

Moderne Theoretische Physik I — Quantenmechanik I

V: Prof. Dr. M.M. Mühlleitner, Ü: Dr. S. Liebler/PD Dr. S. Gieseke

Klausur Nr. 1, 31.7.2020 — Lösungsvorschlag

Verwendete Formeln der Formelsammlung

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des harmonischen Oszillators:

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

Orts- und Impulsoperator des harmonischen Oszillators:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger).$$

Leiteroperatoren auf Drehimpulseigenzustände:

$$J_\pm |j m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j m \pm 1\rangle.$$

Kugelflächenfunktionen:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta) e^{\pm i\phi}$$

Aufgabe 1: Teilchen in einer Dimension**[20]**

Ein Teilchen in einer Dimension x und einem Potential $V(x)$ habe orthonormierte Ortswellenfunktionen $\psi_n(x)$ zu Energieeigenwerten E_n , so dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^*(x) \psi_j(x) = \delta_{ij} .$$

Zur Zeit $t = 0$ lautet die Wellenfunktion

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x)) .$$

Berechnen Sie den Ortserwartungswert $\langle x \rangle(t)$ zu beliebigen Zeiten $t > 0$.

Da wir Energieeigenzustände gegeben haben, können wir die Wellenfunktion zu beliebigen Zeiten angeben, denn in einem Problem mit gegebenem zeitunabhängigen Potential ist die Zeitentwicklung durch die Energieeigenwerte gegeben. Mit $\hbar\omega_{1,2} = E_{1,2}$ bekommen wir

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2} \left(\psi_1(x) e^{-i\omega_1 t} + \psi_2(x) e^{-i\omega_2 t} \right) .$$

Die Wellenfunktionen sind Energieeigenzustände in der Ortsdarstellung, in der der Ortserwartungswert durch die Integration

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= \langle \Psi(x, t) | x | \Psi(x, t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int dx \left(\psi_1^*(x) e^{i\omega_1 t} + \psi_2^*(x) e^{i\omega_2 t} \right) x \left(\psi_1(x) e^{-i\omega_1 t} + \psi_2(x) e^{-i\omega_2 t} \right) \end{aligned}$$

bestimmt wird. In einer Dimension können wir die Wellenfunktion immer reell wählen, so dass $\psi_i(x) = \psi_i^*(x)$ und damit

$$\langle \Psi(x, t) | x | \Psi(x, t) \rangle = \frac{1}{2} \int dx x \left(\psi_1^2(x) \psi_2^2(x) + \psi_1(x) \psi_2(x) e^{i\omega_{21} t} + \psi_1(x) \psi_2(x) e^{-i\omega_{21} t} \right) ,$$

wobei $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$. Oder

$$\langle x \rangle(t) = A + B \cos \omega_{21} t ,$$

mit

$$A = \frac{1}{2} \int dx x (\psi_1^2(x) + \psi_2^2(x)) , \quad B = \int dx x \psi_1(x) \psi_2(x) .$$

Der Erwartungswert oszilliert mit der Frequenz $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ um den Mittelwert der Ortserwartungswerte der beiden Eigenzustände. Für entartete Zustände verschwindet die Oszillation und

$$\langle x \rangle(t) = A + B = \int dx x \left| \frac{1}{2} (\psi_1(x) + \psi_2(x)) \right|^2 = \int dx x |\Psi(x, 0)|^2 .$$

Aufgabe 2: Einfacher Harmonischer Oszillator**[5+10+10=25]**

Ein einfacher harmonischer Oszillator in einer Raumdimension x wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

beschrieben. Zur Zeit $t = 0$ befinde sich der Oszillator im Zustand

$$|\psi(0)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|2\rangle.$$

Darin sind $|1\rangle, |2\rangle$ Eigenzustände des Besetzungszahloperators $N = a^\dagger a$ zu den Eigenwerten $n = 1, 2$.

(a) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle E \rangle$ der Energie des Oszillators bei $t = 0$.

Der Zustand ist gegeben, wir kürzen die Koeffizienten ab,

$$|\psi(0)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\beta|2\rangle \equiv \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle,$$

so dass wir den Erwartungswert als

$$\langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle = (\alpha^* \langle 1 | + \beta^* \langle 2 |) H (\alpha | 1 \rangle + \beta | 2 \rangle)$$

schreiben können. Die (orthonormierten) Zustände in der Besetzungszahldarstellung sind zugleich Energieeigenzustände, so dass

$$H | 1 \rangle = \hbar\omega(1 + \frac{1}{2}) | 1 \rangle, \quad H | 2 \rangle = \hbar\omega(2 + \frac{1}{2}) | 2 \rangle,$$

sowie $\langle 1 | 2 \rangle = \langle 2 | 1 \rangle = 0, \langle 1 | 1 \rangle = \langle 2 | 2 \rangle = 1$ und damit

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle &= (\alpha^* \langle 1 | + \beta^* \langle 2 |) \frac{\hbar\omega}{2} (3\alpha | 1 \rangle + 5\beta | 2 \rangle) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (3\alpha\alpha^* + 5\beta\beta^*) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(3 \cdot \frac{2}{3} + 5 \cdot \frac{1}{3} \right) = \frac{11}{6} \hbar\omega. \end{aligned}$$

(b) Berechnen Sie, die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich der Oszillator zu einem beliebigen Zeitpunkt $t > 0$ erneut im Zustand $|\psi(0)\rangle$ befindet.

Die Zeitentwicklung des Zustandes $|\psi(0)\rangle$ ist klar, weil er durch Energieeigenzustände gegeben ist, deren Energieeigenwerte wir kennen,

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\frac{3\omega}{2}t} |1\rangle + \beta e^{-i\frac{5\omega}{2}t} |2\rangle = e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \left(\alpha |1\rangle + \beta e^{-i\omega t} |2\rangle \right) \quad (1)$$

Multiplikation mit $\langle \psi(0) |$ ergibt

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 e^{-i\omega t} \right).$$

Die Wahrscheinlichkeit $W_0(t)$ den Zustand $|\psi(0)\rangle$ zu messen ist dann

$$\begin{aligned} W_0(t) &= |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 e^{-i\omega t} \right) \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 e^{i\omega t} \right) \\ &= |\alpha|^4 + |\beta|^4 + 2|\alpha|^2 |\beta|^2 \cos \omega t, \end{aligned}$$

also

$$W_0(t) = \frac{5}{9} + \frac{4}{9} \cos \omega t.$$

(c) Wie lautet der Erwartungswert $\langle x \rangle(t)$ der Ortsmessung zu beliebigen Zeiten $t > 0$?

Zur Berechnung von

$$\langle x \rangle(t) = \langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle$$

verwenden wir wieder die Zeitentwicklung (1), die globale Phase fällt sofort heraus, so dass

$$\langle x \rangle(t) = \left(\alpha^* \langle 1 | + \beta^* e^{i\omega t} \langle 2 | \right) x \left(\alpha | 1 \rangle + \beta e^{-i\omega t} | 2 \rangle \right)$$

Wir kennen den Ortsoperator in der Besetzungszahldarstellung,

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) ,$$

und die Wirkung der Leiteroperatoren auf Besetzungszahlzustände $|n\rangle$,

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle , \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\alpha^* \langle 1 | + \beta^* e^{i\omega t} \langle 2 | \right) (a + a^\dagger) \left(\alpha | 1 \rangle + \beta e^{-i\omega t} | 2 \rangle \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\alpha^* \langle 1 | + \beta^* e^{i\omega t} \langle 2 | \right) \left(\alpha\sqrt{2} | 2 \rangle + \beta e^{-i\omega t} \sqrt{2} | 1 \rangle + \dots \right) . \end{aligned}$$

Beiträge mit den Zuständen $|0\rangle$ und $|3\rangle$ haben wir weggelassen, da sie ohnehin aufgrund der Orthogonalität wegfallen. Es bleibt

$$\langle x \rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{2} \left(\alpha\beta^* e^{i\omega t} + \alpha^* \beta e^{-i\omega t} \right)$$

und schließlich, da α, β reell,

$$\langle x \rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2\sqrt{2}\alpha\beta \cos \omega t = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos \omega t .$$

Der Ortserwartungswert oszilliert mit der Frequenz ω um die Ruhelage.

Aufgabe 3: Harmonischer Oszillator im Kraftfeld**[5+10+10=25]**

Der Oszillator aus Aufgabe 2 befinde sich nun in einem homogenen Kraftfeld der Kraft k , so dass der Hamiltonoperator nun

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - kX$$

lautet.

Das heißt, dass im klassischen Fall eine konstante Kraft k wirkt, in positiver x -Richtung, falls $k > 0$ und umgekehrt. Wir erwarten, dass der Oszillator damit eine neue Ruhelage x_0 hat, wenn $V(x_0) = 0$, also $k = m\omega^2 x_0$, um die er bei Auslenkung oszilliert.

- (a) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator nun mit Hilfe der durch eine konstante Zahl c modifizierten Leiteroperatoren

$$b = a + c, \quad b^\dagger = a^\dagger + c^*$$

diagonalisiert werden kann. Bestimmen Sie c .

In Leiteroperatoren lautet der Hamiltonoperator

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger).$$

Ausgedrückt durch die „verschobenen“ Leiteroperatoren b, b^\dagger also

$$H = \hbar\omega \left((b^\dagger - c^*)(b - c) + \frac{1}{2} \right) - k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (b + b^\dagger - (c + c^*)).$$

Wir sortieren nach Potenzen von b, b^\dagger und erhalten

$$\begin{aligned} H = \hbar\omega \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} + cc^* \right) - k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c + c^*) \\ - b \left(k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} + \hbar\omega c^* \right) - b^\dagger \left(k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} + \hbar\omega c \right). \end{aligned}$$

Wir sehen, dass die linearen Terme in b, b^\dagger durch die Wahl

$$c = c^* = -\frac{k}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

verschwinden und erhalten

$$H = \hbar\omega \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} + c^2 \right) - 2\hbar\omega c^2 = \hbar\omega \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} - c^2 \right).$$

Dieser Hamiltonoperator wird analog zum Oszillator ohne Kraft durch Eigenzustände von $N' = b^\dagger b$ diagonalisiert. Die Eigenzustände von $b^\dagger b$ sind die gleichen Eigenzustände wie die von $a^\dagger a$, denn $[N, N'] = 0$. Die Nullpunktenergie ist allerdings um c^2 reduziert.

- (b) In welchem Zustand $|\psi(t)\rangle$ befindet sich das System nun zu Zeiten $t > 0$, wenn es bei $t = 0$ im gleichen Anfangszustand $|\psi(0)\rangle$ war?

Durch die verschobene Nullpunktenergie lauten die Energieeigenwerte zu den Zuständen $|n\rangle = |0\rangle, |1\rangle, \dots$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} - c^2 \right).$$

Die Zeitentwicklung *aller* Zustände wird damit um einen Phasenfaktor $e^{i\omega c^2 t}$ modifiziert, also ergibt sich aus dem Vergleich mit (1) nun

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega(\frac{3}{2}-c^2)t} \left(\alpha |1\rangle + \beta e^{-i\omega t} |2\rangle \right).$$

- (c) Wie lautet der Ortserwartungswert $\langle x \rangle(t)$ im Zustand $|\psi(t)\rangle$? Was bedeutet das physikalisch?

Der gemeinsame Phasenfaktor aus (b) hebt sich bei der Berechnung des Erwartungswertes heraus. Der Ortsoperator lässt sich ebenfalls durch die neuen Operatoren ausdrücken, die nun die Rolle der Operatoren a, a^\dagger übernehmen,

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (b + b^\dagger - 2c).$$

Das heißt, der Ortserwartungswert lautet in Analogie zur Rechnung aus Aufgabe 2

$$\langle x \rangle(t) = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos \omega t - 2c \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Die Ruhelage ist also um den Wert

$$x_0 = -2c \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{2k}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{k}{m\omega^2}$$

in die positive x -Richtung verschoben, wie in der Vorüberlegung erwartet.

Aufgabe 4: Wasserstoffatom**[5+10+15=30]**

Ein einfaches Wasserstoffatom hat die Eigenzustände $|n\ell m\rangle$ mit den üblichen Quantenzahlen. Es befinde sich im Zustand

$$|\psi\rangle = a|1s0\rangle + b|2p1\rangle + c|2p-1\rangle$$

mit reellen Parametern a, b, c . Die Grundzustandsenergie ist E_0 .

Hier, wie im folgenden, ist die Konvention s, p, \dots für $\ell = 0, 1, \dots$ verwendet.

- (a) Bestimmen Sie a, b, c so, dass $\langle L_z \rangle = -\hbar/6$ und $\langle E \rangle = 3E_0/8$.

Die Zustände $|n\ell m\rangle$ sind Eigenzustände des Hamiltonoperators und der Bahndrehimpulsoperatoren \vec{L}^2, L_z , insbesondere gilt

$$H|n\ell m\rangle = \frac{E_0}{n^2}|n\ell m\rangle, \quad L_z|n\ell m\rangle = m\hbar|n\ell m\rangle.$$

Damit erhalten wir

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E_0 \left(|a|^2 + (|b|^2 + |c|^2) \frac{1}{4} \right), \quad \langle \psi | L_z | \psi \rangle = \hbar (|b|^2 - |c|^2).$$

Da der Zustand normiert sein muss, gilt ebenfalls

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1.$$

Diese Gleichungen ergeben für reelle Koeffizienten die Lösung

$$a = \sqrt{\frac{1}{6}} = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad b = \sqrt{\frac{2}{6}} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad c = \sqrt{\frac{3}{6}} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

die jeweils noch um eine beliebige Phase modifiziert sein können.

- (b) Wie lautet der Erwartungswert der x -Komponente des Bahndrehimpulses, $\langle L_x \rangle$?

Wir können L_x durch Leiteroperatoren

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

ausdrücken. Die einzigen nichtverschwindenden Terme bei Anwendung auf $|\psi\rangle$ sind $|2p0\rangle$ -Zustände, die wiederum orthogonal zu allen Zuständen in $|\psi\rangle$ selbst sind. Damit gilt

$$\langle \psi | L_x | \psi \rangle = 0.$$

Gleichermaßen ließe sich aufgrund der Drehimpulsvertauschungsrelationen auch

$$i\hbar L_x = L_y L_z - L_z L_y$$

verwenden. Als hermiteschen Operator können wir L_z auf seine Eigenzustände links wie rechts mit jeweils gleichem Ergebnis anwenden, so dass nur $L_y - L_y = 0$ übrig bleibt.

- (c) Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle x \rangle$ der x -Koordinate des Elektrons. Hinweis: Bezeichnen Sie ein Radialintegral mit R anstatt es zu berechnen.

Es ist günstig den Erwartungswert x in der Ortsdarstellung zu berechnen, denn wir kennen auch die Energieeigenzustände in dieser als die Wellenfunktionen

$$\langle \vec{r} | n\ell m \rangle = R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi),$$

also

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) = a\psi_{1s0}(\vec{r}) + b\psi_{2p+1}(\vec{r}) + c\psi_{2p-1}(\vec{r}).$$

In sphärischen Polarkoordinaten lässt sich auch der x -Operator durch Kugelflächenfunktionen ausdrücken,

$$r \left(-Y_1^1 + Y_1^{-1} \right) = r \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(\sin \theta e^{i\varphi} + \sin \theta e^{-i\varphi} \right) = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} r \sin \theta \cos \varphi = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} x.$$

Damit bekommen wir

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \langle \psi | r \left(Y_1^1 - Y_1^{-1} \right) | \psi \rangle$$

oder ausgedrückt durch $\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi_{n\ell m}(\vec{r})$,

$$\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \int r^2 dr d\Omega \psi^*(\vec{r}) r \left(Y_1^1(\Omega) - Y_1^{-1}(\Omega) \right) \psi(\vec{r}).$$

Nun können wir überlegen, welche der $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ zum Ergebnis beitragen können. Wir wissen, dass die Kugelflächenfunktionen die Parität $(-1)^\ell$ haben. Für die Wellenfunktionen gilt das gleiche,

$$\psi_{n\ell m}(-\vec{r}) = (-1)^\ell \psi_{n\ell m}(\vec{r}).$$

Nun verschwindet ein Integrand mit negativer Parität bei Integration über den gesamten Raum, also können nur jeweils zwei Terme mit unterschiedlichem ℓ aus der Wellenfunktion überhaupt zum Erwartungswert beitragen, so dass die Parität des Integranden insgesamt gerade ist. In unserem Fall also je ein s - und ein p -Zustand.

Insgesamt bekommen wir also

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= -2 \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \int r^3 dr R_{10}^*(r) R_{2p}(r) \\ &\quad \times \int d\Omega a Y_0^0(\Omega) \left(Y_1^1(\Omega) - Y_1^{-1}(\Omega) \right) \left(b Y_1^1(\Omega) + c Y_1^{-1}(\Omega) \right). \end{aligned}$$

Der Faktor 2 kommt dazu, weil wir den gleichen Beitrag von den komplex konjugierten Termen bekommen und der Ortserwartungswert reell ist. $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ können wir vor das Integral ziehen. Das Radialintegral bezeichnen wir mit R , wie im Aufgabentext. Es bleibt

$$\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} R a \int d\Omega \left(Y_1^1(\Omega) - Y_1^{-1}(\Omega) \right) \left(b Y_1^1(\Omega) + c Y_1^{-1}(\Omega) \right).$$

Für die linken Faktoren der Kugelflächenfunktionen schreiben wir $Y_1^{\pm 1} = -Y_1^{\mp 1*}$, dann können wir die Orthogonalitätsrelationen der Kugelflächenfunktionen

$$\int d\Omega Y_\ell^{m*}(\Omega) Y_{\ell'}^{m'}(\Omega) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

verwenden und erhalten schließlich

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} R a (b - c) = -\frac{R}{3} \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{\sqrt{6}}.$$

In diesem Zustand ist der Ort des Elektrons im Mittel leicht in x -Richtung gegen den Kern verschoben, entlang dieser Richtung hat das Atom ein elektrisches Dipolmoment.