Lukas Neumeier & Christoph Schnarr & Michael Schrapp

Ferienkurs *Quantenmechanik* Sommer 2010

Probeklausur - LÖSUNGSVORSCHLAG

1 Starrer Rotator

Ein starrer Rotator mit dem Trägheitsmoment I werde durch den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2 \cdot I}\vec{L}^2$$

beschrieben, wobei $\vec{L}$ der Drehimpulsoperator ist.

1. Welche Werte kann die Energie des Systems annehmen und wie ist der Entartungsgrad der Energieeigenwerte?
2. Der Rotator besitze nun ein magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}$. In einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ führt das zu einem Wechselwirkungsterm

   $$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos\theta$$

   $\hat{\mathcal{H}}_1$ soll als Störung behandelt werden. Berechnen Sie die erste nicht verschwindende Korrektur für die Grundzustandenergie des Rotators.

Hinweis: Es gilt für die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi) : Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$ und $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
Drücken Sie $\hat{\mathcal{H}}_1$ durch die Kugelflächenfunktionen aus und verwenden Sie die Orthogonalitätsrelation.

LÖSUNG:

1. Es gilt die Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_0 \, \psi &= E \, \psi \\
\frac{1}{2 \cdot I} \, \vec{L}^2 \, \psi &= E \, \psi \\
\frac{1}{2 \cdot I} \, \vec{L}^2 \, Y_{lm} &= E \, Y_{lm} \\
\frac{\hbar^2}{2 \cdot I} \, l(l+1) \, Y_{lm} &= E \, Y_{lm} \\
E &= \underline{\underline{\frac{\hbar^2 \, l(l+1)}{2I}}}
\end{aligned}$$

Die Entartung ist $(2l + 1)$-fach.

2. Im Grundzustand gilt $l = 0$ und der Grundzustand ist somit nicht entartet. Die Energiekorrektur lässt sich folglich mit Hilfe nicht-entarteter Störungsrechnung durchführen.

$$E_n^1 = \langle n^0|\hat{\mathcal{H}}_1|n^0\rangle \tag{1}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\mu B Y_{10} \tag{2}$$

Damit gilt für die erste Energiekorrektur:

$$E_n^{(1)} = \langle n^0|\hat{\mathcal{H}}_1|n^0\rangle \tag{3}$$

$$E_0^{(1)} = \langle Y_{00}| - \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\mu B Y_{10}|Y_{00}\rangle \tag{4}$$

$$= \underline{\underline{0}} \tag{5}$$

Da die erste Energiekorrektur verschwindet, ist die zweite Energiekorrektur zu berechnen:

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle m^0|\hat{\mathcal{H}}_1|n^0\rangle\right|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\
E_0^{(2)} &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \frac{\left|\langle Y_{lm}| - \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\mu B Y_{10}|Y_{00}\rangle\right|^2}{E_0 - E_l} \\
&= \frac{\left|\langle Y_{10}| - \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\mu B Y_{10}|Y_{00}\rangle\right|^2}{E_0 - E_1} \\
&= \frac{\frac{4\pi}{3}\mu^2 B^2 Y_{00}^2}{\frac{-\hbar^2}{I}} \\
&= \underline{\underline{-\frac{\mu^2 B^2 I}{3\hbar^2}}}
\end{aligned}$$

2 WKB-Näherung

Berechnen Sie mit der WKB-Näherung die Energie-Eigenwerte eines Teilchens, welches einen gebundenen Zustand in folgendem Potential einnimmt:

$$V = F \cdot |x|$$

LÖSUNG:

Für gebundene Zustände gilt:

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} dx\hbar k(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\pi$$

Wobei k^2 durch $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - F|x|)$ gegeben ist. Daraus ergibt sich:

$$\sqrt{2m}\int_{x_{min}}^{x_{max}} dx\sqrt{E - F|x|} = 2\sqrt{2m}\int_{0}^{x_{max}} dx\sqrt{E - F|x|} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\pi$$

mit $Fx_{max} = E$ folgt:

$$\frac{(F\hbar)^{2/3}}{m^{1/3}}\left[\frac{3\pi(n + \frac{1}{2})}{4\sqrt{2}}\right]^{2/3}$$

3 Spin-Kopplung

Ein System aus zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen wird durch einen Hamiltonoperator der Form

$$H = A(S_{1z} + S_{2z}) + B\vec{S_1} \cdot \vec{S_2}$$

beschrieben, wobei A und B konstant sind.

1. Bestimmen Sie alle Energieeigenwerte des Systems.

Hinweis: Sie müssen nicht die Eigenzustände nochmals bestimmen. Wählen Sie als Basis die gemeinsamen Eigenzustände von $\vec{S}^2 = (\vec{S_1} + \vec{S_2})^2$,$S_z$, $\vec{S_1}^2$ und $\vec{S_2}^2$

Erinnerung: Das Singulett und das Triplett!

Letzter Tipp: Versuchen Sie $\vec{S_1} \cdot \vec{S_2}$ durch geeignetere Operatoren auszudrücken.

LÖSUNG:

Aus der Vorlesung wissen wir, dass die Operatoren $\vec{S}^2 = (\vec{S_1} + \vec{S_2})^2$ und S_z folgende Eigenzustände besitzen:

$$\begin{aligned}
|1,1\rangle &= |+;+\rangle \\
|1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+;-\rangle + |-;+\rangle\Big) \\
|1,-1\rangle &= |-;-\rangle \\
|0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+;-\rangle - |-;+\rangle\Big)
\end{aligned}$$

Diese Eigenzustände sind auch Eigenzustände von $\vec{S}_1^2$ und $\vec{S}_2^2$.
Desweiteren gilt:

$$\vec{S_1} \cdot \vec{S_2} = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2)$$

Also erhalten wir:

$$H = A(S_{1z} + S_{2z}) + B\vec{S_1} \cdot \vec{S_2} = A(S_{1z} + S_{2z}) + \frac{1}{2}B(\vec{S}^2 - \vec{S_1}^2 - \vec{S_2}^2)$$

und damit:

$$H\,|S, M_s\rangle = \left\{A\hbar M + \frac{B}{2}\left[\hbar^2 S(S+1) - \hbar^2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \hbar^2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right]\right\}|S, M_s\rangle$$

$$\Rightarrow E_{S,M_s} = A\hbar M + \frac{B\hbar^2}{2}\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right]$$

4 Operatoren

1. Zeigen Sie beim eindimensionalen harmonischen Oszillator, dass folgende Kommutatorrelationen für die Auf- bzw. Absteigeoperatoren und den Teilchenzahloperator n gelten:

$$[n, \hat{a}] = -\hat{a} \tag{6}$$
$$\left[n, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{a}^\dagger \tag{7}$$

   Hinweis: Es darf $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ verwendet werden.

2. Berechnen Sie: $[\widehat{p}, x^n]$ für $n \geq 1$
3. Berechnen Sie: $\left[x^{-1}, \widehat{p}\right]$
4. Berechnen Sie: $[\widehat{p}^n, x]$ für $n \geq 1$

   Hinweis: Der Operator $\widehat{x}$ ist in Impulsdarstellung gegeben durch: $\widehat{x} = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}$.

Lösung:

1.
$$[n, \hat{a}]\,|n\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\,|n\rangle - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger)\,|n-1\rangle = -\sqrt{n}\,|n-1\rangle = -\hat{a}$$

   Dabei wurde die Kommutatorrelation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ benutzt.

   Um $[n, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ zu zeigen, transponieren wir Gleichung $[n, \hat{a}] = \hat{a}$:

$$[n, \hat{a}]^\dagger = [\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}]^\dagger = -\hat{a}^\dagger$$
$$-\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger = +\hat{a}^\dagger$$
$$\Rightarrow [n, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

2.
$$\begin{aligned}
[\widehat{p}, x^n]\,\psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{d}{dx}\left(x^n\,\psi(x)\right) - x^n\frac{d}{dx}\psi(x)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[n\,x^{n-1}\psi(x) + x^n\frac{d}{dx}\psi(x) - x^n\frac{d}{dx}\psi(x)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}nx^{n-1}\psi(x) \\
[\widehat{p}, x^n] &= \frac{\hbar}{i}nx^{n-1}
\end{aligned}$$

3.
$$\begin{aligned}
\left[x^{-1}, \widehat{p}\right]\psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\psi(x) - \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\psi(x)\right)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{1}{x^2}\psi(x) - \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\psi(x)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{1}{x^2}\psi(x) \\
\left[x^{-1}, \widehat{p}\right] &= \frac{\hbar}{i}\frac{1}{x^2}
\end{aligned}$$

4.

$$\begin{aligned}
[p^n, x]\,\psi(p) &= p^n\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}\right)\psi(p) - \left(-\frac{\hbar}{i}\right)\frac{d}{dp}\left[p^n\psi(p)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[-p^n\frac{d}{dp}\psi(p) + np^{n-1}\psi(p) + p^n\frac{d}{dp}\psi(p)\right] \\
&= \frac{\hbar}{i}np^{n-1}\psi(p) \\
[p^n, x] &= \frac{\hbar}{i}np^{n-1}
\end{aligned}$$

5 Potentialbarriere (ehemalige Klausuraufgabe)

Ein Teilchen der Masse m und kinetischer Energie $E < U$ trifft von links auf eine Potentialbarriere der Form

$$V(x) = \begin{cases} U > 0 & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{8}$$

1. Zeigen Sie, dass diese Situation durch eine Wellenfunktion der Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \rho e^{-ikx} + e^{ikx} & \text{für } x < 0 \\ Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & \text{für } 0 < x < a \\ \tau e^{ik(x-a)} & \text{für } x > a \end{cases}$$

   dargestellt werden kann und bestimmen Sie k und κ als Funktion von m, E und U.

2. Zeigen sie, dass

$$\tau = \frac{4ik\kappa}{(k+i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k-i\kappa)^2 e^{-\kappa a}}$$

   gilt.

3. Wie nennt man den sich hier andeutenden Effekt? Nennen Sie 2 Beispiele, wo dieser Effekt in der Natur oder Technik auftritt.

LÖSUNG:

1. Wir betrachten die einzelnen Abschnitte getrennt:
   $x < 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2e^{ikx} - k^2\rho e^{-ikx}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\psi(x) = E\psi(x)$$

   Daher gilt: $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$

   $0 < x < a$: Hier erhalten wir folgende Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U\right)\psi(x) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\kappa^2 + U\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

   und daraus folgt $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$.
   Für den Bereich $x > a$ erhalten wir dasselbe Ergebnis wie für $x < 0$.

2. Wir werten die 4 Anschlussbedingungen für die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung aus:

$$\underline{x=0} \quad : \quad \begin{cases} 1+\rho = A+B \\ ik - ik\rho = -\kappa A + \kappa B \end{cases}$$

$$\underline{x=a} \quad : \quad \begin{cases} Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} = \tau \\ -\kappa A e^{-\kappa a} + \kappa B e^{\kappa a} = ik\tau \end{cases}$$

Aus den ersten beiden Gleichungen kann man ρ eliminieren, aus den letzen zwei τ. Man erhält somit 2 Gleichungen für A und B:

$$\begin{aligned} (1-iq)e^{-\kappa a}A + (1+iq)e^{\kappa a}B &= 0 \\ (1+iq)A + (1-iq)B &= 2 \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Abkürzung $q = \kappa/k$ verwendet. Auflösen nach A und B liefert:

$$\begin{aligned} A &= \frac{-2(1+iq)}{(1-iq)^2 e^{-2\kappa a} - (1+iq)^2} \\ B &= \frac{2(1-iq)}{(1-iq)^2 - (1+iq)^2 e^{2\kappa a}} \end{aligned}$$

Damit erhält man für τ:

$$\tau = Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a} = \frac{-4iq}{(1-iq)^2 e^{-\kappa a} - (1+iq)^2 e^{\kappa a}}$$

Erweitert man mit k^2, dann erhält man das angegebene Resultat:

$$\tau = \frac{4ik\kappa}{(k+i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k-i\kappa)^2 e^{-\kappa a}}$$

3. Es handelt sich um den Tunneleffekt. Er tritt z.B. beim α Zerfall in der Kernphysik auf, bei Fusionsprozessen in der Sonne oder auch im Rastertunnelmikroskop.