Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2024

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 1

Präsenzübungen

Aufgabe 1:

(a) $f(\vec{r}) = z$:

$$\vec{\nabla} f = \begin{pmatrix} \frac{\partial z}{\partial x} \\ \frac{\partial z}{\partial y} \\ \frac{\partial z}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{z} \tag{1}$$

(b) $f(\vec{r}) = r$, wobei $r = |\vec{r}|$ ist:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\partial x} \\ \frac{\partial \sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\partial y} \\ \frac{\partial \sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \\ \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \\ \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \end{pmatrix} = \frac{\vec{r}}{r} \equiv \hat{r} \tag{2}$$

(c) $f(\vec{r}) = \dfrac{\vec{a} \cdot \vec{r}}{r^3}$ mit einem konstanten Vektor $\vec{a}$: Mit

$$\vec{a} = (a_x,\, a_y,\, a_z) \tag{3}$$

ist

$$f(\vec{r}) = \frac{a_x x + a_y y + a_z z}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} \tag{4}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x} = \frac{a_x}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} - \frac{(a_x x + a_y y + a_z z)\, 3(x^2+y^2+z^2)^{1/2}\, x}{(x^2+y^2+z^2)^3}. \tag{5}$$

Alle drei Komponenten:

$$\vec{\nabla} f(\vec{r}) = \frac{\vec{a}}{r^3} - 3\, \frac{\vec{a} \cdot \vec{r}}{r^5}\, \vec{r} \tag{6}$$

(d) $f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ mit einem konstanten Vektor $\vec{k}$:

$$\vec{k} = (k_x,\, k_y,\, k_z) \tag{7}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{\partial}{\partial x}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = i k_x\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{8}$$

Alle drei Komponenten:

$$\vec{\nabla} f(\vec{r}) = i\vec{k}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = i\vec{k}\, f(\vec{r}) \tag{9}$$

Aufgabe 2:

(a) $y' = a\,y + bx$, wobei a eine Konstante sei: Die Gleichung $y' - ay = bx$ ist eine lineare inhomogene Differentialgleichung. Ihre allgemeine Lösung ergibt sich als Summe der allgemeinen Lösung der zugehörigen homogenen Differentialgleichung und einer speziellen Lösung der inhomogenen Gleichung. Die homogene Gleichung lautet $y' - ay = 0$. Diese können wir mittels Trennung der Variablen lösen:

$$\frac{dy}{y} = a\,dx \tag{10}$$

$$\Rightarrow \quad \ln y = ax + C \tag{11}$$

$$\Rightarrow \quad y = e^{ax+C} = e^C e^{ax} \tag{12}$$

Die allgemeine Lösung der homogenen Gleichung ist:

$$y = y_{\text{hom}} := \lambda\, e^{ax}, \quad \lambda \in \mathbb{C}. \tag{13}$$

Ein Exponentialansatz ist auch möglich.

Wir benötigen auch eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung. Da die Gleichung linear in x ist, probieren wir den linearen Ansatz $y = \alpha\, x + \beta$. Es folgt

$$\alpha = a\alpha x + a\beta + bx, \tag{14}$$

was für alle x gelten muss. Dies wird gelöst durch

$$\alpha = a\beta \quad \wedge \quad a\alpha = -b \tag{15}$$

$$\Rightarrow \quad \alpha = -\frac{b}{a} \quad \wedge \quad \beta = -\frac{b}{a^2}. \tag{16}$$

Die allgemeine Lösung der inhomogenen Gleichung lautet daher

$$y = \lambda\, e^{ax} - \frac{b}{a}\left(x + \frac{1}{a}\right). \tag{17}$$

(b) $y'' = -\omega^2\, y$, wobei ω eine reelle Konstante sei: Wir benutzen einen Exponentialansatz:

$$y = y_0\, e^{cx}. \tag{18}$$

Es folgt

$$c^2 y_0 e^{cx} = -\omega^2 y_0 e^{cx} \tag{19}$$

$$\Rightarrow \quad c^2 = -\omega^2 \quad \Rightarrow \quad c = \pm i\omega. \tag{20}$$

Es gibt zwei linear unabhängige Lösungen: $e^{i\omega x}$ und $e^{-i\omega x}$. Die allgemeine Lösung lautet daher

$$y = y_1\, e^{i\omega x} + y_2\, e^{-i\omega x}. \tag{21}$$

Da

$$\cos\omega x = \frac{e^{i\omega x} + e^{-i\omega x}}{2} \tag{22}$$

$$\sin\omega x = \frac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2i} \tag{23}$$

linear unabhängige Linearkombinationen der beiden Lösungen sind, können wir die allgemeine Lösung auch schreiben als

$$y = \tilde{y}_1 \cos\omega x + \tilde{y}_2 \sin\omega x\,. \tag{24}$$

(c) $y'' = \omega^2 y$, wobei ω eine reelle Konstante sei: Wir benutzen wieder einen Exponentialansatz:

$$y = y_0 \, e^{cx}. \tag{25}$$

Es folgt

$$c^2 y_0 e^{cx} = \omega^2 y_0 e^{cx} \tag{26}$$

$$\Rightarrow \quad c^2 = \omega^2 \quad \Rightarrow \quad c = \pm\omega. \tag{27}$$

Es gibt zwei linear unabhängige Lösungen: $e^{\omega x}$ und $e^{-\omega x}$ (oder $\sinh \omega x$, $\cosh \omega x$). Die allgemeine Lösung lautet daher

$$y = y_1 e^{\omega x} + y_2 e^{-\omega x}. \tag{28}$$

(d) $y' = ay^2$, wobei a eine Konstante sei: Wir verwenden Trennung der Variablen,

$$\frac{dy}{y^2} = a dx \tag{29}$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{y} = ax + C \tag{30}$$

$$\Rightarrow \quad y = -\frac{1}{ax + C}\,, \tag{31}$$

wobei C eine Integrationskonstante ist. Die Differentialgleichung ist *nichtlinear*. Für nichtlineare Differentialgleichungen existiert kein universelles Verfahren zur Konstruktion der allgemeinen Lösung; es könnte weitere Klassen von Lösungen oder auch isolierte spezielle Lösungen geben. Das ist für die vorliegende Gleichung auch der Fall: Eine isolierte Lösung ist

$$y = 0\,, \tag{32}$$

wie man durch Einsetzen sofort sieht.

Aufgabe 3:

(a) Absorbiert ein Elektron mit der Bindungsenergie (Austrittsarbeit) W_A zwei Photonen der Energie $h\nu$, so bleibt ihm die kinetische Energie

$$\frac{1}{2}\, mv^2 = 2h\nu - W_A. \tag{33}$$

(b) Die Energie der zwei Photonen muss größer sein als die Austrittsarbeit:

$$2h\nu > W_A. \tag{34}$$

Die Grenzfrequenz ist daher

$$\nu_g = \frac{1}{2}\,\frac{W_A}{h}. \tag{35}$$

(c) Beim normalen Photoefekt ist der Photostrom proportional zur Lichtintensität I, weil ein konstanter Anteil von Photonen Elektronen herauslöst (im Idealfall 100%) und die Lichtintensität proportional zur Zahl der Photonen ist. Bei der Zwei-Photonen-Photoemission ist es notwendig, dass zwei Photonen mit demselben Elektron wechselwirken. Es gibt zwei verschiedene Möglichkeiten: (1) zwei Photonen werden kohärent absorbiert, das Elektron ist dazwischen in einem virtuellen Zustand, oder (2) zuerst absorbiert das Elektron ein Photon und geht in einen realen Zustand mit größerer Energie über. Später wird ein weiteres Photon absorbiert und induziert einen Übergang des Elektrons in einen ungebundenen Zustand. Ein unbesetzter gebundener (Zwischen-) Zustand bei der Energie $W_A + h\nu$ wird für den Prozess (2) benötigt: Zustand (Z) in Abbildung 1.

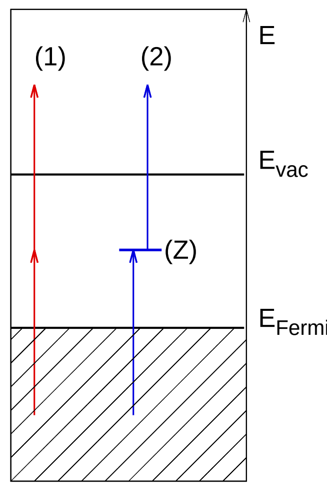

Abbildung 1: (1) Direkte Zwei-Photonen-Photoemission, (2) indirekte Zwei-Photonen-Photoemission. Der Zustand (Z) wird für die indirekte Zwei-Photonen-Photoemission benötigt.

(1) Direkte Zwei-Photonen-Photoemission: Zwei Photonen werden praktisch zeitgleich benötigt. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist proportional zum *Quadrat* der Zahl des Photonen. Der Photostrom ist daher proportional zum Quadrat der Lichtintensität.

(2) Indirekte Zwei-Photonen-Photoemission (dies muss nicht in der Übung diskutiert werden!): Die Ratengleichung für die Entwicklung der Besetzungszahl des Zustands (Z) lautet

$$\dot{n}_{(\mathrm{Z})} = \alpha I - \beta n_{(\mathrm{Z})}, \tag{36}$$

wobei α und β positive Konstanten sind. αI ist die Anregungsrate der Elektronen in den Zustand (Z). Sie ist proportional zur Lichtintensität I. $-\beta n_{(\mathrm{Z})}$ beschreibt Relaxation: Die Elektronen geben ihre Energie über Emission von Photonen oder Phononen ab und fallen zurück in den Ausgangszustand. Die Rate dafür ist proportional zur Besetzung des Zwischenzustands (Z).

Im Gleichgewicht ist $0 = \dot{n}_{(\mathrm{Z})} = \alpha I - \beta n_{(\mathrm{Z})}$, also

$$n_{(\mathrm{Z})} = \frac{\alpha}{\beta} I. \tag{37}$$

Die Besetzungszahl des Zustands (Z) ist also proportional zur Lichtintensität. Die Zahl des Photoelektronen aus Zustand (Z) ist proportional zu dieser Besetzung und auch zur Lichtintensität, wegen der Anregung aus (Z) in einen ungebundenen Zustand. Die Zahl der Photoelektronen (der Photostrom) ist also auch hier proportional zum Quadrat der Lichtintensität.

Zusammenfassend ist ganz allgemein der Photostrom proportional zum Quadrat der Intensität, I^2.

Hausaufgaben

Aufgabe 4:

(a) Für die Bewegung auf einer Kreisbahn ist die Coulomb-Kraft gleich der Zentripetalkraft:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \tag{38}$$

$$\Rightarrow \quad mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r}. \tag{39}$$

Daraus folgt

$$E = \frac{1}{2}\,mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r} = -\frac{1}{2}\,mc^2\,\frac{r_0}{r} \tag{40}$$

mit r_0 vom Aufgabenblatt. (Bemerkung: Wir sehen, dass die kinetische und die potentielle Energie im Verhältnis $1/2$ zu -1 stehen. Wir haben hier den *Virialsatz* für diesen Spezialfall bewiesen.)

Wenn sich die Energie mit der Zeit ändert, ist die Bahn kein Kreis mehr, sondern eine Spirale. Wenn die Abweichung von der Kreisbahn (pro Umlauf) aber gering ist, können wir trotzdem den Ausdruck aus der Aufgabe verwenden. Die Änderung der Energie mit der Zeit ist dann

$$\frac{dE}{dt} \approx -\frac{e^2 a_r^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} = -\frac{e^2}{6\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{c^3}\left(\frac{1}{m}\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r^2}\right)^2 = -\frac{2}{3}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^3\frac{1}{c^3}\,\frac{1}{m^2}\,\frac{1}{r^4} = -\frac{2}{3}\,mc^3\,\frac{r_0^3}{r^4}. \tag{41}$$

Aus $E = -\frac{1}{2}\,mc^2\,\frac{r_0}{r}$ folgt

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{2}\,mc^2\,\frac{r_0}{r^2}\,\dot{r} \overset{!}{=} -\frac{2}{3}\,mc^3\,\frac{r_0^3}{r^4} \tag{42}$$

$$\Rightarrow \quad \dot{r} = -\frac{4}{3}\,c\,\frac{r_0^2}{r^2}, \tag{43}$$

was zu zeigen war.

(b) Trennung der Variablen:

$$dr\,r^2 = -\frac{4}{3}\,cr_0^2\,dt \tag{44}$$

$$\Rightarrow \quad \int_{a_B}^{r} dr'\,r'^2 = \frac{r^3 - a_B^3}{3} = -\frac{4}{3}\,cr_0^2 t \tag{45}$$

$$\Rightarrow \quad r = (a_B^3 - 4cr_0^2 t)^{1/3}. \tag{46}$$

Diese Funktion ist in Abbildung 2 dargestellt.

Also für den Abstand Null (Elektron im Kern):

$$0 = (a_B^3 - 4cr_0^2 t)^{1/3} \quad \Rightarrow \quad t = \frac{a_B^3}{4cr_0^2}. \tag{47}$$

Die Lebensdauer ist damit $t_L = a_B^3/4cr_0^2 \approx 1{,}6 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{s}$.

Aufgabe 5:

(a) Kasten der Länge L mit elastischer Reflexion an den Wänden: Während der klassischen Bewegung ist der Impuls des Teichens p_0 oder $-p_0$. Der Impuls wechselt sein Vorzeichen bei den Reflexionen an den Wänden, siehe Abbildung 3. Das Phasenraumintegral lautet dann

$$\oint_{H(p,x)=E} p\,dx = \underbrace{\int_{-L/2}^{L/2} p_0\,dx}_{=\,Lp_0} - \underbrace{\int_{L/2}^{-L/2} p_0\,dx}_{=\,-Lp_0} = 2Lp_0. \tag{48}$$

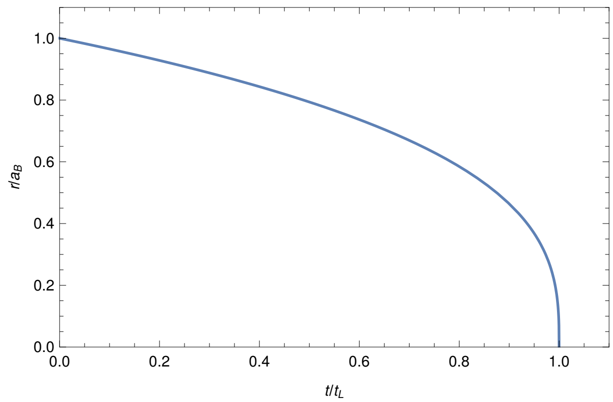

Abbildung 2: Abhängigkeit des Bahnradius von der Zeit für ein „klassisches Atom“.

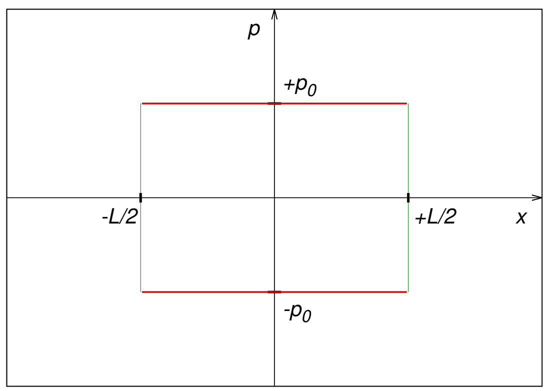

Abbildung 3: Aufgabe 5(a), klassische Bahn, $H(x,p) = E$. Der Impuls springt bei den elastischen Reflexionen.

Die Quantisierungsregel lautet (wir unterdrücken die mögliche Verschiebung der Quantenzahl n um n_c):

$$n\,h = \oint_{H(p,x)=E} p\,dx = 2Lp_0. \tag{49}$$

Es folgt

$$p_0 = \frac{h}{2L}\,n \tag{50}$$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}\,n^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2. \tag{51}$$

Das stimmt mit dem exakten Ergebnis (mit $n = 1, 2, \ldots$) überein, wie wir später sehen werden.

(b) $V = a\,x^4$, $a > 0$ konstant: Wir bezeichnen den maximalen Impuls mit p_0, und die maximale Auslenkung mit x_0, siehe Abbildung 4. Es ist

$$x_0 = \sqrt[4]{\frac{E}{a}}, \tag{52}$$

$$p_0 = \sqrt{2mE}. \tag{53}$$

Das Phasenraumintegral ist

$$\begin{aligned}
\oint_{H=E} p\,dx &= \int_{-x_0}^{+x_0} \sqrt{2m}\,\sqrt{E-ax^4}\,dx - \int_{+x_0}^{-x_0} \sqrt{2m}\,\sqrt{E-ax^4}\,dx \\
&= 2\int_{-x_0}^{+x_0} \sqrt{2m}\sqrt{E-ax^4}\,dx = 4\int_0^{+x_0} \sqrt{2m}\,\sqrt{E-ax^4}\,dx \\
&= 4\sqrt{2}\,\sqrt{ma}\,\underbrace{\int_0^{x_0} \sqrt{x_0^4-x^4}dx}_{r=x/x_0,\;dx=x_0dr} = 4\sqrt{2}\,\sqrt{ma}\,x_0^3 \underbrace{\int_0^1 \sqrt{1-r^4}\,dr}_{=\frac{2}{3}K(-1)}
\end{aligned} \tag{54}$$

$$\Rightarrow \quad \oint_{H=E} p\,dx = \frac{8\sqrt{2}}{3}\,K(-1)\,\sqrt{ma}\,x_0^3. \tag{55}$$

Die Quantisierungsregel lautet (ohne Konstante)

$$n\,h = \oint_{H=E} p\,dx = \frac{8\sqrt{2}}{3}\,K(-1)\,\sqrt{ma}\,x_0^3. \tag{56}$$

Die Energie der Zustands n ist dann (beachte $E = a\,x_0^4$)

$$E_n = \frac{3^{4/3}}{2^{14/3}K(-1)^{4/3}}\,\frac{h^{4/3}a^{1/3}}{m^{2/3}}\,n^{4/3}. \tag{57}$$

Bemerkung: Die Definition des vollständigen elliptischen Integrals 1. Art ist

$$K(m) = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-mt^2)}} \tag{58}$$

(siehe Abramowitz & Stegun: Handbook of Mathematical Functions 17.3.1). Hier haben wir zu berechnen

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^1 dr\,\sqrt{1-r^4} \qquad \text{mit } t = \frac{x}{x_{\max}} \\
&= r\,\sqrt{1-r^4}\Big|_0^1 + 2\int_0^1 dt\,\frac{r^4}{\sqrt{1-r^4}} \\
&= 2\int_0^1 dr\,\frac{r^4-1+1}{\sqrt{1-r^4}} = -2I + 2\int_0^1 \frac{dr}{\sqrt{1-r^4}}.
\end{aligned} \tag{59}$$

Es folgt

$$I = \frac{2}{3}\int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^4}} = \frac{2}{3}\,K(-1). \tag{60}$$

(c) $V = f\,|x|$, $f > 0$ konstant: Die Identität

$$\oint p\,dx = -\oint x\,dp \tag{61}$$

zeigt man leicht mittels partieller Integration. Der Randterm muss verschwinden, da der Integrationsweg geschlossen ist.

Wir bezeichnen den maximalen Impuls mit p_0, und die maximale Auslenkung mit x_0, siehe Abbildung 5. Es ist

$$x_0 = \frac{E}{f}, \tag{62}$$

$$p_0 = \sqrt{2mE}. \tag{63}$$

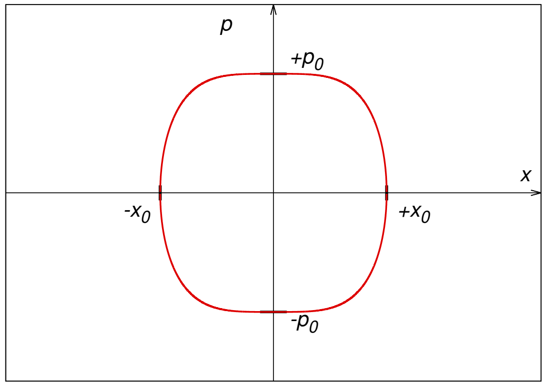

Abbildung 4: Aufgabe 5(b), klassische Bahn, $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + ax^4 = E$.

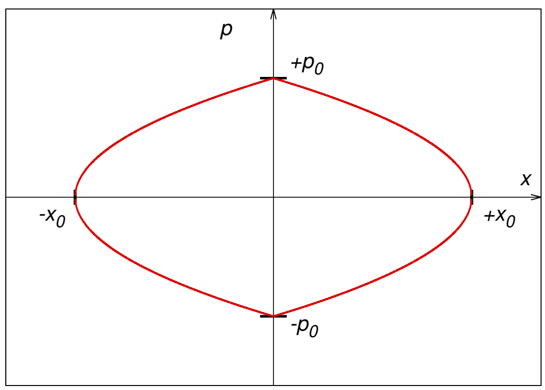

Abbildung 5: Aufgabe 5(c), klassische Bahn, $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + f\,|x| = E$.

Das Phasenraumintegral ist

$$\begin{aligned}\oint_{H(p,x)=E} p\,dx = -\oint_{H(p,x)=E} x\,dp \\ &= -\left[-\int_{-\sqrt{2mE}}^{+\sqrt{2mE}} \left(\frac{E}{f} - \frac{1}{2mf}\,p^2\right) dp + \int_{+\sqrt{2mE}}^{-\sqrt{2mE}} \left(\frac{E}{f} - \frac{1}{2mf}\,p^2\right) dp\right] \qquad (64) \\ &= 2\int_{-\sqrt{2mE}}^{+\sqrt{2mE}} \left(\frac{E}{f} - \frac{1}{2mf}\,p^2\right) dp = \frac{8\sqrt{2}}{3}\,\frac{\sqrt{m}}{f}\,E^{3/2}.\end{aligned}$$

Die Quantisierungsregel lautet (ohne Konstante)

$$n\,h = \oint_{H=E} pdq = \frac{8\sqrt{2}}{3}\,\frac{\sqrt{m}}{f}\,E^{3/2}. \qquad (65)$$

Die Energie des Zustands n ist dann

$$E_n = \frac{3^{2/3}}{2^{7/3}}\,\frac{f^{2/3}h^{2/3}}{m^{1/3}}\,n^{2/3}. \qquad (66)$$