Felix Rucker, Matthias Herzog Übungsklausur 9.9.2011

Ferienkurs Quantenmechanik

Übungsklausur

1 Kurze Fragen (*6 Punkte*)

a) Wie ist ein quantenmechanischer Drehimpuls definiert?
Lösung:
Über die Vertauschungsrelation seiner Komponenten

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{1}$$

b) Wie beschreibt man ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen?
Lösung:
z.B. durch Spinoren:

$$\chi(+) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\chi(-) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

$$\tag{4}$$

c) Welche Werte können beim Wasserstoff die Quantenzahlen l und m bei gegebenen n annehmen?
Lösung:
$l = 0, 1, ..., n-1$, $m = -l, l+1, ..., l-1, l$

d) Wie lauten die Energieeigenwerte des Wasserstoffs, und wie hoch ist ihre Entartung?
Lösung:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2} \tag{5}$$

Entartung:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2, \tag{6}$$

bzw das zweifache mit Spin.

e) Was besagt das Variationsprinzip?
Lösung:

$$E_0 \leq E_{var} = \frac{\langle\psi\,|\,H\,|\,\psi\rangle}{\langle\psi\,|\,\psi\rangle} \tag{7}$$

für beliebige Funktionen ψ.

f) Inwiefern bewirkt der normale Zeemaneffekt eine Aufhebung der Entartung?

Lösung:

Energiekorrekturen hängen von magnetischer Quantenzahl m ab:

$$E_{lm}^{(1)} = -\frac{eB}{2\mu c}\hbar m \tag{8}$$

2 Halbierter harmonischer Oszillator (*6 Punkte*)

Ein Teilchen bewege sich entlang der positiven x-Achse in einem Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$. Die negative x-Achse sei aufgrund eines unendlich hohen Potentials $V(x < 0) = \infty$ für das Teilchen unzugänglich.

a) Berechnen Sie die diskreten Energie-Eigenwerte des Problems mit Hilfe der WKB-Bedingung:

$$\int_0^{x_E} k(x)dx = (n - \frac{1}{4})\pi \tag{9}$$

für die eindimensionale Bewegung mit einer harten Wand. (x_E Ist der klassische Umkehrpunkt)
Hinweis:

$$\int_0^1 \sqrt{1-y^2}dy = \pi/4 \tag{10}$$

Lösung: Der Wellenzahlvektor $k(x)$ ist

$$k(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V(x))} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2})} \tag{11}$$

(*1 Punkt*)
Der klassische Umkehrpunkt wird bestimmt durch

$$E = V(x_E) = m\omega^2 x_E^2/2 \Leftrightarrow x_E = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \tag{12}$$

(*1 Punkt*)
womit man die Wellenzahl folgendermaßen ausdrücken kann:

$$k(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\frac{m\omega^2}{2}(x_E^2 - x^2)} = \frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{x_E^2 - x^2} \tag{13}$$

Die Bedingung lautet dann:

$$(n - \frac{1}{4})\pi = \frac{m\omega}{\hbar}\int_0^{x_E}\sqrt{x_E^2 - x^2}dx \tag{14}$$

$$= \frac{m\omega}{\hbar}(x_E)^2\int_0^1\sqrt{1-y^2}dy \tag{15}$$

$$= \frac{\pi E}{2\hbar\omega} \tag{16}$$

(*2 Punkte*)
Für die Energie-Eigenwerte E_n folgen dann die Energieniveaus des halben Oszillators

$$E_n^{halb} = \hbar\omega 2(n - \frac{1}{4}) \tag{17}$$

(*0,5 Punkte*)

b) Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den ungeraden Zuständen des harmonischen Oszillators und begründen Sie mögliche Koinzidenzen.

Lösung: Die ungeraden Energieniveaus des gewöhnlichen harm. Oszillators sind

$$E_n^{voll} = \hbar\omega(\tilde{n} + \frac{1}{2}) \qquad (\tilde{n} = 1,3,5,...) \tag{18}$$

$$= \hbar\omega 2(n - \frac{1}{4}) \qquad (n = 1,2,3,4,...) \tag{19}$$

Die Energienievaus des halbierten harmonischen Oszillators sind also gerade die ungeraden Energieniveaus des gewöhnlichen harmonischen Oszillators.(*0.5 Punkte*)
Das liegt daran, dass die ungeraden Wellenfunktionen den harmonischen Oszillators einen Knoten bei $x = 0$ haben. Damit sind sie für $x \geq 0$ Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit dem selben Potential und erfüllen die selben Randbedingungen wie die Wellenfunktionen des halbierten Oszillators, die bei $x = 0$ verschwinden müssen. (*1 Punkt*)

3 Phasenverschiebung durch Gravitation (*6 Punkte*)

Ein Teilchen der Energie $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ bewege sich im Gravitationspotential $V(z) = mgz$ von einem Punkt A bei $x = 0$, $z = 0$ zu einem Punkt D bei $x = l$ und $z = h$ auf jeweils geraden wegen entweder über den Punkt B mit $x = 0$, $z = h$ oder über den Punkt C bei $x = l$, $z = 0$.

a) Berechnen Sie den Unterschied $\varphi_{BD} - \varphi_{AC}$ in der Phasendifferenz φ_{BD} bzw. φ_{AC} der stationären Wellenfunktion $\psi(x) = |\psi|e^{i\varphi(x)}$ bei der Bewegung entlang der Wege BD und AC als Funktion von m, g, l, h und dem Wellenvektor $k(x) = \frac{2\pi}{\lambda}$ in x-Richtung des bei A einfallenden Teilchens unter der Annahme, dass die Wellenfunktion jeweils eine ebene Welle ist und $E >> mgh$ gilt.
Hinweis: Beachten Sie, dass der Wellenvektor bei fester Gesamtenergie E von z abhängt. Die Phasendifferenz φ_{BD} ist definiert durch $\varphi_{BD} = [\varphi(x = l) - \varphi(x = 0)]_{z=h}$ und analog für φ_{AC} bei $z = 0$.

Lösung: (*Aus Semestrale SS2009. 4 Punkte*)
Die stationäre Wellenfunktion einer ebenen Welle in x-Richtung ist

$$\psi(x) = Ae^{ik_x(z)x} \tag{20}$$

mit einem Wellenvektor in x-Richtung

$$k_x(z) = \sqrt{2m(E - mgz)}\hbar \qquad \textit{(1 Punkt)} \tag{21}$$

der von Höhe z abhängt:

$$k_x(z = 0) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k = 2\pi/\hbar, \tag{22}$$

$$k_x(z = h) = \frac{2m(E - mgh)}{\hbar} = k\sqrt{1 - \frac{mgh}{E}} \overset{E>>mgh}{\approx} k(1 - \frac{mgh}{2E}) \tag{23}$$

(*mit Näherung 1 Punkt*)
Die Phasendifferenz zwischen den Punkten C und A bzw. D und B sind:

$$\varphi_{AC} = k_x(z = 0) \cdot (l - 0) = kl \tag{24}$$

$$\varphi_{BD} = k_x(z = h) \cdot (l - 0) = kl\sqrt{1 - \frac{mgh}{E}} \approx kl(1 - \frac{mgh}{2E}) \tag{25}$$

(*mit Näherung 1 Punkt*)
und damit

$$\varphi_{BD} - \varphi_{AC} \approx kl(\frac{-mgh}{2E}) = \frac{-m^2 glh\lambda}{2\pi\hbar^2}. \tag{26}$$

(*1 Punkt*)

b) Bestimmen Sie die Periodizität Δh in der Höhendifferenz h, nach der sich das am Punkt D ergebende Interferenzmuster proportional zu $\cos(\varphi_{ABD} - \varphi_{ACD})$ wiederholt. Wie groß ist Δh für Neutronen mit Wellenlänge $\lambda = 1.4 Å$ und $l = 5cm$? (Verwenden Sie $(2\phi h)/m_n \approx 4 \cdot 10^{-3} cm^2/sec.$)
Hinweis: Da die Gesamtenergie E und das Potential auf den Abschnitten AB und CD identisch sind, fallen die Änderungen der Phase auf diesen Abschnitten in der gesamten Phasendifferenz $\varphi_{ABD} - \varphi_{ACD}$ der beiden Wege heraus.
Bemerkung: Die Rechnung ist die Grundlage für das berühmte sogenannte 'COW'-Experiment von Colella, Overhauser und Werner, Phys. Rev. Lett. **34.**, 1472 (1975)

Lösung: Da der Cosinus 2π-periodisch ist, wiederholt sich das Interferenzmuster, wenn $\Delta\varphi = \varphi_{ABD} - \varphi_{ACD} \in 2\pi\mathbb{Z}$ ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ist. (*0,5 Punkte*)
Aus der Phasendifferenz

$$\Delta\varphi = (\varphi_{AB} + \varphi_{BD}) - (\varphi_{AC} + \varphi_{CD}) \tag{27}$$

hebt sich gemäß der Angabe $\varphi_{AB} = \varphi_{CD}$ heraus, und man erhält die Bedingung für die Höhendifferenz Δh

$$\Delta\varphi = \varphi_{BD} - \varphi_{AC} = -\frac{m^2 gl(\Delta h)\lambda}{2\pi\hbar^2} \stackrel{!}{=} -2\pi \tag{28}$$

bzw.

$$\Delta h = \frac{1}{gl\lambda}(\frac{2\pi\hbar}{m_n})^2 \tag{29}$$

(*1 Punkt*)
Für Neutronen mit Masse $m = m_n$ ist dann

$$\Delta h = \frac{(4 \cdot 10^{-7} m^2 s^{-1})^2}{(9.81 ms^{-2})(0.05m)(1.4 \cdot 10^{-10} m)} \approx 2mm. \tag{30}$$

(*0.5 Punkte*)

4 Variationsprinzip (*10 Punkte*)

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Potential

$$V(x) = \lambda x^4. \tag{31}$$

a) Schreiben Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}$ in Ortsdarstellung.
Lösung:

$$\hat{H} = = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda x^4 \tag{32}$$

(*1 Punkt*)

b) Berechnen Sie mit der Variationsmethode und folgender Testfunktion

$$u(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \tag{33}$$

einen genäherten Wert für den Grundzustand des Systems.
Hinweis:

$$\int_0^\infty x^{2n} \mathrm{e}^{-bx^2} \mathrm{d}x = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n! b^n}\sqrt{\frac{\pi}{b}} \tag{34}$$

Lösung:
Variationsverfahren:

$$E(\alpha) = \frac{\langle u | \hat{H} | u \rangle}{\langle u | u \rangle} \tag{35}$$

(*1 Punkt*)
Nenner:

$$\begin{aligned}
\langle u | u \rangle &= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \mathrm{d}x && (36) \\
&= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2 \int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \mathrm{d}x && (37) \\
&= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2 \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{1/2} && (38) \\
&= 1 && (39)
\end{aligned}$$

(*1 Punkt*)

Die Funktion u ist also schon normiert, also

$$
\begin{aligned}
E(\alpha) &= \langle u | \hat{H} | u \rangle && (40)\\
&= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda x^4\right) \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x && (41)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 4\alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} x^2 \mathrm{d}x && (42)\\
&+ \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \mathrm{d}x && (43)\\
&+ \lambda \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} x^4 \mathrm{d}x && (44)\\
&\equiv I_1 + I_2 + I_3 && (45)\\
I_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 4\alpha^2 2 \int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} x^2 \mathrm{d}x && (46)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 4\alpha^2 2 \frac{2!}{2^3 1! 2\alpha)} \left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{1/2} && (47)\\
&= -\frac{\hbar\alpha}{2m} && (48)\\
I_2 &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2\alpha 2 \int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \mathrm{d}x && (49)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 4\alpha \frac{0!}{2^1 0!} \left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{1/2} && (50)\\
&= \frac{\hbar\alpha}{m} && (51)\\
I_3 &= \lambda \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2 \int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} x^4 \mathrm{d}x && (52)\\
&= \lambda \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2 \frac{4!}{2^5 2! (2\alpha)^2} \left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{1/2} && (53)\\
&= \frac{3\lambda}{16\alpha^2} && (54)\\
\Rightarrow E(\alpha) &= \frac{\hbar\alpha}{2m} + \frac{3\lambda}{16\alpha^2} && (55)
\end{aligned}
$$

(*3 Punkte*)
Jetzt wird $E(\alpha)$ minimiert:

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{\mathrm{d}E(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha_0} &= \frac{\hbar}{2m} - \frac{3\lambda}{8\alpha_0^3} && (56)\\
\Rightarrow \alpha_0 &= \left(\frac{3m\lambda}{4\hbar^2}\right)^{1/3} && (57)\\
&= \left(\frac{3}{8}\right)^{1/3} k^{1/3}, \qquad k = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} && (58)
\end{aligned}
$$

(*1.5 Punkte*)

damit erhalten wir

$$
\begin{aligned}
E\left(\alpha_0\right) &= \frac{\hbar\alpha_0}{2m}+\frac{3\lambda}{16\alpha_0^2} && (59)\\
&= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{3}{8}\right)^{1/3}k^{1/3}+\frac{3\lambda}{16\left(\frac{3}{8}\right)^{2/3}k^{2/3}} && (60)\\
&= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{3}{8}\right)^{1/3}k^{1/3}+\frac{3}{16}\left(\frac{3}{8}\right)^{-2/3}\frac{\hbar k}{2m}k^{-2/3} && (61)\\
&= \frac{\hbar}{2m}k^{1/3}\left(\left(\frac{3}{8}\right)^{1/3}+\frac{1}{2}\frac{3}{8}\left(\frac{3}{8}\right)^{-2/3}\right) && (62)\\
&= \frac{\hbar}{2m}k^{1/3}\frac{3}{4}3^{1/3} && (63)
\end{aligned}
$$

(*1.5 Punkte*)

5 Störungsrechnung (*8 Punkte*)

Wir betrachten folgenden Hamiltonoperator mit Störung in Matrixdarstellung:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0+\hat{W} && (64)\\
\hat{H}_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 3 & 0\\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} && (65)\\
\hat{W} &= \begin{pmatrix} 0 & c & 0\\ c & 0 & 0\\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}, && (66)
\end{aligned}
$$

für die Konstante c gilt $|c| << 1$

a) Berechnen Sie die exakten Eigenwerte $E_{1,2,3}$ von $\hat{H}$.

Lösung: (*2 Punkte*)
Charakteristisches Polynom:

$$
\begin{aligned}
\begin{vmatrix} 1-\lambda & c & 0\\ c & 3-\lambda & 0\\ 0 & 0 & c-2-\lambda \end{vmatrix} &= (1-\lambda)(3-\lambda)(c-2-\lambda)-c^2(c-2-\lambda) = 0 && (67)\\
\Rightarrow \lambda_1 &= c-2 && (68)\\
(1-\lambda)(3-\lambda) &= 0 && (69)\\
\lambda^2-4\lambda+3-c^2 &= 0 && (70)\\
\Rightarrow \lambda_{2/3} &= 2\pm\sqrt{1+c^2} && (71)
\end{aligned}
$$

b) Berechnen Sie dann die Eigenwerte von $\hat{H}$ in zweiter Ordnung Störungstheorie.

Lösung:
nullte Ordnung:

$$
E_1^{(0)} = 1, \qquad E_2^{(0)} = 3, \qquad E_3^{(0)} = -2 \qquad (72)
$$

(*1 Punkt*)
erste Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \langle n_0 \,|\, W \,|\, n_0 \rangle = W_{nn} \tag{73}$$

$$\Rightarrow E_1^{(1)} = W_{11} = 0 \tag{74}$$

$$E_2^{(1)} = W_{22} = 0 \tag{75}$$

$$E_3^{(1)} = W_{33} = c \tag{76}$$

(*1 Punkt*)
zweite Ordnung:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left\langle n^{(0)} \middle| W \middle| m^{(0)} \right\rangle \left\langle m^{(0)} \middle| W \middle| n^{(0)} \right\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} \tag{77}$$

$$\Rightarrow E_1^{(2)} = \frac{W_{12} W_{21}}{\left(E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right)} + \frac{W_{13} W_{31}}{\left(E_1^{(0)} - E_3^{(0)}\right)} \tag{78}$$

$$= \frac{c^2}{-2} + \frac{0}{3} = \frac{c^2}{-2} \tag{79}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{W_{21} W_{12}}{\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right)} + \frac{W_{23} W_{32}}{\left(E_2^{(0)} - E_3^{(0)}\right)} \tag{80}$$

$$= \frac{c^2}{2} \tag{81}$$

$$E_3^{(2)} = \frac{W_{31} W_{13}}{\left(E_3^{(0)} - E_1^{(0)}\right)} + \frac{W_{32} W_{23}}{\left(E_3^{(0)} - E_2^{(0)}\right)} \tag{82}$$

$$= 0 \tag{83}$$

(*1 Punkt*)
Für die Energieeigenwerte haben wir damit in zweiter Ordnung Störungstheorie

$$E_1^{ST} = 1 - \frac{c^2}{2} + \cdots \tag{84}$$

$$E_2^{ST} = 3 + \frac{c^2}{2} + \cdots \tag{85}$$

$$E_3^{ST} = -2 + c + \cdots \tag{86}$$

(*1 Punkt*)

c) Vergleichen Sie das störungstheoretische Ergebnis mit einer Binomialentwicklung (Taylorentwicklung um $c = 0$) der exakten Eigenwerte.

Lösung:

$$E_1^{Bi} = -2 + c \qquad \text{(exakt)} \tag{87}$$

$$E_{2,3}^{Bi} = 2 \pm \sqrt{1 + c^2} = 2 \pm \left(1 + \frac{1}{2} c^2\right) + \cdots \tag{88}$$

Die Binomialentwicklung liefert also die gleichen Ergebnisse wie die Störungstheorie (Die Indices kann man natürlich umdeklarieren). (*2 Punkte*)

Gesamtpunktzahl 36