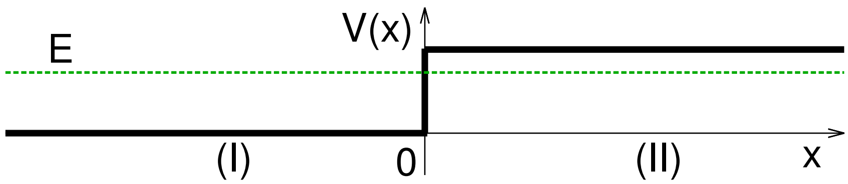
Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 5

Präsenzübungen

Aufgabe 1:



(a) *Lösung 1:*

Die Wellenfunktion ist

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{mit } k = \sqrt{2mE}/\hbar, \tag{1}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \qquad \text{mit } \kappa = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar. \tag{2}$$

Es gilt $C = 0$ wegen Beschränktheit.

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = A + B \stackrel{!}{=} \psi_{\mathrm{II}}(0) = D, \tag{3}$$

$$\psi'_{\mathrm{I}}(0) = ikA - ikB \stackrel{!}{=} \psi'_{\mathrm{II}}(0) = -D\kappa. \tag{4}$$

Es folgt

$$B = -\frac{1 + i\frac{k}{\kappa}}{1 - i\frac{k}{\kappa}} A, \tag{5}$$

$$D = -\frac{2i\frac{k}{\kappa}}{1 - i\frac{k}{\kappa}} A. \tag{6}$$

Die Wahrscheinlichkeitsströme sind

$$j_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \tag{7}$$

$$j_r = -|A|^2 \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{1 + i\frac{k}{\kappa}}{1 - i\frac{k}{\kappa}} \right|^2 = -|A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \tag{8}$$

$$j_t = 0. \tag{9}$$

Die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten sind

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = 1, \tag{10}$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = 0. \tag{11}$$

Dies konnte man erwarten, weil $E < V_1$ ist und die Lösung im Bereich II daher exponentiell abfällt.

Lösung 2:
Die Wellenfunktion ist

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\cos kx + B\sin kx \qquad \text{mit } k = \sqrt{2mE}/\hbar, \tag{12}$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \qquad \text{mit } \kappa = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar. \tag{13}$$

Es gilt $C = 0$ wegen Beschränktheit.

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = A \overset{!}{=} \psi_{\mathrm{II}}(0) = D, \tag{14}$$
$$\psi'_{\mathrm{I}}(0) = Bk \overset{!}{=} \psi'_{\mathrm{II}}(0) = -D\kappa. \tag{15}$$

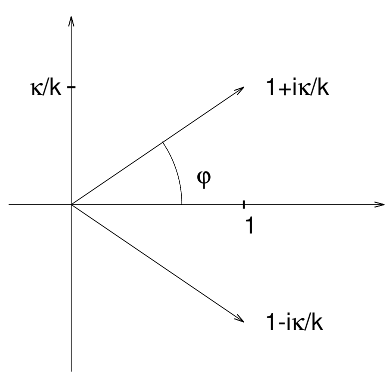
Es folgt

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\cos(kx) - A\,\frac{\kappa}{k}\sin kx, \tag{16}$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = A\,e^{-\kappa x} \tag{17}$$

Es folgt mit dem Euler-Formel:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{I}}(x) &= A\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} - A\,\frac{\kappa}{4}\,\frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \\ &= \frac{A}{2}\left[\left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right)e^{ikx} + \left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right)e^{-ikx}\right] \\ &= \underbrace{\frac{A}{2}\left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right)}_{=:\,A'}\left[e^{ikx} + \frac{1 - i\,\frac{\kappa}{k}}{1 + i\,\frac{\kappa}{k}}\,e^{-ikx}\right].\end{aligned} \tag{18}$$

Offenbar ist $\left|\frac{1 - i\frac{\kappa}{k}}{1 + i\frac{\kappa}{k}}\right| = 1$:



Sei

$$\varphi = \arctan\frac{\kappa}{k}, \tag{19}$$

dann ist

$$1 - i\frac{\kappa}{k} = \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}\,e^{-i\varphi} \quad \text{und} \quad 1 + i\frac{\kappa}{k} = \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}\,e^{i\varphi} \tag{20}$$
$$\Rightarrow \quad \frac{1 - i\frac{\kappa}{k}}{1 + i\frac{\kappa}{k}} = e^{-2i\varphi}. \tag{21}$$

Also folgt

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A'\left[e^{ikx} + e^{-2i\varphi}e^{-ikx}\right]. \tag{22}$$

Wir wählen $A' = 1$ als Amplitude der einlaufenden Welle. Es folgt

$$A = \frac{2A'}{1 + i\,\frac{\kappa}{k}} = \frac{2}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}\; e^{i\varphi}} = \frac{2e^{-i\varphi}}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}} \tag{23}$$

$$\Rightarrow \quad \psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{2e^{-i\varphi}}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}}\, e^{-\kappa x}. \tag{24}$$

Die Amplitude der reflektierten Welle ist $r = e^{-2i\varphi}$, woraus für die Reflexionswahrscheinlichkeit folgt $R = |r|^2 = 1$.

(b) Die Wellenfunktion ist

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \qquad \text{mit } k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, \tag{25}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x} \qquad \text{mit } k_2 = \sqrt{2m(E - V_1)}/\hbar, \tag{26}$$

wobei $D = 0$ gesetzt werden kann, da für $x > 0$ nur eine transmittierte aber keine einfallende Welle vorliegen soll. Die Anschlussbedingungen ergeben

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = A + B \overset{!}{=} \psi_{\mathrm{II}}(0) = C, \tag{27}$$

$$\psi'_{\mathrm{I}}(0) = ik_1 A - ik_1 B \overset{!}{=} \psi'_{\mathrm{II}}(0) = ik_2 C. \tag{28}$$

Es folgt

$$C = \frac{2}{1 + \frac{k_1}{k_2}}\, A, \tag{29}$$

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\, A. \tag{30}$$

Die Wahrscheinlichkeitsströme sind

$$j_i = |A|^2\, \frac{\hbar k_1}{m}, \tag{31}$$

$$j_r = -|A|^2\, \frac{\hbar k_1}{m} \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \tag{32}$$

$$j_t = |A|^2\, \frac{\hbar k_2}{m} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2. \tag{33}$$

Die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten sind

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \tag{34}$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \tag{35}$$

so dass gilt $R + T = 1$. Beachte, dass $T \neq |C|^2/|A|^2$, im Gegensatz zur Potentialbarriere. Dies liegt daran, dass der Impuls links und rechts der Stufe nicht gleich ist. Die Verwendung der Ströme ist die sichere Methode zur Bestimmung von R und T.

Aufgabe 2: Die Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\frac{\pi x}{L}\; \theta\big(\frac{L}{2} - |x|\big) \tag{36}$$

Als erstes bestimmen wir $\langle x \rangle$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) x \psi_1(x) = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = 0 \tag{37}$$

wobei wir hier die Symmetrie des Integranden ausgenutzt haben. Für $\langle x^2 \rangle$ gilt:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) x^2 \psi_1(x) = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{\left(\pi^2 - 6\right) L^2}{12\pi^2} \tag{38}$$

Die Schwankung im Ortsraum ist daher gegeben als

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{\sqrt{\frac{1}{3}\left(\pi^2 - 6\right)} L}{2\pi} \tag{39}$$

Als nächstes berechnen wir die Schwankung im Impulsraum. Dazu wird die Fourier-transformierte der Wellenfunktion bestimmt. Diese ist

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k) &= \int_{\infty}^{\infty} dx\, \psi_1(x) e^{-ikx} \\
&= \sqrt{\frac{2}{L}} \int_{-L/2}^{L/2} dx \cos \frac{\pi x}{L} e^{-ikx} \\
&= \sqrt{\frac{2}{L}} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, e^{-ikx} \frac{1}{2} \left(e^{i\frac{\pi x}{L}} + e^{-i\frac{\pi x}{L}}\right) \\
&= -\sqrt{\frac{1}{2L}} \left[\frac{1}{i(k - \pi/L)} e^{-ix(k-\pi/L)} + \frac{1}{i(k + \pi/L) e^{+ix(k-\pi/L)}} \right]_{-L/2}^{L/2} \\
&= -\sqrt{\frac{1}{2L}} \left(\frac{1}{i(k - \pi/L)} [ie^{-ikL/2} + ie^{+ikL/2}] + \frac{1}{i(k + \pi/L)} [-ie^{-ikL/2} - ie^{+ikL/2}] \right) \\
&= -\sqrt{\frac{1}{2L}} \left(\frac{1}{(k - \pi/L)} - \frac{1}{(k + \pi/L)} \right) 2 \cos \frac{kL}{2} \\
&= \frac{2\sqrt{2}\pi\sqrt{L}}{\pi^2 - k^2 L^2} \cos \frac{kL}{2}
\end{aligned} \tag{40}$$

Der Erwartungswert des Impulses ist definiert als

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \hbar k |\tilde{\psi}(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \hbar k \frac{8\pi^2 L}{(\pi^2 - k^2 L^2)} \cos^2 kL/2 = 0 \tag{41}$$

und

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} (\hbar k)^2 |\tilde{\psi}(k)|^2 = \frac{2\pi^3 \hbar^2}{L^2} \,. \tag{42}$$

Die Schwankung des Impulses beträgt daher

$$\Delta p = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar}{L} \tag{43}$$

Daher gilt

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{1}{6}\pi \left(\pi^2 - 6\right)} \hbar > \frac{\hbar}{2}. \tag{44}$$

Hausaufgaben

Aufgabe 3:

Das Potential lautet

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}\,m\omega_0^2 r^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2+y^2+z^2) \tag{45}$$

(a) Mit dem Separationsansatz $\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$ lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2}\,m\omega_0^2(x^2+y^2+z^2)\right]X(x)Y(y)Z(z) = EX(x)Y(y)Z(z). \tag{46}$$

Mit $E = E_x + E_y + E_z$ können wir dies schreiben als

$$\begin{aligned} Y(y)Z(z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2-E_x\right]X(x) + X(x)Z(z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2y^2-E_y\right]Y(y) \\ + X(x)Y(y)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2z^2-E_z\right]Z(z) = 0. \end{aligned} \tag{47}$$

Division durch $X(x)Y(y)Z(z)$ ergibt

$$\begin{aligned} \frac{1}{X(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2-E_x\right]X(x) + \frac{1}{Y(y)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2y^2-E_y\right]Y(y) \\ + \frac{1}{Z(z)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2z^2-E_z\right]Z(z) = 0. \end{aligned} \tag{48}$$

Da die drei Summanden jeweils nur von einer der Variablen x, y, z abhängen, die Summe aber für alle x, y, z gleich (nämlich Null) sein muss, separiert die Gleichung in die folgenden drei Gleichungen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\right]X(x) = E_xX(x), \tag{49}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2y^2\right]Y(y) = E_yY(y), \tag{50}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2z^2\right]Z(z) = E_zZ(z). \tag{51}$$

(b) Die Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators lauten

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n\,n!}}\,H_n\!\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,x\right)\exp\!\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}\,x^2\right) \quad \text{mit } n = 0,1,2,\dots \tag{52}$$

Die zugehörigen Eigenenergien lauten $E_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$.

Die Eigenfunktionen des dreidimensionalen harmonischen Oszillators lauten daher

$$\begin{aligned} \psi_{n_x,n_y,n_z}(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\frac{1}{(2_x^n\,n_x!)^{3/2}}\,H_{n_x}\!\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,x\right)\frac{1}{(2_y^n\,n_y!)^{3/2}}H_{n_y}\!\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,y\right) \\ \times\frac{1}{(2_z^n\,n_z!)^{3/2}}H_{n_z}\!\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,z\right)\exp\!\Big(-\frac{m\omega_0}{\hbar}\,\underbrace{(x^2+y^2+z^2)}_{=r^2}\Big) \end{aligned} \tag{53}$$

mit

$$n_x = 0,1,2,\dots, \tag{54}$$

$$n_y = 0,1,2,\dots, \tag{55}$$

$$n_z = 0,1,2,\dots, \tag{56}$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega_0\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right). \tag{57}$$

Aufgabe 4:

(a) $\sigma_x \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}$

(b) $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$, $\sigma_y \sigma_x = -i\sigma_z$, also $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$

(c) Die Eigenwertgleichung lautet

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{58}$$

Die charakteristische Gleichung lautet

$$0 = \det(\sigma_x - \lambda \mathbb{1}) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1. \tag{59}$$

Die Eigenwerte sind daher $\lambda_1 = +1$ und $\lambda_2 = -1$ und die zugehörigen Eigenvektoren ergeben sich durch Lösung der Eigenwertgleichung mit eingesetzten Eigenwerten zu

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \tag{60}$$