

## 1. Klausur zur Modernen Theoretischen Physik I - Lösung SS 17

PROF. DR. JÖRG SCHMALIAN

MATTHIAS HECKER, MARKUS KLUG

31.07.2017

## 1. Warm-Up (25 Punkte)

- (a) (3 Punkte) Der Kommutator zwischen Orts- und Impulsoperator ist  $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ . Daraus folgt die Heisenbergsche Unschärferelation  $\langle\Delta\hat{x}\rangle\langle\Delta\hat{p}\rangle \geq \frac{\hbar}{2}$  für Ort und Impuls. Beide sind also nicht gleichzeitig scharf messbar.
- (b) (4 Punkte) Für hermitesche Operatoren gilt  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ . Es sei weiterhin  $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$  mit Eigenwert  $a$  zu Zustand  $|\psi\rangle$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} a - a^* &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle - \left(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right)^* \\ &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

Somit ist  $a = a^*$ , welches nur für  $a \in \mathbb{R}$  erfüllt ist.

- (c) (3 Punkte) Der deBroglie-Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz lautet  $E = \hbar\omega$ , der zwischen Impuls- und Wellenvektor  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . Somit folgt für ein nicht-relativistisches Teilchen die Dispersion

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- (d) (5 Punkte) Mit dem Ehrenfest-Theorem folgt

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle = -\frac{\epsilon}{\hbar} \langle \hat{A} \rangle$$

Diese lineare Differentialgleichung 1. Ordnung lässt sich lösen mit

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = A_0 e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} t}$$

wobei die angegebene Anfangsbedingung  $\langle \hat{A} \rangle(t=0) = A_0$  verwendet wurde.

- (e) (4 Punkte) Eine physikalische Observable  $\hat{B}$  vertausche mit dem Hamiltonoperator  $[\hat{H}, \hat{B}] = 0$ . Daraus folgt unter anderem:
- Es lässt sich eine gemeinsame Eigenbasis von  $\hat{H}$  und  $\hat{B}$  konstruieren.
  - $\langle \hat{B} \rangle(t) = \text{konst.}$  ist eine Erhaltungsgröße.
  - Die Energie und die physikalische Größe assoziiert mit  $\hat{B}$  lassen sich gleichzeitig messen.
  - Das System beschrieben durch  $\hat{H}$  ist invariant unter einer Transformation, die durch  $\hat{B}$  generiert wird. Als Beispiel ist hier der Impulsoperator  $\hat{\mathbf{p}}$  und der Translationsoperator  $\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}{\hbar}}$  genannt.
  - ...
- (f) (6 Punkte)

- i) Ein magnetisches Feld koppelt an den elektronischen Spin und den Bahndrehimpuls des Elektrons. Das führt zu einer Aufspaltung der Spektrallinien in Abhängigkeit der Spin- und Bahndrehimpulsquantenzahlen, welches unter dem Namen Zeeman-Effekt bekannt ist. Der Stör-Hamilton-Operator vertauscht hier nicht mit dem Bahndrehimpuls und dem Spinoperator, im Gegensatz zu  $\hat{H}_0$ . Nimmt man zum Beispiel  $\vec{B} = B\hat{e}_z$  an, so gilt  $[\hat{H}', \hat{L}_{x,y}] \neq 0$  und  $[\hat{H}', \hat{S}_{x,y}] \neq 0$ .

- ii) Der Term  $\gamma \hat{r}^{-1}$  sorgt für eine Renormierung der Ladung  $e^2 \rightarrow e'^2 = e^2 - \gamma$ , verändert aber nicht die Struktur des Hamiltonoperators. Somit wird die Entartung der Zustände nicht aufgehoben.
- iii) Der Störterm koppelt die Größe  $\lambda$  linear an die x-Komponente des Ortsoperators, welches identisch zum Anlegen eines externen elektrischen Feldes in x-Richtung ist, wobei  $\lambda = qE$ . Daraus folgt eine Aufspaltung der Spektrallinien für  $n \geq 2$ , welches als linearer Stark-Effekt bekannt ist. Genauso lässt sich sagen, dass der Stör-Hamilton-Operator nicht mehr mit dem Drehimpuls vertauscht,  $[\hat{H}', \hat{L}_{y,z}] \neq 0$  und dass dadurch die Entartung aufgehoben wird.

### 1. Halb-unendlicher Potentialtopf (25 Punkte)

- (a) (9 Punkte) Im Falle gebundener Zustände fällt die Wellenfunktion außerhalb der Potentialmulde exponentiell ab. Das beschränkt mögliche Bindungsenergien auf das Intervall  $-V_0 < E < 0$ . Für die Wellenfunktion wird der Ansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ A \cos kx + B \sin kx & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ C e^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases}$$

mit den Parametern  $A, B, C$  und  $k, \kappa$  gemacht. Eingesetzt in den stationären Hamiltonoperator in einer Dimension

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

ergeben sich die Wellenzahlen in den Intervallen in denen die Wellenfunktion nicht verschwindet zu

$$\begin{cases} k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - |E|)} & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|} & \text{für } x > a \end{cases}$$

- (b) (9 Punkte) Die Parameter  $A, B, C$  ergeben sich aus der Forderung nach Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer ersten Ableitung an der Intervallgrenz  $x = a$ , und Stetigkeit der Wellenfunktion bei  $x = 0$ .

Bei  $x = 0$  muss auf Grund des unendlichen Potentialwalls die Wellenfunktion verschwinden  $\psi(x) = 0$ , woraus  $A = 0$  folgt. Des Weiteren kann auf Grund der Unstetigkeit des Potentials an diesem Punkt keine Aussage über die Ableitung der Wellenfunktion gemacht werden.

Bei  $x = a$  erhält man

$$\psi(a) = B \sin ka = C e^{-\kappa a}$$

und

$$\psi'(a) = kB \cos ka = -\kappa C e^{-\kappa a}$$

Daraus folgt die Bedingung an  $k$  und  $\kappa$

$$\tan ka = -\frac{k}{\kappa}$$

oder im Falle von dimensionslosen Wellenzahlen  $\xi \equiv ka$  und  $\eta \equiv \kappa a$

$$\tan \xi = -\frac{\xi}{\eta}$$

Des Weiteren müssen  $\eta$  und  $\xi$  die Bedingung

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 \equiv \tilde{V}_0$$

erfüllen. Damit muss  $\xi = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$  und damit die Bindungsenergien  $E$  die Bedingung

$$\tan \xi = -\frac{\xi}{\sqrt{\tilde{V}_0 - \xi^2}} \quad (1)$$

erfüllen. Diese Gleichung kann grafisch gelöst werden. Je nach Potentialstärke gibt es eine bestimmte Anzahl von Lösungen  $\{\xi_i\}$ . Die Bindungsenergien sind dementsprechend  $E_i = V_0 - \frac{\hbar^2 \xi_i^2}{2ma^2}$ . Eine Lösung für  $\tilde{V}_0 = \pi^2$  ist in Abb. 1 dargestellt.

- (c) (7 Punkte) Offensichtlich hat Gl. 1 keine Lösung, wenn  $\tilde{V}_0 < (\frac{\pi}{2})^2$ , da hier die linke Seite der Gleichung vor der rechten Seite divergiert. Aus dieser Bedingung folgt

$$\tilde{V}_0 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2,$$

das es also keinen gebundenen Zustand für die Potentialstärke

$$V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

geben kann.

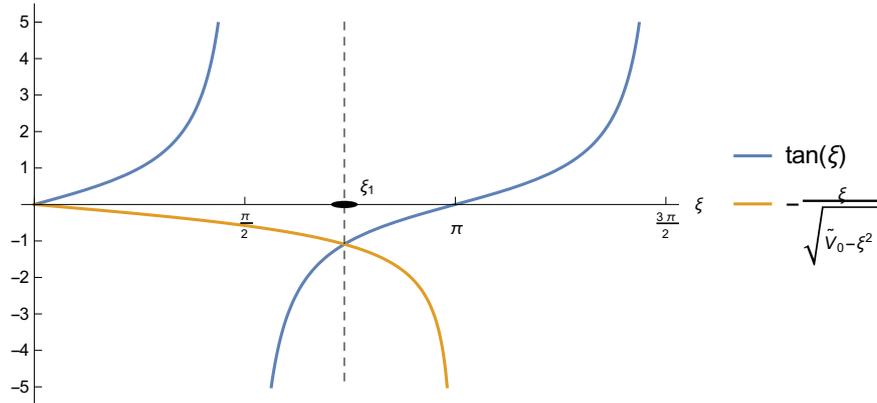


Abbildung 1: Grafische Lösung für  $\tilde{V}_0 = \pi^2$ . Die entsprechende Bindungsenergie ist durch  $\xi_1 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - |E_1|)}$  gegeben.

## 2. Harmonischer Oszillator mit Delta-Störung (25 Punkte)

- (a) (7 Punkte) Die Matrixelemente berechnen sich wie folgt (die Eigenfunktionen des HO sind reell.)

$$\begin{aligned} \langle l | \hat{H}' | n \rangle &= 8\gamma \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle l | \delta(\hat{x}) | x \rangle \langle x | n \rangle = 8\gamma \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\langle l | x \rangle}_{\psi_l^*(x)} \delta(x) \underbrace{\langle x | n \rangle}_{\psi_n(x)} \\ &= 8\gamma \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \psi_l(0) \psi_n(0) = 8\gamma \frac{1}{\sqrt{2^n n! 2^l l!}} H_l(0) H_n(0). \end{aligned}$$

Anhand der Gleichung  $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$  erkennt man, dass Hermite-Polynome mit ungeradem  $n$  auch asymmetrische Funktionen sind,  $H_{2k+1}(-x) = -H_{2k+1}(x)$ . Insbesondere gilt damit  $H_n(0) = 0$  für  $n$  ungerade. Für gerades  $n$  ist eine kompakte Form

angegeben, und man kann weiter vereinfachen (sei  $\theta_{n,l} = \begin{cases} 1, & n \text{ und } l \text{ gerade} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$ )

$$\begin{aligned} \langle l | \hat{H}' | n \rangle &= 8\gamma \frac{1}{\sqrt{2^n n! 2^l l!}} (-1)^{\frac{l}{2}} \frac{l!}{(\frac{l}{2})!} (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{(\frac{n}{2})!} \theta_{n,l} \\ &= 8\gamma \frac{(-1)^{\frac{n+l}{2}} \sqrt{n! l!}}{2^{\frac{n+l}{2}} (\frac{n}{2})! (\frac{l}{2})!} \theta_{n,l}. \end{aligned} \quad (2)$$

- (b) (6 Punkte) Für die Energiekorrekturen müssen lediglich die Matrixelemente (2) eingesetzt werden. Man findet

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n | \hat{H}' | n \rangle = E_n^{(0)} + 8\gamma \frac{n!}{2^n ((\frac{n}{2})!)^2} \begin{cases} 1, & n \text{ gerade} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Offenbar werden nur gerade Zustände, d.h. Zustände mit endlicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei  $x = 0$  von dem Delta-Peak beeinflusst.

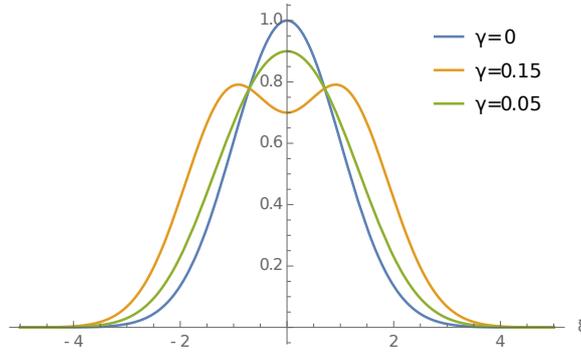


Abbildung 2: Verlauf von  $\tilde{\psi}_0(\xi) \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{4}}$ . Erwartet waren die blaue (ungestörte) und die orangene Kurve.

(c) (6 Punkte)

Für die Zustandskorrekturen findet man (Wie angegeben werden nur Beiträge mit  $\Delta n \leq 2$  berücksichtigt.)

$$\begin{aligned}
 |\tilde{0}\rangle &= |0\rangle + \sum_{l \neq 0} \frac{\langle l | \hat{H}' | 0 \rangle}{E_0^{(0)} - E_l^{(0)}} |l\rangle \\
 &= |0\rangle + \frac{\langle 2 | \hat{H}' | 0 \rangle}{E_0^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle = |0\rangle + \frac{-8\gamma \frac{\sqrt{2}}{2}}{-2\hbar\omega} |2\rangle \\
 &= |0\rangle + 2\sqrt{2} \frac{\gamma}{\hbar\omega} |2\rangle \\
 |\tilde{1}\rangle &= |1\rangle + \sum_{l \neq 1} \frac{\langle l | \hat{H}' | 1 \rangle}{E_1^{(0)} - E_l^{(0)}} |l\rangle = |1\rangle .
 \end{aligned}$$

(d) (6 Punkte) In der Ortsdarstellung lautet die gestörte Grundzustands-Wellenfunktion damit

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}_0(x) &= \langle x | \tilde{0} \rangle = \psi_0(x) + 2\sqrt{2} \frac{\gamma}{\hbar\omega} \psi_2(x) \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \left[ H_0\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) + \frac{2\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \frac{\gamma}{\hbar\omega} H_2\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \right] \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \left[ 1 + \frac{\gamma}{\hbar\omega} \left(4\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 2\right) \right] \\
 \tilde{\psi}_0(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \left[ 1 + \frac{\gamma}{\hbar\omega} (4\xi^2 - 2) \right] . \tag{3}
 \end{aligned}$$

In der letzten Gleichung wurde  $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$  gesetzt. Die Skizze zu (3) ist in Abbildung (2) zu finden. Wichtig sind zwei Aspekte: Bei  $x = 0$  nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ab. Dadurch wird die Wellenfunktion an sich breiter um die Normierung weiterhin einzuhalten. Desweiteren ergeben sich durch die Forderung der positiven Krümmung bei  $x = 0$  zwangsläufig zwei neue Maxima.

### 3. Spin im Magnetfeld (25 Punkte)

(a) (10 Punkte) Der Hamiltonmatrix im  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ -Zustandsraum lautet

$$H = \frac{\mu B}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 - i \\ 1 + i & 0 \end{pmatrix}$$

Die Eigenenergien ergeben sich aus der charakteristischen Gleichung

$$\det [H - E\mathbb{1}] = E^2 - \mu^2 B^2 = 0$$

mit der  $2 \times 2$  Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$ . Somit sind die Eigenenergien gegeben durch

$$\begin{aligned} E_+ &= \mu B \\ E_- &= -\mu B \end{aligned}$$

Für die Eigenzustände muss gelten

$$(H - E_{\pm} \mathbb{1}) \mathbf{v}_{\pm} = B\mu \begin{pmatrix} \mp 1 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} & \mp 1 \end{pmatrix} \mathbf{v}_{\pm} = 0$$

wobei  $\mathbf{v}_{\pm}$  die Eigenzustände zu den Eigenenergien  $E_{\pm}$  sind. Man findet

$$\mathbf{v}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

wobei auf eine korrekt Normierung der Zustände geachtet wurden

$$\mathbf{v}_+^* \cdot \mathbf{v}_+ = \mathbf{v}_-^* \cdot \mathbf{v}_- = 1$$

Ausgedrückt in der BraKet-Schreibweise sind die Eigenzustände zu den Eigenenergien  $E_{\pm}$  gegeben durch

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \right) \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle - \frac{1+i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \right) \end{aligned}$$

- (b) (8 Punkte) Die Zeitentwicklung der Zustände lässt sich am einfachsten im diagonalen Zustandsraum ausdrücken. Hier ist

$$\begin{aligned} |\psi_+(t)\rangle &= \hat{U}(t)|+\rangle = e^{-\frac{i\mu B}{\hbar}t}|+\rangle \\ |\psi_-(t)\rangle &= \hat{U}(t)|-\rangle = e^{+\frac{i\mu B}{\hbar}t}|-\rangle \end{aligned}$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t}$ . Damit ist die Zeitentwicklung des Zustandes  $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$  gegeben durch

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\uparrow\rangle \\ &= \hat{U} \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-\frac{i\mu B}{\hbar}t}|+\rangle + e^{+\frac{i\mu B}{\hbar}t}|-\rangle \right) \\ &= \cos\left(\frac{\mu B}{\hbar}t\right)|\uparrow\rangle - \frac{i-1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{\mu B}{\hbar}t\right)|\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

*Alternativ* kann man auch den Zeitentwicklungsoperator auf den Anfangszustand anwenden. Dabei lautet der Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \exp\left(-i \underbrace{\frac{\mu}{\hbar}\vec{B}}_{\vec{\omega}} \cdot \vec{\sigma}t\right) \\ &= \mathbb{1} \cos(|\vec{\omega}|t) - i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega}}{|\vec{\omega}|} \sin(|\vec{\omega}|t) \\ &= \begin{pmatrix} \cos(|\vec{\omega}|t) & -\frac{i+1}{\sqrt{2}} \sin(|\vec{\omega}|t) \\ -\frac{i-1}{\sqrt{2}} \sin(|\vec{\omega}|t) & \cos(|\vec{\omega}|t) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

mit  $|\vec{\omega}| = \frac{\mu B}{\hbar}$ . Damit lässt sich ebenfalls der zeitentwickelte Zustand bestimmen

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \\ &= \begin{pmatrix} \cos(|\vec{\omega}|t) \\ -\frac{i-1}{\sqrt{2}} \sin(|\vec{\omega}|t) \end{pmatrix} = \cos(|\vec{\omega}|t)|\uparrow\rangle - \frac{i-1}{\sqrt{2}} \sin(|\vec{\omega}|t)|\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

- (c) (7 Punkte) Die Wahrscheinlichkeit  $P_+(t)$  den Eigenwert  $+1$  zum Zeitpunkt  $t$  zu messen ergibt sich aus dem Überlapp des Zustands mit diesem Eigenwert  $|\uparrow\rangle$  und dem Zustand  $|\psi(t)\rangle$ . Die Wahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
 P_+(t) &= |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 \\
 &= \left| \langle\uparrow| \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-\frac{i\mu B}{\hbar}t} |\uparrow\rangle + e^{+\frac{i\mu B}{\hbar}t} |\downarrow\rangle \right) \right|^2 \\
 &= \frac{1}{2} \left| \langle\uparrow| \left( \frac{e^{-\frac{i\mu B}{\hbar}t}}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \right) + \frac{e^{+\frac{i\mu B}{\hbar}t}}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle - \frac{1+i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \right) \right) \right|^2 \\
 &= \frac{1}{4} \left| \left( e^{-\frac{i\mu B}{\hbar}t} + e^{+\frac{i\mu B}{\hbar}t} \right) \langle\uparrow|\uparrow\rangle \right|^2 \\
 &= \cos^2\left(\frac{\mu B}{\hbar}t\right)
 \end{aligned}$$