Diplomvorprüfung Theoretische Physik (Quantenmechanik)

WS 2007/2008, Technische Universität München

Dienstag, 26. Februar 2008, 10:00–11:30, HS 1

---

Die Klausur besteht aus **4 Aufgaben**. Die Aufgabenstellung hat **3 Seiten**.
Es gibt insgesamt **50 Punkte**.
Bitte geben Sie auf **allen zusätzlichen** Blättern **Ihren Namen** an!

## Viel Erfolg!

---

### Aufgabe 1 (13 Punkte)

Ein Teilchen der Masse $m$ mit der Energie $E$ wird, von $x \to -\infty$ kommend, gestreut an einem eindimensionalen Potentialwall

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \quad (1) \\ V_2 & |x| \leq a \quad (2) \\ V_3 & x > a \quad (3) \end{cases} \qquad (V_2 > V_3 > 0).$$

a) (7 Punkte) Stellen Sie die Schrödingergleichung auf, geben Sie für den Fall $E > V_2 > V_3$ den Lösungsansatz an und stellen Sie die Gleichungen für die Randbedingungen auf. Nehmen Sie Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Wellenfunktion bei $x = \pm a$ an und berücksichtigen Sie die physikalischen Randbedingungen. Lösen Sie die Schrödingergleichung für den speziellen Fall $E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(5\frac{\pi}{a}\right)^2$, $V_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{91}{4}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ und $V_3 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(4\frac{\pi}{a}\right)^2$.

b) (2 Punkte) Bestimmen Sie für diesen Fall die Stromdichten für die einfallende Welle und für die transmittierte Welle jenseits des Potentialwalls.

c) (2 Punkte) Wie ist der Transmissionskoeffizient $T$ definiert? Berechnen Sie $T$!

d) (2 Punkte) Geben Sie die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte an. Wie vereinfacht diese sich im stationären Fall? Zeigen Sie entweder allgemein oder explizit mit ihrer Lösung aus a), dass diese Gleichung überall erfüllt ist.

### Aufgabe 2 (12 Punkte)

Ein System, das nur in zwei Zuständen existiert, werde durch einen Hamiltonoperator $\hat{H}$ beschrieben. Die beiden Zustände $|\phi_1\rangle$ und $|\phi_2\rangle$ seien ein vollständiges, aber sonst beliebig wählbares Orthonormalsystem im Raum dieser Zustände. Die Matrixelemente von $\hat{H}$ bezüglich dieser Basis sind gegeben durch $H_{ij} = \langle\phi_i|\hat{H}|\phi_j\rangle$. Wir definieren $E_0 = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22})$ und $\Delta = \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})$. Es gelte $\Delta \geq 0$. Lösen Sie im folgenden die Schrödingergleichung $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit dem Ansatz $|\psi_I\rangle = A_I|\phi_1\rangle + B_I|\phi_2\rangle$ und $|\psi_{II}\rangle = A_{II}|\phi_1\rangle + B_{II}|\phi_2\rangle$ für die Eigenzustände von $\hat{H}$:

a) (3 Punkte) Berechnen Sie zuerst die Energieeigenwerte $E_I$ und $E_{II}$ des Systems.

b) (3 Punkte) Wie verhalten sich die Energieeigenwerte $E_{I,II}$ in den Grenzfällen $\Delta \gg |H_{12}|$ und $\Delta \ll |H_{12}|$? Entwickeln Sie für beide Fälle die Energieeigenwerte bis zur ersten nichtverschwindenden Ordnung in der jeweils kleineren Grösse.
**Erinnerung**: $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + - \ldots$

c) (3 Punkte) Konstruieren sie die Energieeigenzustände $|\psi_I\rangle$ und $|\psi_{II}\rangle$ und zeigen Sie, dass die normierten Zustände gegeben sind durch

$$\begin{aligned}
|\psi_I\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(E_I - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}}}\left[H_{12}|\phi_1\rangle + (E_I - H_{11})|\phi_2\rangle\right] \\
|\psi_{II}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(E_{II} - H_{22})^2 + H_{12}H_{21}}}\left[(E_{II} - H_{22})|\phi_1\rangle + H_{21}|\phi_2\rangle\right]
\end{aligned}$$

d) (3 Punkte) Wie verhalten sich die Energieeigenzustände in den beiden Grenzfällen $\Delta \gg |H_{12}|$ und $\Delta \ll |H_{12}|$? **Hinweis:** Es genügt das Verhalten in niedrigster Ordnung. Betrachten Sie die Grenzwerte $\Delta \to 0$ und $|H_{12}| \to 0$!

## Aufgabe 3 (11 Punkte)

Ein ruhendes Elektron (mit Ladung $-e$ und Masse $m$) in einem Magnetfeld $\vec{B}$ stellt ein Beispiel für ein Zwei-Niveau-System wie in Aufgabe 2 dar. Es wird beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{e}{mc}\vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}.$$

Die Spinoperatoren sind gegeben durch $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$, und $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$. Die Paulimatrizen $\sigma_x$, $\sigma_y$ und $\sigma_z$ besitzen die Standarddarstellung

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenzustände des Operators $\hat{S}_z$ zu den Eigenwerten $\pm\frac{\hbar}{2}$ seien bezeichnet mit $|\pm\rangle$.

a) (3 Punkte) Geben Sie den Hamiltonoperator an für den Fall, dass das Magnetfeld die Form $\vec{B} = B_0(\cos\phi, \sin\phi, 0)$ hat. Bestimmen Sie die Energieeigenwerte.

b) (3 Punkte) Zeigen Sie, dass die Eigenzustände des Hamiltonoperators gegeben sind durch

$$\begin{aligned}
|\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\phi/2}|+\rangle + e^{i\phi/2}|-\rangle\right] \\
|\downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\phi/2}|+\rangle - e^{i\phi/2}|-\rangle\right].
\end{aligned}$$

Welche Zustände werden damit beschrieben? Interpretieren Sie das Ergebnis!

c) (3 Punkte) Anstelle des Magnetfeldes aus a) werde jetzt ein Feld $\vec{B} = (0, 0, B_1)$ in $z$-Richtung angelegt. Lösen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung und bestimmen Sie $|\psi(t)\rangle$ für den Fall, dass sich das Elektron anfänglich im Zustand $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$ aus b) befindet. Überlegen Sie sich dazu zuerst, welche Zustände den Hamiltonoperator jetzt diagonalisieren und wie sich diese Zustände zeitlich entwickeln. Interpretieren Sie das Ergebnis!

d) (2 Punkte) Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron nach Ablauf der Zeit $t$ im Zustand $|\uparrow\rangle$ zu finden?

**Aufgabe 4** (14 Punkte)

Berechnen Sie die Energieverschiebung und Aufspaltung $\Delta E_{n\ell j}$ der 1s-, 2s-, und 2p-Niveaus im Wasserstoffatom, die durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung hervorgerufen wird. Der Hamiltonoperator lautet:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r), \quad \hat{H}_1 = \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}, \quad V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

a) (2 Punkte) Geben Sie die Kommutatoren $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$, $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i]$ und $[\hat{S}_i, \hat{S}_j]$, $[\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_i]$ für die Drehimpulsoperatoren $\hat{\vec{L}}$ und die Spinoperatoren $\hat{\vec{S}}$ an.

b) (4 Punkte) Zeigen Sie, dass die Drehimpulsoperatoren $\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z, \hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{S}}^2$ mit $\hat{H}$ kommutieren, wobei $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$.

c) (3 Punkte) $|jlsm_j\rangle$ ist gemeinsamer Eigenzustand von $\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{J}_z$:

$$\hat{\vec{J}}^2|j\ell sm_j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j\ell sm_j\rangle \qquad \hat{\vec{L}}^2|j\ell sm_j\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)|j\ell sm_j\rangle$$
$$\hat{\vec{S}}^2|j\ell sm_j\rangle = \hbar^2 s(s+1)|j\ell sm_j\rangle \qquad \hat{J}_z|j\ell sm_j\rangle = \hbar m_j|j\ell sm_j\rangle$$

Berechnen Sie $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}\,|jlsm_j\rangle$!

d) (5 Punkte) Berechnen Sie $\Delta E_{n\ell j} = \langle nj\ell sm_j|\hat{H}_1|nj\ell sm_j\rangle$. Überlegen Sie sich zuerst anhand des Ergebnisses von b), welche Matrixelemente überhaupt von Null verschieden sein können!

**Hinweise**:

$$\int_0^\infty dx\, x^n\, e^{-\alpha x} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\begin{aligned}
|nj\ell sm_j\rangle &= |n\ell\rangle|j\ell sm_j\rangle, \quad \langle r|nj\ell sm_j\rangle = \langle r|n\ell\rangle|j\ell sm_j\rangle = R_{n\ell}(r)|j\ell sm_j\rangle \\
R_{1s}(r) &= \frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0} \\
R_{2s}(r) &= \frac{2}{(2a_0)^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/(2a_0)} \\
R_{2p}(r) &= \frac{1}{\sqrt{24}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/(2a_0)} \qquad \text{mit} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.
\end{aligned}$$