Im Folgenden finden Sie den Text der am 28.7.2010 geschriebenen Theorie D-Klausur, sowie Lösungen zu den einzelnen Aufgaben. Diese Lösungen sind unter Umständen nicht vollständig oder perfekt, und sie enthalten nicht alle Details zur Vergabe der Punkten. Wenn Sie Fragen zu den Lösungen oder der Bewertungen Ihrer Klausur haben, stehen wir Ihnen zu Einnsicht-/Besprechungsterminen zur Verfügung, deren genaue Daten wir demnächst auf der Webseite der Vorlesung veröffentlichen werden.

Stand: 29. Juli 2010 12:00

Klausur zur Vorlesung Theorie D – Quantenmechanik I im SS 2010

Prof. Dr. M. Mühlleitner, Dr. H. Sahlmann

Name: ______________________________

Matrikelnummer: _______________

Ich studiere im

◯: BSc-Studiengang Physik ◯: BSc-Studiengang Meteorologie/Geophysik

◯: Diplomstudiengang Physik ◯: ___________________________

Von Aufsicht/Korrektor auszufüllen: Bearbeitet von ____ Uhr bis ____ Uhr

K1	K2	K3	K4	$\sum$

◯:Bestanden ◯: Nicht bestanden Note: ______

Hinweise: Sie haben zur Bearbeitung der Aufgaben zwei Stunden Zeit. Als Hilfsmittel zugelassen sind zwei Seiten eines DIN A4 Blattes mit handschriftliche Notizen sowie ein Wörterbuch. Sie können insgesamt 20 Punkte erreichen. Beachten Sie weiterhin:

- Füllen Sie die obigen Felder dieses Deckblattes aus, und legen Sie Ihren Lichtbildausweis auf Ihren Tisch.
- Sie dürfen nur das von uns zur Verfügung gestellte Papier verwenden. Dies gilt auch für Kladden.
- Lesen Sie die Aufgabenstellungen genau durch. Fragen Sie nach, wenn Sie eine Aufgabenstellung nicht verstehen.
- Geben Sie eine Herleitung für Ihre Ergebnisse an. Ergebnisse ohne Herleitung werden nicht gewertet.
- Schreiben Sie leserlich, und geben Sie Ihren Namen auf allen Blättern an, die Sie abgeben.
- Nach dem Austeilen der Aufgabenblätter bis zum Ende der Klausur darf kein Prüfling den Hörsaal verlassen, ohne zuvor sämtliche Unterlagen (insbesondere auch das Aufgabenblatt!) abgegeben zu haben. Beim Austreten (nur ein Student zur Zeit) notieren wir die Uhrzeit auf dem Deckblatt und ziehen alle bis dahin beschriebenen Blätter ein. Beim Wiedereintritt stellen wir neues Bearbeitungspapier und ein neues Aufgabenblatt zur Verfügung.

Wir wünschen Ihnen viel Erfolg.

Aufgabe K1 - Formalismus (4 Punkte)

(a) Sei H ein hermitescher Operator und ψ, ψ' zwei Eigenzustände von H, ψ zum Eigenwert E, ψ' zum Eigenwert E'. Es gelte $E \neq E'$. Zeigen Sie, dass $\langle \psi \,|\, \psi' \rangle = 0$. (*2 Punkte*)

(b) Der Translationsoperator $T_{\vec{a}}$ auf quadratintegrablen Ortswellenfunktionen (d.h. auf $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$) ist definiert durch

$$(T_{\vec{a}}\psi)(\vec{x}) := \psi(\vec{x} - \vec{a}), \tag{1}$$

wobei $\vec{a}$ ein fester Vektor aus $\mathbb{R}^3$ ist. Ausgehend von (1), berechnen Sie $T_{\vec{a}}^\dagger$ und zeigen Sie: $T_{\vec{a}}$ ist unitär. (*2 Punkte*)

Lösung:
(a) Gegeben Ψ, Ψ' mit

$$H\Psi = E\Psi, \qquad H\Psi' = E'\Psi', \qquad E' \neq E$$

und H hermitesch. Dann ist

$$E\langle \Psi \,|\, \Psi' \rangle = \langle H\Psi \,|\, \Psi' \rangle = \langle \Psi \,|\, H\Psi' \rangle = E'\langle \Psi \,|\, \Psi' \rangle.$$

Somit

$$0 = (E - E')\langle \Psi \,|\, \Psi' \rangle$$

Nach Voraussetzung ist $E - E' \neq 0$ und somit $\langle \Psi \,|\, \Psi' \rangle = 0$, was zu zeigen war.
(b) Wir berechnen für zwei beliebige Zustände Ψ, Ψ':

$$\begin{aligned}
\langle \Psi \,|\, T_{\vec{a}}\Psi' \rangle &= \int d^3x \, \overline{\Psi}(\vec{x}) \left(T_{\vec{a}}\Psi'\right)(\vec{x}) \\
&= \int d^3x \, \overline{\Psi}(\vec{x})\Psi'(\vec{x} - \vec{a}) \\
&= \int d^3x \, \overline{\Psi}(\vec{x} + \vec{a})\Psi'(\vec{x}) \\
&= \int d^3x \, \left(T_{-\vec{a}}\overline{\Psi}\right)(\vec{x})\Psi'(\vec{x}) \\
&= \langle T_{-\vec{a}}\Psi \,|\, \Psi' \rangle.
\end{aligned}$$

Damit haben wir gezeigt, dass $T_{\vec{a}}^\dagger = T_{-\vec{a}}$. Nun ist aber

$$\left(T_{\vec{a}}^\dagger T_{\vec{a}}\Psi\right)(\vec{x}) = \left(T_{-\vec{a}}T_{\vec{a}}\Psi\right)(\vec{x}) = \Psi(\vec{x} - \vec{a} + \vec{a}) = \Psi(\vec{x})$$

für einen beliebigen Zustand Ψ. Somit $T_{\vec{a}}^\dagger T_{\vec{a}} = \mathbb{I}$ und wir haben gezeigt, dass $T_{\vec{a}}$ unitär ist.

Aufgabe K2 - Wasserstoff-Wellenfunktionen (5 Punkte)

Die normierten Wasserstoff-Eigenfunktionen φ_{nlm} lassen sich als

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{2}$$

schreiben, wobei R_{nl} die sogenannte Radialfunktionen und Y_l^m die Kugelflächenfunktionen sind. Wir betrachten die Wellenfunktion

$$\Psi(r, \theta, \phi) = CR_{32}(r)(Y_2^0(\theta, \phi) + 2Y_2^2(\theta, \phi)), \tag{3}$$

wobei C eine reelle Normierungskonstante ist.

(a) Bestimmen Sie C so, dass Ψ normiert ist. (*ein Punkt*)

(b) Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie, des Drehimpulsquadrats, und der Drehimpuls z-Komponente. (*ein Punkt*)

(c) Eine Messung der Energie wird im Zustand Ψ durchgeführt. Welches sind die möglichen Messwerte, und mit welcher Wahrscheinlichkeit treten Sie auf? Bestimmen Sie ebenso die möglichen Messwerte und ihre Wahrscheinlichkeiten für das Drehimpulsquadrat, und die Drehimpuls z-Komponente (*3 Punkte*)

Lösung:
(a) Wir beobachten zunächst, dass wir die in der Aufgabenstellung gegebene Wellenfunktion als

$$\Psi = C\left[\varphi_{320} + 2\varphi_{322}\right]$$

schreiben können. φ_{320} und φ_{322} sind normiert und orthogonal zueinander, daher finden wir

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi \,|\, \Psi \rangle = |C|^2(1+4) = 5|C|^2$$

Wenn Ψ normiert sein soll, muss also $|C|^2 = 1/5$. In der Aufgabenstellung ist C als reel angegeben. Wir wählen die positive Lösung $C = 1/\sqrt{5}$.
(b) Energie ist repräsentiert durch Hamiltonoperator H, Drehimpulsquadrat durch $\vec{L}^2$, Drehimpuls z-Komponente durch L_3, wobei $\vec{L}$ die Drehimpulsoperatoren bezeichnet. Ψ ist ein Eigenvektor von H und $\vec{L}^2$, da sowohl φ_{320} als auch φ_{322} Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert von H und $\vec{L}^2$ sind:

$$\begin{aligned} H\Psi &= E_3\Psi = -\frac{E_I}{n^2} = -\frac{1}{9}\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \Psi \\ \vec{L}^2\Psi &= 2(2+1)\hbar^2 = 6\hbar^2 \end{aligned}$$

Sei C wie in (a) gewählt. Dann ist also

$$\langle H \rangle_\Psi = -\frac{1}{9}\alpha^2 m_e c^2, \qquad \langle \vec{L}^2 \rangle_\Psi = 6\hbar^2.$$

Weiterhin berechnen wir

$$L_3\Psi = C(0\hbar\varphi_{320} + 2\cdot 2\hbar\varphi_{322}) = 4\hbar C\varphi_{322}.$$

Somit

$$\langle L_3 \rangle_\Psi = \langle \Psi \,|\, L_3\Psi \rangle = 4\hbar C^2(\langle \varphi_{320} \,|\, \varphi_{322} \rangle + 2\langle \varphi_{322} \,|\, \varphi_{322} \rangle) = \frac{8}{5}\hbar.$$

(c) A priori sind die möglichen Messwerte durch die Eigenwerte des jeweiligen Operators gegeben. Die Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch den Erwartungswert des Projektionsoperators auf den jeweiligen Eigenraum. Wir betrachten zunächst H. Mögliche Messwerte sind die Eigenwerte $E_n = -\alpha^2 m_e c^2/(2n^2)$. Allerdings ist Ψ selber ein Eigenvektor von H (zum Eigenwert E_3). Daher sind die Erwartungswerte der Projektoren auf die Energieeigenräume alle Null, ausser dem zum Eigenwert E_3. Dieser hat natürlich den Erwartungswert 1. Es wird bei einer Messung also sicherlich der Wert E_3 gemessen.
Wir betrachten nun den Operator $\vec{L}^2$: Wiederum ist Ψ ein Eigenzustand dieses Operators (zum Eigenwert $6\hbar^2$). Daher wir dieser Wert mit Warhscheinlichkeit 1 gemessen.

Zum Schluss betrachten wir den Operator L_3. Sei ein $m \in \mathbb{Z}$ gegeben. Der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert $m\hbar$ ist gegeben durch

$$P = \sum_{\substack{n,l \text{ kompatibel} \\ \text{mit } m}} |\,\varphi_{nlm}\rangle\langle\,\varphi_{nlm}|$$

und somit

$$\begin{aligned} \text{Wahrscheinlichkeit}(m) &= \langle P\rangle_\Psi \\ &= \sum_{\substack{n,l \text{ kompatibel} \\ \text{mit } m}} |\,\varphi_{nlm}\rangle\langle\,\varphi_{nlm}||\langle\Psi\,|\,\varphi_{nlm}\rangle|^2 \\ &= C^2\delta_{l,2}\delta_{n,3}\delta_{m,0} + 4C^2\delta_{l,2}\delta_{n,3}\delta_{m,2}. \end{aligned}$$

Mit anderen Worten: Es können nur die Messwerte $0\hbar$ und $2\hbar$ auftreten, und die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind $1/5$ und $4/5$.

Aufgabe K3 - Spin im Magnetfeld (6 Punkte)

Wir betrachten ein Elektron (mit Spin 1/2) in einem konstanten Magnetfeld $\vec{B}$. Wir ignorieren die Ortswellenfunktion des Teilchens und setzen daher den Hilbertraum als $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ an. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H = \frac{e}{m_e}\vec{S}\cdot\vec{B} \tag{4}$$

wobei $S_j = \hbar\sigma_j/2$ mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

e die Elementarladung und m_e die Elektronenmasse ist.

(a) Legen Sie die Koordinaten so, dass $\vec{B} = B\vec{e}_z$, d.h. parallel zur z-Achse, und bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von H. (*ein Punkt*)

(b) Berechnen Sie die Eigenwerte und -vektoren der x- und y-Komponente des Spins. Verwenden Sie zur Angabe der Eigenvektoren die Basis, in der S_3 diagonal ist. (*2 Punkte*)

(c) Das Magnetfeld sei wie in (a) parallel zur z-Achse. Das Teilchen befinde sich zur Zeit $t = 0$ im Eigenzustand von S_x mit Eigenwert $\hbar/2$. Berechnen Sie die Zeitentwicklung dieses Zustandes, sowie die Wahrscheinlichkeit, bei einer entsprechenden Messung zur Zeit $t = T$, den Spin parallel zu $\vec{e}_x$ (dem Einheitsvektor in x-Richtung) zu finden. (*3 Punkte*)

Lösung:
(a) Für die gewählten Koordinaten ist $\vec{B} = B\vec{e}_z$ und somit

$$H = \frac{eB}{m_e}S_3.$$

Aus

$$S_3 = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

sieht man sofort, dass die möglichen Eigenwerte von H durch

$$E_\pm := \pm \frac{eB}{2m_e}$$

gegeben sind. Die zugehörigen Eigenvektoren sind z.B.

$$v_+^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad v_-^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(b) Was die Eigenwerte von S_1 und S_2 angeht, so kann man entweder argumentieren, dass diese Operatoren durch Rotationen aus S_3 hervorgehen und diese Rotationen unitär implementiert sind, die Eigenwerte also nicht ändern. Oder man kann wie folgt direkt rechnen:

$$\det(\sigma_1 - \lambda\,\mathbb{I}) = \lambda^2 - 1 \stackrel{!}{=} 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \pm 1$$
$$\det(\sigma_2 - \lambda\,\mathbb{I}) = \lambda^2 - 1 \stackrel{!}{=} 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \pm 1.$$

In jedem Fall erhält man also die möglichen Eigenwerte $\pm\hbar/2$.

Die Eigenvektoren berechnen wir wie folgt: Offensichtlich sind die Pauli-Matrizen schon in der gewünschten Basis angegeben, da σ_3 diagonal ist. Zunächst für σ_1:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad a = b$$

also z.B.

$$v_+^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

normierter Eigenvektor von S_1 zum Eigenwert $\hbar/2$. Genauso

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad a = -b$$

also z.B.

$$v_-^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

normierter Eigenvektor von S_1 zum Eigenwert $-\hbar/2$. Für σ_2 finden wir

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad ia = b$$

also z.B.

$$v_+^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

normierter Eigenvektor von S_2 zum Eigenwert $\hbar/2$. Genauso

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad a = ib$$

also z.B.

$$v_-^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

normierter Eigenvektor von S_2 zum Eigenwert $-\hbar/2$.
(c) Der Zeitentwicklungsoperator ist gegeben durch $U(t) = \exp(-itH/\hbar)$. Es empfiehlt sich also, in einer Eigenbasis von H zu rechnen. Da $H \propto S_3$ ist die Basis aus (b) geeignet. Laut Aufgabenstellung ist das Teilchen zur Zeit $t = 0$ im Zustand

$$v_+^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_+^{(3)} + v_-^{(3)}) \tag{6}$$

wobei wir mit $v_\pm^{(3)}$ die Eigenvektoren von S_3 bezeichnet haben. Es ist also

$$\Psi(t) = U(t)v_+^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-it\omega}v_+^{(3)} + e^{it\omega}v_-^{(3)}\right)$$

mit

$$\omega = \frac{eB}{2m\hbar}.$$

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist

$$\begin{aligned}
P &= \left|\langle \Psi(T)\,|\,v_+^1\rangle\right|^2 \\
&= \frac{1}{4}\left|\langle e^{-iT\omega}v_+^{(3)} + e^{iT\omega}v_-^{(3)}\,|\,v_+^{(3)} + v_-^{(3)}\rangle\right|^2 \\
&= \frac{1}{4}\left|e^{i\omega T} + e^{-i\omega T}\right|^2 \\
&= \frac{1}{4}\left|2\cos(\omega T)\right|^2 \\
&= \cos^2(\omega T).
\end{aligned}$$

Aufgabe K4 - Potentialstufe (5 Punkte)

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m in einer Dimension, in einem Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x \leq 0 \end{cases}, \tag{7}$$

wobei $V_0 \in \mathbb{R}$.

(a) Finden Sie den Hamiltonoperator für das Teilchen, und zeigen Sie, dass die stationäre Schrödingergleichung zur Energie E für eine Wellenfunktion ψ äquivalent zu

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \vartheta(x)\right]\psi(x) = 0 \tag{8}$$

ist, wobei $\vartheta(x) = 2m(E - V(x))/\hbar^2$. (*2 Punkte*)

Im Folgenden suchen eine Lösung, die einer von links einfallenden Welle (mit Einheitsamplitude) entspricht. Dazu setzen wir an:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_> x} & \text{für } x > 0 \\ e^{ik_< x} + Be^{-ik_< x} & \text{für } x < 0 \end{cases} \tag{9}$$

wobei $k_<, k_>$ (mit $k_< > 0$, $k_> > 0$) , A und B noch zu bestimmende Parameter sind.

(b) Nehmen Sie $E > V_0$ und $E > 0$ an und bestimmen Sie $k_<$ und $k_>$ so, dass obiges ψ (8) in den Bereichen $x > 0$ und $x < 0$ löst. (*ein Punkt*)

(c) Bestimmen Sie nun die Parameter A und B, indem Sie Stetigkeit und Differenzierbarkeit von ψ fordern. (*ein Punkt*)

(d) Bestimmen Sie die Reflektionsamplitude der Potentialstufe. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Teilchen an der Potentialstufe reflektiert wird. (*ein Punkt*)

Lösung:
(a) Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + V(X)$$

wobei $P = \hbar/i\, \partial_x$ der Impuls- und $X = x$ der Ortsoperator sind. Die stationäre Schrödingergleichung ist $H\Psi = E\Psi$. Wir schreiben aus und formen um:

$$\begin{aligned} H\Psi &= E\Psi \\ \iff \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar)^2\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\Psi(x) &= E\Psi(x) \\ \iff \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\right)\Psi(x) &= -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) \\ \iff \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2}\right)\Psi(x) &= 0 \\ \iff \left(\frac{d^2}{dx^2} - \vartheta(x)\right)\Psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

wie in der Aufgabenstellung angegeben.
(b) Für $x < 0$ haben wir

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi = (ik_<)^2e^{ik_< x} + B(-ik_<)^2e^{-ik_< x} = -k_<^2\Psi.$$

Um die stationäre Schrödingergleichung zu erfüllen, brauchen wir also

$$k_<^2 \stackrel{!}{=} \vartheta(x) = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

für $x < 0$, also

$$k_< = \pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Wir wählen die positive Lösung (siehe auch Aufgabenstellung), da wir dann eine einlaufende Welle mit Einheitsamplitude haben.
Für $x > 0$ ergibt eine völlig analoge Rechnung

$$k_> = \sqrt{2m(E - V_0)\hbar^2}$$

wobei wir wiederum das (in der Aufgabenstellung geforderte) positive Vorzeichen gewählt haben, da wir keine von rechts einlaufende Welle haben wollen.

(c) Die Forderung von Stetigkeit bei $x = 0$ führt auf $A = 1 + B$. Differenzierbarkeit bei $x = 0$ gibt

$$Aik_> = ik_< - Bik_>.$$

Es folgt

$$\begin{aligned} & ik_> + Bik_> = ik_< - Bik_< \\ \iff \quad & B(k_< + k_>) = k_< - k_> \\ \iff \quad & B = \frac{k_< - k_>}{k_< + k_>}. \end{aligned}$$

Damit finden wir für A:

$$A = 1 + B = 1 + \frac{k_< - k_>}{k_< + k_>} = \frac{2k_<}{k_< + k_>}.$$

(d) Die Reflektionsamplitude (Verhältniss einlaufender zu reflektierter Amplitude) ist einfach B. Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist also

$$P = |B|^2 = \frac{(k_< - k_>)^2}{(k_< + k_>)^2} = 1 - 4\frac{k_< k_>}{(k_< + k_>)^2}.$$