ lässt sich zerlegen in eine Summe von d Hamiltonoperatoren des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Die Gesamtenergie ist somit gegeben durch

$$E_N = \sum_{i=1}^{d} E_i = \sum_{i=1}^{d} \hbar\omega\left(n_i + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n_1 + \ldots + n_d + \frac{d}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$$

dabei ist $N = n_1 + \ldots + n_d$. Wir wollen noch Entartungsgrad angeben, d.h. bei gegebenem N die Anzahl der d-Tupeln $(n_1, \ldots n_d)$ mit $N = n_1 + \ldots + n_d$. Dies ist äquivalent zu dem Problem, N Kugeln auf einer Geraden in d Abschnitte mit je einer bestimmten Anzahl von Kugeln zu teilen. z.B. $N = 7$ und $d = 3$:

$$\underset{(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 2)}{\bullet\bullet|\bullet\bullet\bullet|\bullet\bullet} \qquad\qquad \underset{(n_1, n_2, n_3) = (5, 0, 2)}{\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet||\bullet\bullet}$$

Es gibt also $N + (d - 1)$ Plätze insgesamt für die N Kugeln und $d - 1$ Trennstriche. Aus diesen $N + (d - 1)$ Plätzen müssen wir also $(d - 1)$ Plätze für die Striche auswählen, wobei die Vertauschung der Striche untereinander egal ist, da sich die Striche nicht voneinander unterscheiden. Die Anzahl der Möglichkeiten ist somit gegeben durch den Binomialkoeffizienten

$$\binom{N + d - 1}{d - 1} = \frac{(N + d - 1)!}{(d - 1)!N!}$$

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.

Lösung

Wir bestimmen zuerst die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t}|n\rangle$$

Nun berechnen wir $x|\psi(t)\rangle$. Dabei verwenden wir den Ortsoperator x durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperator aus und erinnern uns an die Eigenschaften von a und a^+:

$$x = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}}_{g\in\mathbb{R}}(a^+ + a) \qquad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\begin{aligned}
x|\psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t} g\left(\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle\right) \\
\langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle &= \sum_{n,n'=0}^{\infty} c_n c_{n'}^* e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t} e^{i\omega\left(n'+\frac{1}{2}\right)t} g\left(\sqrt{n+1}\langle n'|n+1\rangle + \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle\right) \\
&= e^{i\omega t}\sum_{n=0}^{\infty} g c_n c_{n+1}^* \sqrt{n+1} + g e^{-i\omega t}\sum_{n=1}^{\infty} g c_n c_{n-1}^* \sqrt{n} \\
&= e^{i\omega t}\underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} g c_{n-1} c_n^* \sqrt{n}}_{\alpha} + e^{-i\omega t}\underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} g c_n c_{n-1}^* \sqrt{n}}_{\alpha^*} = \alpha e^{i\omega t} + \alpha^* e^{-i\omega t}
\end{aligned}$$

wegen $\langle x\rangle_{t=0} < \infty$ ist $|\alpha| < \infty$. Wir stellen α in Polarform dar:

$$\alpha = |\alpha| e^{i\varphi} =: \frac{A}{2} e^{i\omega(-t_0)}$$

und erhalten schließlich

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

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

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

   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.

Lösung

1. Bekanntlich liefert der Ansatz

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

die radiale Schrödingergleichung,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2}\right) u(r) = Eu(r)$$

welche wir nun für $l = 0$ lösen wollen. Für $r > a$ ist $u(r) = 0$. Für $r < a$ gilt:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}u = -k^2 u \qquad \Rightarrow u(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr)$$

mit $k := \sqrt{2mE}/\hbar$. Da $R(r) = u(r)/r$ im Ursprung nicht divergieren darf, gilt $B = 0$. Mit der Randbedingung $u(a) = 0$ erhalten wir

$$\sin(ka) = 0 \qquad \Rightarrow ka = n\pi \qquad \Rightarrow E_{n0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Wegen $Y_{00} = const$ erhalten wir für die Eigenfunktionen

$$\psi_{n00} = A\frac{\sin(n\pi r/a)}{r}$$

Die Normierungsbedingung

$$1 = |A|^2 4\pi \int_0^a \frac{\sin^2(n\pi r/a)}{r^2} r^2 dr = 2\pi |A|^2$$

Also erhalten wir

$$\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin(n\pi r/a)}{r}$$

2. Für $r \leq a$ ist $u_<(r) = A\sin(kr)$ mit $k = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$. Für $r \geq a$ hingegen erhalten wir für einen gebundenen Zustand mit $E < 0$:

$$\frac{d^2u_>}{dr^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}Eu_> = q^2 u_> \quad q := \sqrt{-2mE}/\hbar \quad \Rightarrow u_>(r) = Ce^{qr} + De^{-qr}$$

Da Ce^{qr} für $r \to \infty$ divergiert und die Wellenfunktion nicht normierbar wäre, erhalten wir $u_> = De^{-qr}$.

$$\begin{aligned} \text{Stetigkeit von } u \text{ bei } r = a: \quad A\sin(ka) &= De^{-qa} \\ \text{Stetigkeit von } u' \text{ bei } r = a: \quad Ak\cos(ka) &= -Dqe^{-qa} \end{aligned}$$

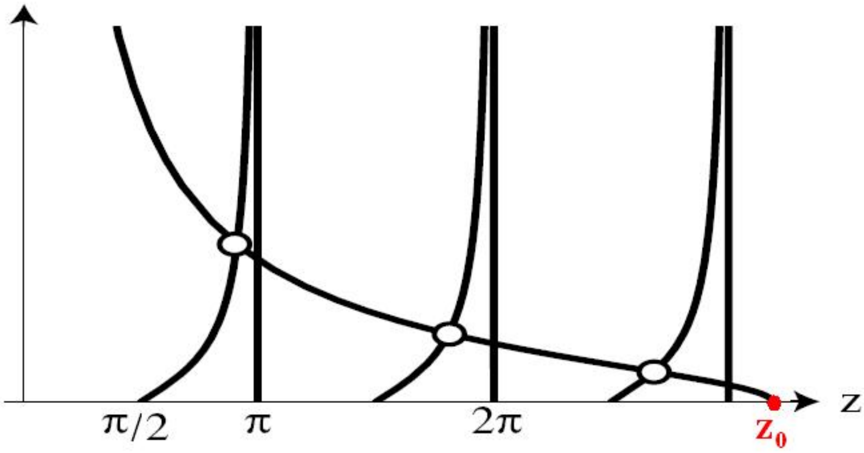
Dividiert man die zweite Gleichung durch die erste, so erhält man

$$-\cot(ka) = \frac{q}{k} = \frac{\sqrt{2mV_0/\hbar^2 - k^2}}{k}$$

Mit den Abkürzungen $z = ka$ und $z_0 = 2mV_0a^2/\hbar^2$erhalten wir

$$-\cot(z) = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$$

Wir lösen diese Gleichung graphisch:



Für $z_0 < \pi/2$ haben die beiden Kurven keinen Schnittpunkt, das heißt, es gibt keine gebundenen Zustände, wenn $z_0 < \pi/2 \quad \Leftrightarrow \quad V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2/(8m)$