Karlsruher Institut für Technologie
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Hauptklausur zur Modernen Theoretischen Physik I (Lösungen) SS 15

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Andreas Poenicke, Patrik Hlobil **20.07.15**

1. Warm-Up Fragen (5 Punkte)

(a) (1 Punkt) Die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein spinloses Teilchen im Magnetfeld $\mathbf{B}$ mit Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ lautet:

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t) \tag{1}$$

mit

$$\hat{H} = \frac{(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \tag{2}$$

wobei $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$.

(b) (1 Punkt) Es gilt

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l \tag{3}$$

(c) Der Ortserwartungswert ist gegeben durch

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, |\psi(x)|^2 \qquad \text{(0.5 Punkt)} \tag{4}$$

und die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Bereich $x \in [a,b]$ zu finden ist

$$P_{[a,b]} = \int_a^b dx\, |\psi(x)|^2 \qquad \text{(0.5 Punkt)} \tag{5}$$

(d) (1 Punkt) Wir in der Vorlesung gezeigt, gilt für einen nicht-entarteten Zustand

$$\langle\mathbf{L}\rangle = 0 \tag{6}$$

Begründung (nicht notwendig): Für einen nicht-entarteten Zustand gilt $\psi(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$ (bzw. wir können die globale Phase so wählen, siehe Vorlesungsscript), womit automatisch folgt

$$\langle\mathbf{L}\rangle = 0 \tag{7}$$

da

$$\langle\mathbf{L}\rangle = \frac{\hbar}{i}\int d^3r\psi^*(\mathbf{r})(\mathbf{r}\times\nabla)\psi(\mathbf{r}) = i\cdot\underbrace{\frac{-1}{\hbar}\int\int d^3r\psi(\mathbf{r})(\mathbf{r}\times\nabla)\psi(\mathbf{r})}_{\in\mathbb{R}} \stackrel{!}{=} 0 \tag{8}$$

und $\langle\mathbf{L}\rangle$ wegen der Hermitizität von $\mathbf{L}$ reell sein muss.

(e) (1 Punkt) Die Unschärferelation ist allgemein

$$\left\langle\left(\Delta\hat{O}_1\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{O}_2\right)^2\right\rangle \geq \frac{\langle[\hat{O}_1,\hat{O}_2]\rangle^2}{4} \tag{9}$$

2. Spin im Magnetfeld (5 Punkte)

(a) Der Hamiltonoperator ist

$$\hat{H} = \frac{e}{mc}\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} = \mu_B B_z \hat{\sigma}_z \tag{10}$$

mit dem Bohr-Magneton $\mu_B = \frac{\hbar e}{2mc}$. Die Eigenenergien sind offensichtlich

$$E_\pm = \pm \mu_B B_z \tag{11}$$

mit den Eigenzuständen

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{12}$$

(b) Erhalten sind z.B. der Gesamtspin $\mathbf{s}^2$ sowie $\hat{s}_z$. Dies folgt aus dem Ehrenfest Theorem

$$\partial_t \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t = 0 \tag{13}$$

wenn eine Observable mit dem Hamiltonian vertauscht. Dies ist offensichtlich der Fall für

$$[\mathbf{s}^2, \hat{H}] = \frac{e}{mc} B_z [\mathbf{s}^2, \hat{s}_z] = 0 \tag{14}$$

$$[\hat{s}_z, \hat{H}] = \frac{e}{mc} B_z [\hat{s}_z, \hat{s}_z] = 0 \tag{15}$$

(c) Mit dem Ehrenfest Theorem gilt

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \hat{s}_x \rangle_t &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{s}_x, \hat{H}] \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{mc} B_z \langle [\hat{s}_x, \hat{s}_z] \rangle_t \\ &= -\omega_B \langle \hat{s}_y \rangle_t \end{aligned} \tag{16}$$

und

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \hat{s}_y \rangle_t &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{s}_y, \hat{H}] \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{mc} B_z \langle [\hat{s}_y, \hat{s}_z] \rangle_t \\ &= \omega_B \langle \hat{s}_x \rangle_t \end{aligned} \tag{17}$$

mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_B = \frac{eB_z}{mc} \tag{18}$$

(d) Wir können diese beiden Gleichungen entkoppeln, indem wir betrachten

$$\partial_t \langle \hat{s}_x \rangle_t = -\omega_B \langle \hat{s}_y \rangle_t \tag{19}$$

$$\partial_t^2 \langle \hat{s}_x \rangle_t = -\omega_B \partial_t \langle \hat{s}_y \rangle_t \overset{(17)}{=} -\omega_B^2 \langle \hat{s}_x \rangle_t \tag{20}$$

Insgesamt finden wir somit

$$(\partial_t^2 + \omega_B^2) \langle \hat{s}_{x/y} \rangle_t = 0 \tag{21}$$

Die allgemeinen Lösungen sind offensichtlich

$$\langle \hat{s}_{x/y} \rangle_t = a_{x/y} \cos(\omega_B t) + b_{x/y} \sin(\omega_B t) \tag{22}$$

Mit den Anfangsbedingungen $\langle \hat{s}_x \rangle_{t=0} = \hbar/2$ und $\langle \hat{s}_y \rangle_{t=0} = 0$, folgt direkt über (16) und (17), dass $\frac{d}{dt} \langle \hat{s}_x \rangle_{t=0} = -\omega_B \langle \hat{s}_y \rangle_{t=0} = 0$ sowie $\frac{d}{dt} \langle \hat{s}_x \rangle_{t=0} = 0$ und $\frac{d}{dt} \langle \hat{s}_y \rangle_{t=0} = \omega_B \langle \hat{s}_x \rangle_{t=0} = \omega_B \frac{\hbar}{2}$. Damit bekommen wir insgesamt

$$\langle \hat{s}_x \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega_B t) \tag{23}$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega_B t) \tag{24}$$

(e) Offensichtlich oszillieren die $\langle \hat{s}_x \rangle_t$ und $\langle \hat{s}_y \rangle_t$ Erwartungswerte, sodass der Spin eine Kreisbewegung in der xy-Ebene vollführt . Der Spin präzisiert somit um die z-Achse.

3. Störungen des harmonischer Oszillator (5 Punkte)

(a) Wir betrachten die lineare Störung $\hat{V}_1 = \alpha \cdot \hat{x}$:

- Wir nutzen $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\hat{a}+\hat{a}^\dagger]$ und berechnen die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie

$$E_n^{(1)} = \langle\, n \mid \hat{V}_1 \mid n \rangle = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\, n \mid \hat{a} + \hat{a}^\dagger \mid n \rangle = 0 \tag{25}$$

Für die zweiter Ordnung Störungstheorie benötigen wir das Matrixelement

$$V_{nm} = \langle\, n \mid \hat{V}_1 \mid m \rangle = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\, n \mid \hat{a} + \hat{a}^\dagger \mid m \rangle = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{m}\delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1}\delta_{m,n-1}\right] \tag{26}$$

und bekommen damit

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{\hbar\alpha^2}{2m\omega}\sum_{m\neq n}\frac{m\delta_{m,n+1} + (m+1)\delta_{m,n-1}}{\hbar\omega(n-m)} \\ &= \frac{\hbar\alpha^2}{2m\omega}\left[\frac{n+1}{\hbar\omega(n-(n+1))} + \frac{n}{\hbar\omega(n-(n-1))}\right] = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \end{aligned} \tag{27}$$

- Wir bestimmen nun die exakten Eigenenergien. Betrachte dazu den Gesamthamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \alpha\hat{x} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{x}^2 + 2\frac{\alpha}{m\omega^2}\hat{x}\right) \tag{28}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\Bigg(\underbrace{\hat{x}^2 + 2\frac{\alpha}{m\omega^2}\hat{x} + \frac{\alpha^2}{m^2\omega^4}}_{(\hat{x}+\frac{\alpha}{m\omega})^2} - \frac{\alpha^2}{m^2\omega^4}\Bigg) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \end{aligned} \tag{29}$$

Wir führen nun einen neuen Ortsoperator $\hat{x}' = \hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2}$ ein, was einfach eine Verschiebung des Ursprungs des Potentials entspricht. Es gilt immer noch $[\hat{x}', \hat{p}] = i\hbar$, sodass die ganze Algebra dieselbe ist. Wir haben dann:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}'^2 - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} = \hbar\omega(\hat{a}'^\dagger\hat{a}' + 1/2) - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \tag{30}$$

und damit die exakten Eigenenergien

$$E_n = \underbrace{\hbar\omega(n+1/2)}_{E_n^{(0)}} - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \tag{31}$$

- Wir finden im Vergleich, dass die Störungstheorie bis zweiter Ordnung

$$E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \tag{32}$$

uns bereits die exakte Energiekorrektur gibt:

$$E_n - E_n^{(0)} = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \tag{33}$$

(b) Jetzt betrachten wir die quadratische Störung $\hat{V}_2 = \beta \cdot \hat{x}^2$:

- Die erste Ordnung Störungstheorie gibt uns die Energiekorrektur

$$
\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle\, n \mid \hat{V}_2 \mid n \rangle = \beta \frac{\hbar}{2m\omega} \langle\, n \mid (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \mid n \rangle = \\
&= \beta \frac{\hbar}{2m\omega} \langle\, n \mid \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 \mid n \rangle = \beta \frac{\hbar}{2m\omega} \langle\, n \mid \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} \mid n \rangle \\
&= \frac{\hbar\beta}{m\omega} (n + 1/2)
\end{aligned} \tag{34}
$$

- Betrachte nun den Gesamthamiltonoperator

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 + \beta \cdot \hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\left(\omega^2 + \frac{2\beta}{m}\right)}{2} \hat{x}^2 \\
&= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega'^2}{2} \hat{x}^2
\end{aligned} \tag{35}
$$

mit $\omega' = \sqrt{\omega^2 + \frac{2\beta}{m}}$. Die exakten Eigenenergien sind offensichtlich gerade

$$
E_n = \hbar\omega' (n + 1/2) = \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{2\beta}{m}} (n + 1/2) \tag{36}
$$

Wenn wir nun das exakte E_n für kleine β entwickeln

$$
E_n = \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{2\beta}{m}} (n + 1/2) \approx \underbrace{\hbar\omega(n + 1/2)}_{E_n^{(0)}} + \underbrace{\frac{\hbar\beta}{m\omega}(n + 1/2)}_{E_n^{(1)}} + \mathcal{O}(\beta) \tag{37}
$$

so finden wir gerade wieder die Energiekorrektur erster Ordnung wieder.

4. Eindimensionales attraktives δ-Potential (5 Punkte)

Betrachtet wird ein eindimensionales System mit dem Potential

$$V(x) = -V_0\delta(x) \qquad V_0 > 0. \tag{38}$$

(a) (1 Punkt) Anschlussbedingungen für $\psi(x)$ und $\partial_x\psi(x)$ bei $x = 0$:
Es muss weiter die Stetigkeit der Wellenfunktion gegeben sein

$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi(+\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0}\psi(-\epsilon). \tag{39}$$

Die Ableitung hingegen hat bei $x = 0$ einen Sprung

$$\lim_{\epsilon\to 0^+}\psi'(\varepsilon) - \lim_{\epsilon\to 0^+}\psi'(-\epsilon) = \frac{-2mV_0}{\hbar^2}\psi(0). \tag{40}$$

(b) (2 Punkte) $E < 0$:
Für $E < 0$, sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung die Exponentialfunktionen $e^{\pm\kappa x}$ mit $\hbar\kappa = \sqrt{2m(-E)}$. Die Quadratintegrabilität wird nur von den für $|x| > 0$ exponentiell abklingenden Lösungen erfüllt. Damit ist

$$\psi(x) = \begin{cases} A\exp(\kappa x) & x < 0 \\ B\exp(-\kappa x) & x \geq 0 \end{cases} \qquad \text{mit} \qquad \hbar\kappa = \sqrt{2m(-E)}.$$

Aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = 0$ gilt $A = B$.
Die Normierung der Wellenfunktion liefert $A = \sqrt{\kappa}$ (wird aber zur Bestimmung der Energie des Bindungszustands nicht benötigt).
Die Energie des gebundenen Zustands erhalten wir über die Randbedingung für $\partial_x\psi$

$$\lim_{\epsilon\to 0^+}\psi'(\varepsilon) - \lim_{\epsilon\to 0^+}\psi'(-\epsilon) = -\kappa A - \kappa A = -\frac{2mv_0}{\hbar^2}A \qquad \Rightarrow \kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2}, \tag{41}$$

und somit

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \tag{42}$$

(c) (2 Punkte) $E > 0$:
Eine von links einlaufende ebene Welle Ae^{ikx} wird teils reflektiert, teils transmittiert. Der Ansatz für die Welllenfunktion ist damit

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad \hbar k = \sqrt{2mE} \tag{43}$$

Die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = 0$ fordert

$$A + B = C \tag{44}$$

die Ableitung der Wellenfunktion hat hingegen eine Sprung und führt zu

$$ik(A - B) = ikC + \frac{2mV_0}{\hbar^2}C \tag{45}$$

und es folgt

$$A = \left(1 - i\frac{mV_0}{k\hbar^2}\right)C \quad \text{und} \quad B = i\frac{mV_0}{k\hbar^2}C. \tag{46}$$

Der Transmissionskoeffizient ist damit gegeben durch

$$T = \left|\frac{j_{trans}}{j_{ein}}\right| = \frac{k}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{mV_0}{k\hbar^2}\right)^2}. \tag{47}$$

der Reflexionskoeffizienten durch

$$R = \left|\frac{j_{refl}}{j_{ein}}\right| = \frac{k}{k}\left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\left(\frac{mV_0}{k\hbar^2}\right)^2}{1 + \left(\frac{mV_0}{k\hbar^2}\right)^2}. \tag{48}$$

Offensichtlich gilt $T + R = 1$.