Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 17

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Matthias Hecker, Markus Klug

Blatt 7
Abgabe: 12.06.2017, 12:00h; Bespr.: 14.06.2017

---

1. Bahndrehimpuls (3 Punkte, schriftlich)

a) 1 P Die Einheitsvektoren spannen ein rechtshändiges orthogonales Koordinatensystem auf. Somit gilt

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\theta &= \hat{\mathbf{e}}_\phi \\ \hat{\mathbf{e}}_\theta \times \hat{\mathbf{e}}_\phi &= \hat{\mathbf{e}}_r \\ \hat{\mathbf{e}}_\phi \times \hat{\mathbf{e}}_r &= \hat{\mathbf{e}}_\theta\end{aligned}$$

Für den Drehimpuls gilt damit

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \\ &= \frac{\hbar}{i}\hat{\mathbf{r}} \times \nabla \\ &= \frac{\hbar}{i} r\hat{\mathbf{e}}_r \times \left(\hat{\mathbf{e}}_r\partial_r + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r}\partial\theta + \hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi\right) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left(\partial_\theta \hat{\mathbf{e}}_\phi - \frac{\partial_\phi}{\sin\theta}\hat{\mathbf{e}}_\theta\right) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left[\left(-\sin\phi\partial_\theta - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right)\hat{\mathbf{e}}_x + \left(\cos\phi\partial_\theta - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right)\hat{\mathbf{e}}_y + \partial_\phi\hat{\mathbf{e}}_z\right]\end{aligned}$$

b) 1 P Die Wellenfunktion ausgedrückt in Kugelkoordinaten lautet

$$\psi(r,\theta,\phi) = (\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)\, rNe^{-\frac{r^2}{\alpha^2}}$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$ auf den winkelabhaengigen Teil von $\psi(r)$ angewandt ist

$$\begin{aligned}\partial_\theta^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) \\ \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -\frac{(\cos\phi + \sin\phi)}{\sin\theta} \\ \frac{1}{\tan\theta}\partial_\theta(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -\frac{1}{\tan\theta}(\cos\theta\cos\phi + \cos\theta\sin\phi + 2\sin\theta) \\ &= -\left(-\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta}\cos\phi - \frac{\cos^2\theta}{\sin\theta}\sin\phi + 2\cos\theta\right)\end{aligned}$$

bzw. auf $\psi(r)$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2\psi(r,\theta,\phi) &= \hat{\mathbf{L}}^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)\, rNe^{-\frac{r^2}{\alpha^2}} \\ &= 2\hbar^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)\, rNe^{-\frac{r^2}{\alpha^2}}\end{aligned}$$

Somit ist $l(l+1) = 2$ und damit $l = 1$.

c) 1 P Mit einer passenden Tabelle (siehe Skript, Wikiepdia, etc.) findet man, dass sich die trigonometrischen Funktionen durch Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$ darstellen lassen

$$\begin{aligned}\sin\theta\cos\phi &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}(\theta,\phi) - Y_1^1(\theta,\phi)\right) \\ \sin\theta\sin\phi &= i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}(\theta,\phi) + Y_1^1(\theta,\phi)\right) \\ \cos\theta &= 2\sqrt{\frac{3}{\pi}}Y_1^0(\theta,\phi)\end{aligned}$$

Somit findet man für die Wellenfunktion

$$\psi(r,\theta,\phi) = \left(\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[(1+i)\,Y_1^{-1}(\theta,\phi) + (i-1)\,Y_1^{1}(\theta,\phi)\right] + 4\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi)\right) rNe^{-\frac{r^2}{\alpha^2}}$$

Der Erwartungswert $\langle \hat{L}_z \rangle$ bestimmt sich mit $\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\phi)$ und der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen zu

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}_z \rangle &= \int r^2 dr \int d\Omega \psi^*(r,\theta,\phi)\hat{L}_z\psi(r,\theta,\phi) \\
&= \hbar \int r^2 dr \int d\Omega \Big(\frac{2\pi}{3} \left(-1 \times |1+i|^2 |Y_1^{-1}(\theta,\phi)|^2 + 1 \times |i-1|^2 |Y_1^1(\theta,\phi)|^2\right) \\
&\quad +0 \times \frac{16\pi}{3}|Y_1^0(\theta,\phi)|^2\Big) rNe^{-\frac{r^2}{\alpha^2}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

2. Teilchen im 3-dimensionalen endlichen Potentialtopf (4 Punkte, mündlich)

a) 1 P Wie in der Aufgabenstellung angegeben, besitzt der Zustand des Teilchens ψ den Drehimpuls $l = 0$. Somit liefert

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi(\mathbf{r}) = l(l+1)\hbar^2\psi(\mathbf{r}) = 0$$

und die zu lösende Schrödingergleichung lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Wellenfunktionen für $l = 0$ können daher nur Funktionen der Radialkomponente r sein. Das Potential eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)\right)\psi(r) &= 0 \quad \text{für } r \le a \\
\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}E\right)\psi(r) &= 0 \quad \text{für } r > a
\end{aligned}$$

Auf Grund der Art des Potentials müssen gebundene Zustände eine Energie zwischen $-V_0 < E < 0$ besitzen. Zustände mit $E > 0$ entsprechen ungebundenen Zuständen. In dieser Aufgabe wird sich somit auf den ersten Wertebereich beschränkt. Die Schrödingergleichung lässt sich damit schreiben als

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2\right)\psi(r) &= 0 \quad \text{für } r \le a \\
\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \kappa^2\right)\psi(r) &= 0 \quad \text{für } r > a
\end{aligned}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)}$ und $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$.

b) 1 P Um Lösungen der Schrödingergleichung zu finden, wird der Hinweis des Aufgabenblatts verwendet $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$, wodurch der kinetische Term zu

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{r\,u(r)}{r}\right) = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}u(r)$$

wird. Damit ist folgende Differentialgleichung für $u(r)$ zu lösen

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right)u(r) &= 0 \quad \text{für } r \le a \\
\left(\frac{d^2}{dr^2} - \kappa^2\right)u(r) &= 0 \quad \text{für } r > a
\end{aligned}$$

Ein geeigneter Ansatz für $u(r)$ lautet

$$u(r) = \begin{cases} A \sin kr + B \cos kr & \text{für } r \leq a \\ A' e^{-\kappa r} + B' e^{\kappa r} & \text{für } r > a \end{cases}$$

Mit der Bedingung nach Normierbarkeit von $\psi(r)$ muss $B = B' = 0$ sein: Die Wellenfunktion soll endlich für $r \to 0$ sein, bzw. gegen 0 für $r \to \infty$ gehen.
Die transzendente Gleichung und somit eine Gleichung zur Bestimmung der Energieeigenwerte erhält man durch Auswertung der Anschlussbedingungen bei $r = a$, die einer Stetigkeit von $u(a)$ und $\frac{d}{dr}u(r)\big|_{r=a} = u'(a)$ entsprechen. Diese liefern

$$\begin{aligned} A' \sin ka &= Be^{-\kappa a} \\ A' \cos ka &= -\kappa Be^{-\kappa a} \end{aligned}$$

aus denen die zu lösende Gleichung

$$-\kappa \tan ka = k$$

folgt, welche graphisch gelöst werden kann.

c) 2 P Zur Lösung der abgeleiteten Gleichung führen wir folgende Notation ein

$$\begin{aligned} z &\equiv ka = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)}a \\ z_0 &\equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar}V_0 a} \end{aligned}$$

wodurch sich

$$-\tan z = \frac{z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}}$$

ergibt, wobei $z > 0$. Hier wurde verwendet, dass $\kappa = \sqrt{z_0^2 - z^2}$.
Man erkennt, dass die RHS divergiert bei $z = z_0$ und somit einen Wertebereich von $[0, \infty)$ im Intervall $[0, z_0]$ besitzt. Da die LHS nur für Werte von $z \geq \pi/2$ positiv ist, ergibt sich die minimale Potentialstärke über die Bedingung $z_0 = \pi/2$, bzw. zu

$$V_{0,\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

Für diesen Fall ist $E_0 = 0$. Für Werte von $z_0 < \pi/2$, bzw. $V_0 < V_{\min}$ gibt es keine Lösung und somit auch keine gebundenen Zustände, im Gegensatz zu einem Potentialtopf in einer Dimension, wie in der Vorlesung gezeigt wurde.
Die maximale Grundzustandsenergie ist hingegen gegeben durch $z = \pi$, was einer Energie von

$$|E_0| = V_0 - \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma}$$

entspricht.

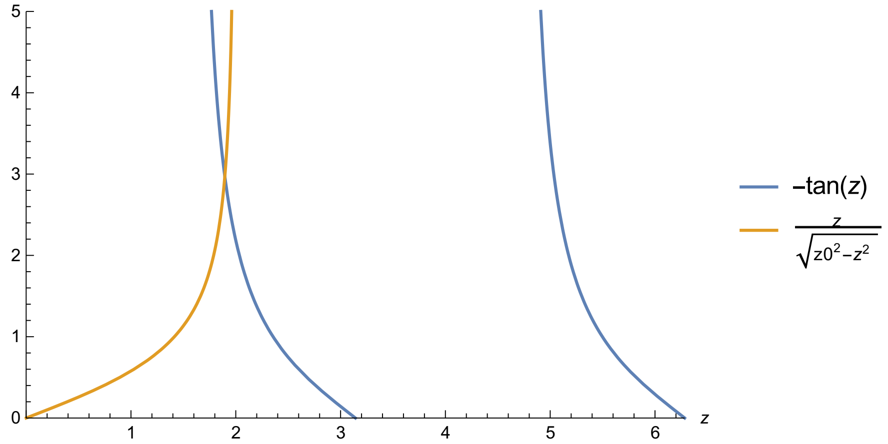

Abbildung 1: $z_0 = 2$

3. Drehimpulsalgebra (3 Punkte, mündlich)

a) 1 P Hierfür berechnet man erst den Kommutator

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hat{L}_\pm$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\hat{L}_+|m,l\rangle &= \left(\hat{L}_+\hat{L}_z + \hat{L}_+\right)|m,l\rangle \\ &= \hat{L}_+ (m+1)\,|m,l\rangle \\ &= (m+1)\,\hat{L}_+|m,l\rangle\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\hat{L}_-|m,l\rangle &= \left(\hat{L}_-\hat{L}_z - \hat{L}_-\right)|m,l\rangle \\ &= \hat{L}_- (m-1)\,|m,l\rangle \\ &= (m-1)\,\hat{L}_-|m,l\rangle\end{aligned}$$

$\hat{L}_\pm|m,l\rangle$ ist also wiederum ein Eigenzustand von $\hat{L}_z$, aber mit erhöhtem, bzw. erniedrigtem Eigenwert $m \pm 1$.

b) 1 P Zuerst wird $\hat{\mathbf{L}}^2$ durch $\hat{L}_z$ und $\hat{L}_\pm$ ausgedrückt

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) + \hat{L}_z^2 \\ &\overset{1)}{=} \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \\ &\overset{2)}{=} \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_z + \hat{L}_z^2\end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2i\hat{L}_z$. Mit 1) auf den Zustand mit maximalem l findet man

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2|l,l\rangle &= l(l+1)|l,l\rangle \\ &= \left(\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z + \hat{L}_z^2\right)|l,l\rangle \\ &= \hat{L}_-\hat{L}_+|l,l\rangle + l(l+1)|l,l\rangle\end{aligned}$$

Analog gilt fuer den Zustand mit minimalem l und 2)

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2|l,-l\rangle &= l(l+1)|l,-l\rangle \\ &= \left(\hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_z + \hat{L}_z^2\right)|l,-l\rangle \\ &= \hat{L}_+\hat{L}_-|l,-l\rangle + l(l+1)|l,-l\rangle\end{aligned}$$

woraus man ableitet, dass $\hat{L}_-|l,-l\rangle = \hat{L}_+|l,l\rangle = 0$. Somit ist der Eigenwert m auf $m \in [-l, l]$ beschränkt.

c) 1 P Das Spektrum von m lässt sich durch die Auf- und Absteigeoperatoren konstruieren und ist gegeben durch

$$m \in \{-l, -l+1, \ldots, l-1, l\},$$

also $2l+1$-fach entartet. Da $m_{\min} = -l$ und $m_{\max} = l$ durch ganzzahlige Schritte getrennt sind, kann l nur ganzahlige oder halbzahlige Werte annehmen.