Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 5

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 17. - 21. Mai 2021
Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!
Nutzen Sie dazu den Link `https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291`

1. Verständnisfragen

a) Warum erscheint in der Neumann-Gleichung der Kommutator $[\hat{H}, \rho]$, während in der Heisenberg-Gleichung der Kommutator $[A, \hat{H}]$ erscheint?

b) Welche allgemeinen Eigenschaften können Sie eindimensionalen Wellenfunktionen zuschreiben, die die stationäre Schrödingergleichung lösen? Erläutern Sie ihre Bedeutung.

c) Welche Form haben die Orts- und Impulsoperatoren im Orts- bzw. Impulsraum? Erklären Sie diese Formen und prüfen Sie die Hermitezität.

2. Endlich tiefer Potentialtopf

Gegeben sei ein eindimensionales (endlich tiefes) Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } |x| > a \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$, $a > 0$. Die Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ der gebundenen Energiezustände eines Teilchens in einem solchen inversionsinvarianten eindimensionalen Potential sind stets gerade oder ungerade Funktionen der Ortsvariablen x.

(a) Zeigen Sie, dass folgende Bedingungen

$$\begin{aligned} \kappa a &= Ka \tan(Ka) \quad \text{für gerade Eigenfunktionen,} \\ \kappa a &= -Ka \cot(Ka) \quad \text{für ungerade Eigenfunktionen,} \\ \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 &= (Ka)^2 + (\kappa a)^2 \end{aligned}$$

mit $K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)}$ und $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$ für die Energieeigenwerte $-V_0 < E$ der gebundenen Zustände eines Teilchens der Masse m in diesem Potential gelten.

(b) Besitzt dieses Potential für beliebiges V_0 und a einen gebundenen Zustand? Begründen Sie Ihre Antwort.

3. Projektionsoperatoren

Sei V ein n-dimensionaler Vektorraum mit dem Skalarprodukt

$$\langle \cdot , \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}.$$

Ein linearer Operator $\hat{P}$ heißt Projektionsoperator, falls er die Eigenschaft

$$\hat{P}^2 \equiv \hat{P} \circ \hat{P} = \hat{P}$$

erfüllt. Hierbei steht „$\circ$“ für Hintereinanderausführung. Sei weiterhin $\{|\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle\}$ das vollständige Orthonormalsystem von Eigenvektoren des linearen Operators $\hat{A}$ mit den nicht-entarteten Eigenwerten a_i zu den Eigenvektoren $|\psi_i\rangle$.

a) Zeigen Sie, dass der durch $\hat{P}_i \equiv |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ definierte Operator ein Projektionsoperator ist, und dass $\hat{P}_i^\dagger = \hat{P}_i$.

b) Zeigen Sie, dass $(\hat{P}_i) \subseteq \{0, 1\}$, dass also 0 und 1 die möglichen Eigenwerte von $\hat{P}_i$ sind.

c) Beweisen Sie die Relation

$$\hat{I} = \sum_{i=1}^{n} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

und die sog. *Spektraldarstellung* des Operators,

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} a_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \,.$$

d) Was ist die einfache geometrische Veranschaulichung einer durch $\hat{P}_i$ induzierten Projektion von Vektoren im $\mathbb{R}^3$?

4. Eindimensionale Potentialbarriere

Wir betrachten eine eindimensionale Potentialbarriere der Höhe $V_0 \in \mathbb{R}_+$ und der Tiefe $a \in \mathbb{R}_+$. Der Hamilton-Operator für ein Teilchen der Masse m ist im Ortsraum

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

mit dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } 0 \le x \le a \\ 0 & \text{für } a < x \end{cases} .$$

Wir wollen verallgemeinerte Eigenzustände $\psi(x)$ von $\hat{H}$ zur Energie E finden. Dabei soll zunächst $0 < E < V_0$ gelten. Wir machen den allgemeinen Ansatz (vgl. mit der Vorlesung)

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,0 & \text{für } x < 0 \\ C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x} + D\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x} & \text{für } 0 \le x \le a \\ E\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + F\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & \text{für } a < x \end{cases}$$

mit $A, B, C, D, E, F \in \mathbb{C}$.

a) Bestimmen Sie k und k' so, dass dieses $\psi(x)$ ein verallgemeinerter Eigenzustand zur Energie E ist.

Wir wollen eine von links einlaufende ebene Welle untersuchen und wählen dazu wie in der Vorlesung $A = 1$ und $F = 0$.

b) Finden Sie die notwendigen (Anschluss-)Bedingungen für die anderen Koeffizienten $B, \ldots, E$ in Form eines linearen Gleichungssystems.

Die Koeffizienten C und D können eliminiert werden und man findet

$$B = \frac{(k^2 - k'^2)(1 - \mathrm{e}^{2\mathrm{i}k'a})}{(k + k')^2 - (k - k')^2\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k'a}}$$

$$E = \frac{4kk'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)a}}{(k + k')^2 - (k - k')^2\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k'a}}$$

c) Bestimmen Sie hieraus den Reflexionskoeffizienten $R = |B|^2$ und den Transmissionskoeffizienten $T = |E|^2$, d.h. die Wahrscheinlichkeiten dafür, dass ein Teilchen am Potential reflektiert wird bzw. durch das Potential tunnelt. Zeigen Sie $R + T = 1$.

d) Diese Resultate gelten auch, wenn $E \geq V_0$. Wie sieht k' in den Fällen $E \leq V_0$ und $E \geq V_0$ aus? Wie wirkt sich das auf die funktionale Abhängigkeit der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten aus?

e) Skizzieren Sie den Transmissionskoeffizienten als Funktion von E/V_0 im Bereich $0 \leq E/V_0 \geq 4$, zum Beispiel für $mV_0a^2/\hbar^2 = 8$. Wie groß ist der Transmissionskoeffizient im Fall $E \to V_0$? Bei welchen Energieeigenwerten ist die Barriere vollständig durchlässig?*

---

* *Hinweis:* Zu diesem Aufgabenteil wird es ein Jupyter-Notebook geben. Den Link dazu finden Sie auf der Website der Vorlesung.