Ferienkurs Quantenmechanik - Probeklausur
Sommersemester 2015

Fabian Jerzembeck und Sebastian Steinbeißer
Fakultät für Physik
Technische Universität München

19. September 2015

Probeklausur

Aufgabe 1 FRAGEN (10 BE):

a) *Wie lautet die zeitabhängige Schrödingergleichung mit Potential in drei Dimensionen?*

b) *Wie berechnet sich der Erwartungswert eines Operators $\hat{O}$ in Orts- und Impulsdarstellung?*

c) *Wie hängt die Energie im H-Atom von der Hauptquantenzahl ab?*

d) *Nennen Sie die Unschärferelation für die zwei hermiteschen Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$.*

e) *Wie wirken die Operatoren $\vec{L}^2$ und L_z auf den Zustand $|l, m\rangle$?*

f) *Wann ist ein hermitescher Operator $\hat{A}$ eine Erhaltungsgröße?*

g) *Nennen Sie die Quantenzahlen eines vollständigen Satzes von Eigenfunktionen für das H-Atom und deren Wertebereiche.*

h) *Normieren Sie die Wellenfunktion $\psi(x) = d \cdot \theta(a - |x|)$, $a > 0$.*

i) *Beschreiben Sie den Weg um Operatoren zu konstruieren, die ein Teilchen mit Spin $\frac{5}{2}$ beschreiben (sie müssen **nicht** explizit angegeben werden!).*

j) *Es seien Λ_i, $i = 1, 2, 3$, drei $n \times n$-Matrizen, welche den Spin eines Teilchens beschreiben. Handelt es sich jeweils um Bosonen oder um Fermionen (mit Begründung!), wenn*

   I) *n gerade ist?*

   II) *n ungerade ist?*

Lösung:

a) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x},t)\Big)\psi(\vec{x},t)$

b) $\langle\hat{O}\rangle = \int d^3\vec{x}\psi^*(\vec{x},t)\hat{O}\psi(\vec{x},t) = \int d^3\vec{p}\phi^*(\vec{p},t)\hat{O}\phi(\vec{p},t)$

c) $E_n \propto \frac{1}{n^2}$

d) $(\Delta\hat{A})\cdot(\Delta\hat{B}) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|$

e) $\vec{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle \qquad L_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$

f) Wenn gilt: $[\hat{H},\hat{A}] = 0$

g)
- Hauptquantenzahl $n \in \mathbb{N}$
- Drehimpulsquantenzahl $l \in \{0,1,\ldots,n-1\}$
- Magnetquantenzahl $m \in \{-l,\ldots,l\}$

h) $1 = \int dx|\psi(x)|^2 = d^2\int\limits_{-a}^{a} dx = d^2\cdot 2a \quad \Rightarrow d = (2a)^{-\frac{1}{2}}$

i) Es gilt $s = \frac{5}{2}$, somit ist $m_s = \pm\frac{5}{2},\pm\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}$. Wir benötigen also drei 6×6-Matrizen Λ_i, $i = 1,2,3$, welche die Spin-/Drehimpulsalgebra $[\Lambda_i,\Lambda_j] = \epsilon_{ijk}i\hbar\Lambda_k$ erfüllen.

j) I) $n = 2m_s + 1$ muss gerade sein, also muss $|m_s|$ ein Vielfaches von $\frac{1}{2}$ sein. Es handelt sich somit um Fermionen. So liefert z.B.: $n = 2 \Rightarrow$ Spin $\frac{1}{2}$ (Pauli Matrizen!) oder $n = 6 \Rightarrow$ Spin $\frac{5}{2}$ (Aufgabe i))

II) $n = 2m_s + 1$ muss ungerade sein, also muss $|m_s|$ eine natürliche Zahl einschließlich der Null sein. Es handelt sich somit um Bosonen. So liefert z.B.: $n = 1 \Rightarrow$ Spin 0 (Vorlesung!) oder $n = 3 \Rightarrow$ Spin 1 (Vorlesung!).

Aufgabe 2 AUF-/ABSTEIGEOPERATOREN (7 BE):

Geben Sie den resultierenden Zustand (sofern er existiert) zu folgenden Operationen an:

a) $L^2L_+|2,1\rangle$

b) $L_-|1,2\rangle$

c) $L_+L^2L_+|7,5\rangle$

d) $S_-S^2|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$

e) $S^2S_+|\frac{1}{2},-\frac{1}{2};\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$

f) $S^2|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2};1,0\rangle$

g) $\langle 3|\,a^\dagger a^\dagger a a^\dagger$

Lösung:
Es gilt:

$$\begin{aligned}
L^2 |l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l,m\rangle \\
S^2 |s,m\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s,m\rangle \\
L_\pm |l,m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\, |l,m\pm 1\rangle \\
S_\pm |s,m\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}\, |s,m\pm 1\rangle \\
a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle \\
a |n\rangle &= \sqrt{n}\, |n-1\rangle
\end{aligned}$$

und wir finden:

a) $L^2 L_+ |2,1\rangle = \hbar 2 L^2 |2,2\rangle = \hbar^3 12 |2,2\rangle$

b) $L_- |1,2\rangle$ dieser Zustand existiert nicht, da $m > l$ verboten ist!

c) $L_+ L^2 L_+ |7,5\rangle = \hbar\sqrt{26} L_+ L^2 |7,6\rangle = \hbar^3 56\sqrt{26} L_+ |7,6\rangle = \hbar^4 112\sqrt{91} |7,7\rangle$

d) $S_- S^2 |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} S_- |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \hbar^3 \frac{3}{4} |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

e) $S^2 S_+ |\frac{1}{2},-\frac{1}{2};\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle = \hbar(1+\sqrt{3}) S^2 |\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle = \hbar^3(1+\sqrt{3})(\frac{3}{4}+\frac{15}{2}) |\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$

f) $S^2 |\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2};1,0\rangle = \hbar^2(\frac{3}{4}+\frac{15}{4}+2) |\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2};1,0\rangle$

g) $\langle 3| a^\dagger a^\dagger a a^\dagger = \langle 2| a^\dagger a a^\dagger \sqrt{3} = \langle 1| a a^\dagger \sqrt{2}\sqrt{3} = \langle 2| a^\dagger \sqrt{2}\sqrt{2}\sqrt{3} = \langle 1| \underbrace{\sqrt{2}\sqrt{2}\sqrt{2}\sqrt{3}}_{2\sqrt{6}}$

Aufgabe 3 SPIN UND DREHIMPULS (6 BE):
Konstruieren Sie für $j = \frac{3}{2}$ die Matrixdarstellung der Operatoren J_+, J_-, J_x, J_y, J_z in der Basis der Eigenzustände $|j,m\rangle$ der Operatoren J^2, J_z.
Hinweis: $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ $\qquad J_\pm |j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\, |j,m\pm 1\rangle$

Lösung:
Da gilt $m = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$, benötigen wir 4×4-Matrizen. Trivialer weise haben wir:

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & & & \\ & \frac{1}{2} & & \\ & & -\frac{1}{2} & \\ & & & -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \ldots, |\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

Wir finden weiterhin:

m	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
$\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}$	0	$\sqrt{3}$	2	$\sqrt{3}$
$\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}$	$\sqrt{3}$	2	$\sqrt{3}$	0

woraus folgt:

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & & \\ & 0 & 2 & \\ & & 0 & \sqrt{3} \\ & & & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & & & \\ \sqrt{3} & 0 & & \\ & 2 & 0 & \\ & & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

Umformen des Hinweises liefert $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ und $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$ und wir erhalten das Endresultat:

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & & \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & \\ & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ & & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \qquad J_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & & \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & \\ & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ & & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 4 STÖRUNGSRECHNUNG (7 BE):

Betrachten Sie das Morse-Potential:

$$V(x) = V_0 \Big[1 - \mathrm{e}^{-a(x-x_e)} \Big]^2 \qquad a, x_e > 0$$

(a) *Finden Sie das Minimum.*

(b) *Entwickeln Sie das Morse-Potential in harmonischer Ordnung um das Minimum und schreiben Sie die zugehörige zeitunabhängige Schrödingergleichung auf.*

(c) *Wie lauten die zugehörigen Energieeigenwerte?*

(d) *Betrachten Sie nun eine kubische Störung $-\lambda x^3$, $\lambda > 0$, die auf das harmonische Potential wirkt.*
Berechnen Sie die ersten beiden Korrekturen zur Eigenenergie des harmonischen Oszillators. Verwenden Sie dazu:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | H_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle \qquad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\Big| \langle \Psi_m^{(0)} | H_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle \Big|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a)$$

Betrachten Sie dabei explizit die Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$.

(e) *Wie lauten die Energieeigenwerte des gestörten harmonischen Oszillators?*

Lösung:

(a) Leiten wir $V(x)$ nach x ab, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} V'(x) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} V_0 \Big[1 - \mathrm{e}^{-a(x-x_e)}\Big]^2 = -2aV_0 \Big[1 - \mathrm{e}^{-a(x-x_e)}\Big] \mathrm{e}^{-a(x-x_e)} \\ &= -2aV_0 \underbrace{\left[\mathrm{e}^{-a(x-x_e)} - \mathrm{e}^{-2a(x-x_e)}\right]}_{=0} \end{aligned}$$

Dies ist erfüllt für $x = x_e$. Somit liegt das Minimum bei x_e.

(b) Um das Potential in harmonischer Näherung zu bekommen, entwickeln wir das Potential in einer Taylor-Reihe um das Minimum x_e. Dabei zeigt sich, dass sowohl $V(x_e)$, wie auch $V'(x_e)$ verschwindet. Somit betrachten wir nur den quadratischen Term:

$$V''(x) = 2a^2 V_0 \Big[2\mathrm{e}^{-a(x-x_e)} - \mathrm{e}^{-a(x-x_e)}\Big] = 2a^2 V_0$$

Dabei wurde im letzten Schritt $x = x_e$ benutzt. Die Taylor-Reihe lautet somit:

$$V(x) \approx a^2 V_0 (x - x_e)^2$$

und die zeitabhängige Schrödingergleichung hat die Form:

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + a^2 V_0 (x - x_e)^2\Big]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

(c) Die Energie-Eigenwerte sind die des harmonischen Oszillators:

$$E_n = \hbar\omega\Big(n + \frac{1}{2}\Big)$$

(d) Die Energie-Korrektur erster Ordnung verschwindet, da wir es mit einem ungeradem Störterm zu tun haben.
Machen wir für die Störungstheorie zweiter Ordnung den Ansatz:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$$

erhalten wir für $H_1 = -\lambda x^3$:

$$\begin{aligned} -\lambda x^3 &= -\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3 (a^\dagger + a)^3 \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3 \Big((a^\dagger)^3 + (a^\dagger)^2 a + a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a^2 + a(a^\dagger)^2 + a a^\dagger a + a^2 a^\dagger + a^3\Big) \end{aligned}$$

Da wir nur Übergänge von den Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ betrachten, benötigen wir nicht alle Terme. Für den Zustand $|0\rangle$ benötigen wir:

$$(a^\dagger)^3 + a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2$$

und für den Zustand $|1\rangle$:

$$(a^\dagger)^3 + a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 a + a a^\dagger a + a^2 a^\dagger$$

Betrachten wir zunächst die Übergänge vom Zustand $|0\rangle$.

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle \Psi_m^{(0)}|H_1|\Psi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \lambda^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6 \frac{\left|\langle m|(a^\dagger)^3 + a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2|0\rangle\right|^2}{\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{m}{2}\hbar\omega} = \\
&= \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3}\left[\frac{\left|\langle 3|(a^\dagger)^3|0\rangle\right|^2}{\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{7}{2}\hbar\omega} + \frac{\left|\langle 1|a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2|0\rangle\right|^2}{\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{3}{2}\hbar\omega}\right] = \\
&= \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3}\left[\frac{\left|\langle 3|\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}|3\rangle\right|^2}{-3\hbar\omega} + \right. \\
&\left. + \frac{\left|\langle 1|\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+2}|1\rangle\right|^2}{-\hbar\omega}\right] = \\
&= \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3}\left[\frac{\left|\langle 3|\sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{3}|3\rangle\right|^2}{-3\hbar\omega} + \frac{\left|\langle 1|\sqrt{1}\sqrt{1}\sqrt{1} + \sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{2}|1\rangle\right|^2}{-\hbar\omega}\right] = \\
&= \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3}\left[-\frac{3}{\hbar\omega} - \frac{5}{\hbar\omega}\right] = -\frac{\lambda^2\hbar^2}{m^3\omega^4}
\end{aligned}$$

Dabei wurde $n = 0$ benuzt.
Für den Zustand $|1\rangle$ ergeben sich noch ein paar Terme mehr:

$$
\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle \Psi_m^{(0)} | H_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \\
&= \lambda^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6 \frac{\left| \langle m | (a^\dagger)^3 + a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 a + a a^\dagger a + a^2 a^\dagger | 1 \rangle \right|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{m}{2}\hbar\omega} = \\
&= \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3} \left[\frac{\left| \langle 4 | (a^\dagger)^3 | 1 \rangle \right|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{9}{2}\hbar\omega} + \frac{\left| \langle 2 | a^\dagger a a^\dagger + a(a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 a | 1 \rangle \right|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{5}{2}\hbar\omega} + \right. \\
&\left. + \frac{\left| \langle 0 | a a^\dagger a + a^2 a^\dagger | 1 \rangle \right|^2}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega} \right] = \lambda^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3} \left[\frac{\left| \langle 4 | \sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{4} | 4 \rangle \right|^2}{-3\hbar\omega} + \right. \\
&\left. + \frac{\left| \langle 2 | \sqrt{2}\sqrt{2}\sqrt{2} + \sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{3} + \sqrt{1}\sqrt{1}\sqrt{2} | 2 \rangle \right|^2}{-\hbar\omega} + \frac{\left| \langle 0 | \sqrt{1}\sqrt{1}\sqrt{1} + \sqrt{2}\sqrt{2}\sqrt{1} | 0 \rangle \right|^2}{\hbar\omega} \right] = \\
&= -31 \frac{\lambda^2 \hbar^2}{8m^3\omega^4}
\end{aligned}
$$

Und hier ist $n = 1$.

(e) Die Energie-Eigenwerte des gestörten harmonischen Oszillators ergeben sich somit zu:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega - \lambda^2 \frac{\hbar^2}{m^3\omega^4}$$

und

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega - 31 \frac{\lambda^2 \hbar^2}{8m^3\omega^4}$$