KIT **SS 2020**

Moderne Theoretische Physik I — Quantenmechanik I

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

Klausur Nr. 2, 5.10.2020 — Lösungsvorschlag

Verwendete Formeln der Formelsammlung

Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren des harmonischen Oszillators:

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

Orts– und Impulsoperator des harmonischen Oszillators:

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

Aufgabe 1: Kurze Fragen **[$5 \times 4 = 20$]**

(a) *Wie lautet die Vertauschungsrelation von Ort und Impuls?*

$$\left[\, X_i, P_j \,\right] = i\hbar\delta_{ij}$$

(b) *Geben Sie die Pauli-Matrizen und deren Vertauschungsrelationen an*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ , \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ , \qquad \left[\, \sigma_i, \sigma_j \,\right] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

(c) *Nennen Sie je ein Beispiel zum Wellen- und zum Teilchencharakter in der Quantenphysik.*

Interferenzphänomene bei Wellen, Beugung von Licht oder Elektronen am Doppelspalt oder am Kristallgitter. Stoßphänomene beim Teilchencharakter, z.B. Comptoneffekt, Photoeffekt.

(d) *Geben Sie ein Beispiel für eine Korrespondenzregel.*

Für den Impuls,

$$\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla} \ .$$

(e) *Was versteht man unter der Symmetrisierungsregel? Geben Sie eina Beispiel.*

Produkte nichtkommutierender Operatoren werden beim Übergang zur Quantenmechanik symmetrisiert, z.B. Ort und Impuls,

$$XP \to \frac{1}{2}\left(XP + PX\right) \ .$$

Aufgabe 2: Wasserstoffatom **[$3 \cdot 4 + 8 = 20$]**

Ein einfaches Wasserstoffatom hat die Eigenzustände $|\,n\ell m\,\rangle$ mit den üblichen Quantenzahlen. n ist die Hauptquantenzahl, ℓ die Drehimpulsquantenzahl und m die magnetische Quantenzahl. Zur Zeit $t = 0$ befinde sich das Atom im Zustand

$$|\,\psi_0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,100\,\rangle + b\sum_{\ell,m}|\,2\ell m\,\rangle \ ,$$

wobei über alle möglichen ℓ, m summiert wird.

(a) *Man macht zur Zeit $t = 0$ eine Energie- und Drehimpulsmessung. Mit welchen Wahrscheinlichkeiten werden*

Als Vorüberlegung bestimmen wir den gemeinsamen Faktor b vor den Zuständen $|\,2\ell m\,\rangle$ aus der Normierung des Zustandes. Dazu sollte klar sein, dass die ganzahligen Quantenzahlen ℓ und m die Werte $0 \leq \ell \leq n-1$ und $-\ell \leq m \leq \ell$ annehmen. Wir können ausschreiben

$$|\,\psi_0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,100\,\rangle + b\,(|\,200\,\rangle + |\,21-\,\rangle + |\,210\,\rangle + |\,21+\,\rangle)\ .$$

Die Zustände in jedem Summanden sind orthogonal, so dass wir aus $|\,\langle\,\psi_0\,|\,\psi_0\,\rangle\,|^2 = 1$

$$b = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

berechnen können. Man kann auch sofort aus den dazugehörigen Wahrscheinlichkeiten überlegen, vier gleiche Koeffizienten müssen jeweils eine Faktor $1/\sqrt{4}$ erhalten und da der $(n = 1)$-Zustand mit $1/\sqrt{2}$ gewichtet ist, müssen es alle anderen auch sein, daher $b = 1/\sqrt{2} \cdot 1/\sqrt{4}$.

(i) *die Energie des ersten angeregten Niveaus ,*

Das erste angeregte Niveau ist $n = 2$. Da unser System in einem Zustand mit $n = 1$ oder $n = 2$ ist, können wir am einfachsten die Wahrscheinlichkeit für $n = 1$ berechnen, da hier nur ein Zustand beteiligt ist,

$$P(n = 1) = |\langle\,n = 1\,|\,\psi_0\,\rangle|^2 = \frac{1}{2}\,,$$

und damit ist

$$P(n = 2) = 1 - P(n = 1) = \frac{1}{2}\,.$$

(ii) *der Drehimpuls $\ell = 1$,*

Drei der Zustände mit $n = 2$ haben $\ell = 1$ und tragen mit gleichem Gewicht bei. Die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Zustände werden addiert,

$$P(\ell = 1) = |\,\langle\,21-\,|21-\,\rangle\,|^2 + |\,\langle\,210\,|210\,\rangle\,|^2 + |\,\langle\,21+\,|21+\,\rangle\,|^2 = \frac{3}{8}\,.$$

Hier sollte klar sein, dass die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Zustände addiert werden müssen und nicht die Amplituden, so sind ja alle Zustände normiert. Das ist Aussage des Postulates über den Messprozess. Hier wird die Wahrscheinlichkeit, einen Messwert ℓ zu messen als Erwartungswert des Projektors P_ℓ in den Unterraum der Zustände mit diesem Messergenis formuliert, so haben wir den Projektor

$$P_\ell = |\,21-\,\rangle\langle\,21-\,| + |\,210\,\rangle\langle\,210\,| + |\,21+\,\rangle\langle\,21+\,|$$

und in unserem Fall

$$\langle\,P_\ell\,\rangle = \langle\,\psi_0\,|\,P_\ell\,|\,\psi_0\,\rangle\ .$$

Einsetzen des Projektors liefert direkt den Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit als Summe der Quadrate der einzelnen Amplituden.

(iii) *die magnetische Quantenzahl $m = 0$*

Mit den gleichen Überlegungen und der Beobachtung, dass die Zustände $|\,100\,\rangle$, $|\,200\,\rangle$ und $|\,210\,\rangle$ beitragen, erhalten wir

$$P(m=0) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} = \frac{3}{4} \,.$$

gemessen? Geben Sie als Ergebnisse der Rechnungen jeweils Zahlenwerte an.

(b) *Wie lautet der Zustand ψ_0 zur Zeit $t > 0$? Wie hängen die in a) berechneten Wahrscheinlichkeiten von der Zeit ab?*

Die Energien der Zustände hängen nur von n ab, $E_n = E_0/n^2 \approx -13,6\,\mathrm{eV}/n^2$. Die Zeitentwicklung folgt unmittelbar aus der Schrödingergleichung, da wir Energieeigenzustände gegeben haben,

$$|\,\psi(t)\,\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}}{\sqrt{2}}\,|\,100\,\rangle + \frac{\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{E_0}{4}t}}{2\sqrt{2}}\sum_{\ell,m}|\,2\ell m\,\rangle \;.$$

Nach der Überlegung oben zum Projektor ist klar, dass bei jeder Messung immer nur eine Summe der Betragsquadrate der Koeffizienten vorkommt, weil wir in allen drei Fällen $|\,\psi(t)\,\rangle$ direkt als Überlagerung von Eigenzuständen der gemessenen Observablen vorliegen haben. Daher fällt jede Zeitabhängigkeit in den Koeffizienten heraus und alle Messungen sind zeitunabhängig.

Aufgabe 3: Harmonischer Oszillator **[15 + 5 = 20]**

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

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\,0\,\rangle + |\,4\,\rangle\right) \;.$$

Darin sind $|\,0\,\rangle$, $|\,4\,\rangle$ Eigenzustände des Besetzungszahloperators $N = a^\dagger a$ zu den Eigenwerten $n = 0, 4$.

(a) *Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle\, X\,\rangle$, $\langle\, X^2\,\rangle$, $\langle\, P\,\rangle$, $\langle\, P^2\,\rangle$ und verifizieren Sie die Heisenbergsche Unschärferelation.*

In der Formelsammlung werden X und P durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt, deren Wirkung auf die Besetzungszahleigenzustände $|\,n\,\rangle$ ebenfalls angegeben ist. Da a und $a^\dagger$ die Zustände $|\,n\,\rangle$ jeweils nur um eine Einheit verschieben, sehen wir sofort, dass die Erwartungswerte $\langle\, X\,\rangle$ und $\langle\, P\,\rangle$ verschwinden, denn

$$\langle\, 0\,|\, a\,|\, 0\,\rangle = \langle\, 4\,|\, a\,|\, 4\,\rangle = \langle\, 0\,|\, a\,|\, 4\,\rangle = \langle\, 4\,|\, a\,|\, 0\,\rangle = 0$$

und damit verschwinden auch die jeweils komplex konjugierten Terme, in denen $a^\dagger$ vorkommt. In $\langle\, X^2\,\rangle$ und $\langle\, P^2\,\rangle$ kommen allerdings die Quadrate

$$(a \pm a^\dagger)^2 = (a \pm a^\dagger)(a \pm a^\dagger) = a^2 + (a^\dagger)^2 \pm aa^\dagger \pm a^\dagger a$$

vor. Darin können die zwei Quadrate wiederum keinen Beitrag liefern, weil sie die Zustände $|\,0\,\rangle$ und $|\,4\,\rangle$ nur um jeweils zwei Einheiten verschieben können, z.B.

$$\langle\, 0\,|\, a^2\,|\, 4\,\rangle \sim \langle\, 0\,|\,2\,\rangle = 0 \,.$$

Die anderen Beiträge können wir so berechnen,

$$\langle\, n \,|\, a^\dagger a \,|\, n \,\rangle = \langle\, n \,|\, N \,|\, n \,\rangle = n$$

sowie mit $[a, a^\dagger] = 1$

$$\langle\, n \,|\, a a^\dagger \,|\, n \,\rangle = \langle\, n \,|\, a^\dagger a + 1 \,|\, n \,\rangle = \langle\, n \,|\, N + 1 \,|\, n \,\rangle = n + 1\,.$$

während auch hier die gemischten Beiträge verschwinden. Damit erhalten wir

$$\langle\, X^2 \,\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\frac{1}{2}(0+1)\,\langle\, 0 \,|\, 0 \,\rangle + \frac{1}{2}(4+5)\,\langle\, 4 \,|\, 4 \,\rangle\right) = \frac{5}{2}\frac{\hbar}{m\omega}$$

und

$$\langle\, P^2 \,\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2}\left(-\frac{1}{2}(0+1)\,\langle\, 0 \,|\, 0 \,\rangle - \frac{1}{2}(4+5)\,\langle\, 4 \,|\, 4 \,\rangle\right) = \frac{5}{2}\hbar m\omega\,.$$

Für die Unschärferelation benötigen wir ΔX und ΔP, die wir aus der Varianz bestimmen, z.B.

$$(\Delta X)^2 = \left\langle\, (X - \langle\, X \,\rangle)^2 \,\right\rangle = \langle\, X^2 \,\rangle - \langle\, X \,\rangle^2$$

und analog für ΔP. Da $\langle\, X \,\rangle = \langle\, P \,\rangle = 0$ erhaten wir aus den bereits berechneten Resultaten

$$\Delta X \Delta P = \frac{5}{2}\hbar \gtrsim \frac{\hbar}{2}\,.$$

und können die Heisenbergsche Unschärferelation verifizieren.

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

Die Zeitentwicklung ergibt sich mit den bekannten Energieeigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

$$|\, \psi(t) \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\,|\, 0 \,\rangle + \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_4 t}\,|\, 4 \,\rangle\right) = \frac{\mathrm{e}^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{2}}\left(|\, 0 \,\rangle + \mathrm{e}^{-4i\omega t}\,|\, 4 \,\rangle\right)$$

Dann ist die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$P_0(t) = |\langle\, \psi_0 \,|\, \psi(t) \,\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left|1 + \mathrm{e}^{-4i\omega t}\right|^2 = \frac{1}{4}\left(1 + 1 + \mathrm{e}^{-4i\omega t} + \mathrm{e}^{4i\omega t}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \cos 4\omega t\right)\,,$$

oszilliert also zwischen 0 und 1.

Aufgabe 4: Teilchen im Potential **[$6 + 8 + 6 = 20$]**

Wir untersuchen ein eindimensionales System mit einem Teilchen der Masse m im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty\,, & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,, & x \geq 0 \end{cases}\,,$$

wobei $\omega > 0$.

(a) *Wie lauten die zeitunabhängige Schrödingergleichung sowie die Rand- und Normierungsbedingungen für eine Lösung $\psi(x)$?*

Im Bereich $x < 0$ mit $V(x) \to \infty$ muss die Wellenfunktion $\psi(x)$ verschwinden, es gilt also $\psi(x < 0) = 0$. Für eine stetige Wellenfunktion muss für $x \to 0^+$ ebenfalls $\psi(x) \to 0$ gehen. Um die Normierbarkeit von$\psi(x)$ im rechten Halbraum zu gewährleisten, muss $\psi(x) \to 0$ für $x \to \infty$ gelten.

Im rechten Halbraum gilt die zeitunabhängige Schrödingergleichung des einfachen harmonischen Oszillators,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)\,.$$

(b) *Wie lauten die Energieeigenwerte und die dazugehörigen, normierten Eigenfunktionen $\psi(x)$?*

Die Lösungen der Differenzialgleichung in ganz $x \in \mathbb{R}$ wären mit den Randbedingunen $\psi(x) \to 0$ für $x \to \pm\infty$ die bekannten Eigenfunktionen $\phi_n(x)$ des harmonischen Oszillators zu den Eigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ für $n = 0, 1, 2, \ldots$.

Das sollte für unser Problem immer noch gelten, jedoch haben wir die Randbedingung, dass $\psi(0) = 0$. Diese Bedingung wird nur von den Oszillatoreigenfunktionen $\varphi_n(x)$ mit ungeraden n, oder $n = 2k + 1$ mit $k = 0, 1, 2, \ldots$ erfüllt, diese haben n Nullstellen, von denen aufgrund der Symmetrie immer eine Nullstelle bei $x = 0$ liegt. Diese haben genau k Knoten im rechten Halbraum, so dass alle Lösungen bekannt sind.

Da die Eigenfunktionen nun auf den rechten Halbraum beschränkt sind, müssen wir noch die Normierung beachten, die wir reell wählen,

$$1 = \int_0^\infty |\psi_k(x)|^2 \, dx = \int_0^\infty |N\varphi_{2k+1}(x)|^2 \, dx = \frac{N^2}{2} \qquad \Longrightarrow N = \sqrt{2} \, .$$

Damit haben wir Energieeigenfunktionen und -eigenwerte

$$\psi_k(x) = \sqrt{2} \, \varphi_{2k+1}(x) \qquad \text{und} \qquad E_k = \hbar\omega \left(2k + \frac{3}{2} \right) \qquad \text{mit} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

(c) *Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich ein Teilchen im Grundzustand im klassisch verbotenen Bereich?*

Im klassisch verbotenen Bereich ist $E < V(x)$. Mit $E = V(x)$ bekommen wir die Grenze x_0 des Bereiches im positiven Halbraum, wobei wir im Grundzustand $k = 0$ setzen,

$$E = \hbar\omega \left(2 \cdot 0 + \frac{3}{2} \right) = \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 = V(x_0) \qquad \Longrightarrow \qquad x_0 = \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}} \, .$$

Die Wahrscheinlichkeit P_{out}, dass das Teilchen sich im klassischen verbotenen Bereich befindet ist dann

$$P_{\text{out}} = \int_{x_0}^\infty |\psi_0(x)|^2 \, dx = 2 \int_{x_0}^\infty |\varphi_1(x)|^2 \, dx > 0 \, .$$

Hinweis: die Wellenfunktionen $\varphi_n(x)$ des einfachen harmonischen Oszillators können als bekannt angenommen und sollen nicht explizit ausgeschrieben werden.

Aufgabe 5: Teilchen im Kasten **[5 + 3 · 5 = 20]**

Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem Kastenpotential der Breite a, dessen Wände unendlich hoch sind ($0 < x < a$).

(a) *Wie lauten die Energien E_n und die stationären Zustände $\psi_n(x)$ des Teilchens mit einer Quantenzahl n? Welche n sind erlaubt?*

Außerhalb des Kastens, $x < 0$ oder $x > a$ verschwindet die Wellenfunktion. Damit sind auch die Anschlussbedingungen bekannt, $\psi(0) =$
$psi(a) = 0$. Innerhalb, $0 <\leq x \leq a$, haben wir die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödigergleichung, in der das konstante Potential $V(x) = 0$ gesetzt werden kann,

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) \equiv -k^2 \psi(x) \, ,$$

mit den bekannten Lösungen

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \, .$$

Aus den Randbedingungen folgt sofort, dass $B = 0$ und $ka = n\pi$ mit $n = 1, 2, \ldots$. Damit erhalten wir die Lösungen

$$\psi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi}{a} x \,,$$

mit der Normierung aus

$$|A_n|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \, \mathrm{d}x = 1 \,.$$

Das Integral können wir mit der Beobachtung der Symmetrie des $\sin^2(x)$ über eine volle Phase bestimmen, die Fläche unterhalb des $\sin^2 x$ im Bereich $0 \le x \le 2\pi$ ist genau die halbe Fläche des Rechtecks mit $0 < y < 1$. Also gilt für ein reell gewähltes A_n, dass $|A_n|^2 a/2 = 1$. Mit der Definition für k haben wir dann das Ergebnis

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \,, \qquad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \,.$$

(b) *Das Teilchen befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand*

$$|\,\psi_0\,\rangle = \alpha\,|\,1\,\rangle + \beta\,|\,2\,\rangle \,,$$

worin $|\,1\,\rangle$ und $|\,2\,\rangle$ die beiden niedrigsten Energieeigenzustände sind.

(i) M*it welcher Wahrscheinlichkeit wird zur Zeit $t = 0$ die Energie E_2 gemessen?*

Mit der Messung der Energie E_2 befindet sich das Teilchen im Zustand $|\,2\,\rangle$, also suchen wir die Wahrscheinlichkeit, dass nach der Messung dieser Zustand vorliegt,

$$P_2 = |\langle\,2\,|\,\psi_0\,\rangle|^2 = |\beta|^2$$

(ii) *In welchem Zustand befindet sich das Teilchen zu einer Zeit $t_1 > 0$, wenn bei $t = 0$ tatsächlich die Energie E_2 gemessen wurde?*

Nach der Messung von E_2 bei $t = 0$ befindet sich das Teilchen im Zustand $|\,2\,\rangle$. $|\,2\,\rangle$ ist Energieeigenzustand, also ein stationärer Zustand, darum befindet sich das Teilchen zu jeder Zeit $t > 0$ bis auf weiteres mit Sicherheit im Zustand $|\,2\,\rangle$.

(iii) *Mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das Teilchen bei $t = 0$ in einem kleinen Bereich $\delta a \ll a$ um $x = a/2$?*

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit bestimmen wir mit der Wellenfunktion

$$P_{a/2} = \int_{a-\delta a/2}^{a+\delta a/2} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x \,.$$

Darin ist im gegebenen Zustand

$$\psi(x) = \langle\,x\,|\,\psi_0\,\rangle = \alpha\,\langle\,x\,|\,1\,\rangle + \beta\,\langle\,x\,|\,2\,\rangle = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x) \,.$$

Da $\delta a \ll a$, können wir die Wellenfunktionen um den Bereich $x \approx a/2$ entwickeln,

$$\sin \frac{\pi}{a} x \approx 1 + O(x^2) \,, \qquad \sin \frac{2\pi}{a} x \approx -x + O(x^2) \,.$$

In führender Ordnung bleibt nur der Beitrag von $\psi_1(a/2) \approx 1$. Damit erhalten wir

$$P_{a/2} = \int_{a-\delta a/2}^{a+\delta a/2} \frac{2}{a} |\alpha|^2 \, \mathrm{d}x = \frac{2}{a} |\alpha|^2 \left(a + \frac{\delta}{2} - a + \frac{\delta}{2} \right) = 2|\alpha|^2 \frac{\delta a}{a} \,.$$