Prof. U. Mosel, Dr. H. van Hees **06. Juni 2009**

1. Klausur zur Quantenmechanik I - Lösungen

Aufgabe 1 (10 Punkte)

(a) Ein Operator $\hat{O}$ ist linear, wenn für alle quadratintegrablen Wellenfunktionen ψ_1, ψ_2 und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$\hat{O}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\hat{O}\psi_1 + \lambda_2\hat{O}\psi_2. \tag{1}$$

(b) Ein Operator $\hat{O}$ ist hermitesch, wenn für alle quadratintegrablen Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x \psi_1^*(\vec{x})\hat{O}\psi_2(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x [\hat{O}\psi_1(\vec{x})]^*\psi_2(\vec{x}). \tag{2}$$

(c) Alle drei Operatoren sind linear, da sowohl die Multiplikation mit x_1 als auch die Ableitung $\partial/\partial x_1$ linear sind und die Hintereinanderausführung von linearen Operatoren ebenfalls linear ist.

Es gilt allgemein für zwei Operatoren $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$. Ein Operator ist hermitesch genau dann, wenn $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Aus der Hermitezität von $\hat{\vec{x}}$ und $\hat{\vec{p}}$ folgt

$$\hat{O}_1^\dagger = (-\mathrm{i}\hbar x_1\partial/\partial x_1)^\dagger = (\hat{x}_1\hat{p}_1)^\dagger = \hat{p}_1\hat{x}_1 \neq \hat{x}_1\hat{p}_1. \tag{3}$$

Also ist $\hat{O}_1$ nicht hermitesch.

$$\hat{O}_2^\dagger = (\mathrm{i}\hat{x}_1\hat{p}_1)^\dagger = (-\mathrm{i})\hat{p}_1\hat{x}_1 \neq \mathrm{i}\hat{x}_1\hat{p}_1, \tag{4}$$

d.h. auch $\hat{O}_2$ ist nicht hermitesch.

Das symmetrisierte Produkt $\hat{O}_3 = \hat{x}_1\hat{p}_1 + \hat{p}_1\hat{x}_1$ ist hermitesch, weil $\hat{x}_1$ und $\hat{p}_1$ hermitesch sind.

Man kann die Hermitezität auch nachprüfen, indem man jeweils die Definition überprüft und bzgl. x_1 partiell integriert, wobei Randterme wegfallen, da die Funktionen quadratintegrabel vorausgesetzt sind[1].

(d) Es ist $\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \hat{L}_1$ und $\hat{\vec{p}}^2$ kommutiert mit allen Komponenten des Drehimpulsoperators, d.h. $\left[\hat{\vec{p}}^2, \hat{L}_z\right] = 0$. Das kann man direkt durch Anwendung der Operatoren auf eine beliebige Wellenfunktion oder fortgesetzte Verwendung von

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} \tag{5}$$

zeigen (s. Präsenzaufgabe 8 auf Übungsblatt 5, wo die analoge Aufgabe für $\hat{\vec{L}}^2$ behandelt wurde).

---

[1] Genau genommen gilt dies nur für einen dichten Teilraum des Funktionenraumes $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, wo $\hat{x}_1$ und $\hat{p}_1$ definiert sind.

Aufgabe 2 (5 Punkte)

(a) Die Linearität ist klar:

$$\hat{P}[\lambda_1\psi_1(\vec{x}) + \lambda_2\psi_2(\vec{x})] = \lambda_1\psi_1(-\vec{x}) + \lambda_2\psi_2(-\vec{x}) = \lambda_1\hat{P}\psi_1(\vec{x}) + \lambda_2\hat{P}\psi_2(\vec{x}). \tag{6}$$

Die Hermitezität weist man durch direkte Anwendung der Definition nach:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\psi_1^*(\vec{x})\hat{P}\psi_2(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\psi_1^*(\vec{x})\psi_2(-\vec{x}) \stackrel{\vec{x}'=-\vec{x}}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\psi_1^*(-\vec{x}')\psi_2(\vec{x}') \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x[\hat{P}\psi_1(\vec{x})]^*\psi_2(\vec{x}).\end{aligned} \tag{7}$$

Letzteres bedeutet, daß $\hat{P}$ hermitesch ist.

(b) Es ist

$$\hat{P}^2\psi(\vec{x}) = \hat{P}\psi(-\vec{x}) = \psi[-(-\vec{x})] = \psi(\vec{x}) \Rightarrow \hat{P}^2 = \mathbb{1}. \tag{8}$$

(c) Sei $\psi_P(\vec{x})$ Eigenfunktion von $\hat{P}$ zum Eigenwert P. Demnach ist wegen der vorigen Gleichung

$$\psi(\vec{x}) = \hat{P}^2\psi_P(\vec{x}) = P\hat{P}\psi_P(\vec{x}) = P^2\psi_P(\vec{x}), \tag{9}$$

d.h. es gilt $P^2 = 1$, und damit muß $P = +1$ oder $P = -1$ sein, d.h. $\hat{P}$ besitzt die Eigenwerte ± 1, entsprechend unter Raumspiegelung geraden bzw. ungeraden Wellenfunktionen.

(d) Das Teilchen kann simultan eine bestimmte Energie und Parität besitzen, da offensichtlich $\hat{P}$ und $\hat{H}$ kommutieren. Es gilt nämlich für beliebige Wellenfunktionen

$$\hat{\vec{p}}^2\hat{P}\psi(\vec{x}) = -\hbar^2\Delta_{\vec{x}}\hat{P}\psi(\vec{x}) = -\hbar^2\Delta_{\vec{x}}\psi(-\vec{x}) = [-\hbar^2\Delta_{\vec{x}'}\psi(\vec{x}')]_{\vec{x}'=-\vec{x}} = \hat{P}\hat{\vec{p}}^2\psi(\vec{x}), \tag{10}$$

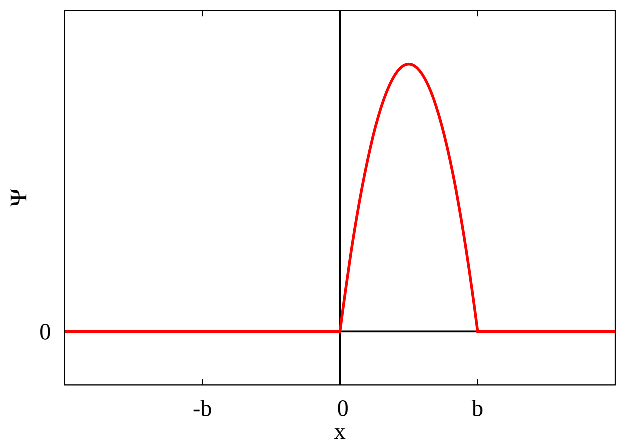
d.h. $\hat{P}\hat{\vec{p}}^2 = \hat{\vec{p}}^2\hat{P}$, d.h. der Operator der kinetischen Energie $\hat{T} = \hat{\vec{p}}^2/(2m)$ und $\hat{P}$ kommutieren. Weiter ist

$$V(|\hat{\vec{x}}|)\hat{P}\psi(\vec{x}) = V(|\hat{\vec{x}}|)\psi(-\vec{x}) = V(|-\hat{\vec{x}}|)\psi(-\vec{x}) = \hat{P}V(|\hat{\vec{x}}|)\psi(\vec{x}), \tag{11}$$

d.h. auch der Operator der potentiellen Energie vertauscht mit $\hat{P}$ und damit ist $\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = 0$, d.h. Energie und Parität eines Teilchens können für Zentralpotentiale gleichzeitig scharf bestimmt sein. Es existiert also ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) simultaner Energie- und Paritätseigenfunktionen.

Aufgabe 3 (15 Punkte)

(a) Skizze der Wellenfunktion:



(b) Die Koeffizienten sind durch

$$c_n = \int_0^b \mathrm{d}x \psi_n^*(x) x(x-b) \tag{12}$$

gegeben. Aus den auf dem letzten Aufgabenblatt angegebenen Integralen ergibt sich

$$c_n = \begin{cases} \frac{8\sqrt{30}}{n^3\pi^3}\left[-\frac{n\pi}{2} + 2(-1)^{(n-1)/2}\right] & \text{für } n \text{ ungerade} \\ \frac{16\sqrt{30}}{n^3\pi^3}\left[1-(-1)^{n/2}\right] & \text{für } n \text{ gerade.} \end{cases} \tag{13}$$

(c)

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi(n)(x) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_n t}{\hbar}\right). \tag{14}$$

(d)

$$P_n(t) = \left|\int_{-b}^{b} \psi_n^*(x)\Psi(x,t)\right|^2 = |c_n|^2 = \text{const.} \tag{15}$$

Durch die Messung geht die Wellenfunktion in den Energieeigenzustand $\psi_3(x)$ zum Energieeigenwert E_3 über. Da die Energie eine Erhaltungsgröße ist, ändert sich also für $t > t_1$ der Zustand nicht mehr (die Wellenfunktion ändert sich lediglich um den Phasenfaktor $\exp(-\mathrm{i}E_n t/\hbar)$, was aber die Wahrscheinlichkeitsverteilung, also das Betragsquadrat der Wellenfunktion nicht beeinflußt). Man mißt also zur Zeit $t_2 > t_1$ mit Sicherheit (Wahrscheinlichkeit 1) wieder den Energieeigenwert E_3.

Aufgabe 4 (10 Punkte)

(a) Da erst die zweite Ableitung bei $x = 0$ eine δ-distributionenartige Singularität aufweist, kann dort die erste Ableitung höchstens einen endlichen Sprung aufweisen, und die Wellenfunktion selbst muß stetig sein. Integriert man die zeitunabhängige Schrödingergleichung über ein infinitesimales Intervall $(-\eta, \eta)$ mit $\eta > 0$, erhält man die Randbedingung für die Ableitung:

$$\psi_E'(0^+) - \psi_E'(0^-) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_E(0). \tag{16}$$

Die Stetigkeitsbedingung für die Wellenfunktion selbst lautet

$$\psi_E(0^+) - \psi_E(0^-) = 0. \tag{17}$$

(b) Für eine von links her einfallende Welle lautet die Lösung

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A\exp(\mathrm{i}kx) + B\exp(-\mathrm{i}kx) & \text{für } x < 0 \\ \exp(\mathrm{i}kx) & \text{für } x \geq 0 \end{cases} \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \tag{18}$$

Dabei wurde von der freien Wählbarkeit der Normierung dadurch Gebrauch gemacht, daß für $x \geq 0$ der Koeffizient 1 gesetzt wurde. Die Koeffizienten A und B sind dann durch die Randbedingungen (16) und (17) eindeutig bestimmt. Setzt man die Lösung in diese Bedingungen ein, ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\mathrm{i}k(1 - A + B) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad A + B = 1. \tag{19}$$

Dies nach A und B aufgelöst liefert

$$A = 1 - \frac{\mathrm{i}mV_0}{\hbar^2 k}, \quad B = \frac{\mathrm{i}mV_0}{\hbar^2 k} \tag{20}$$

(c) Transmissions- und Reflexionskoeffizienten sind dann wegen $k^2 = 2mE/\hbar^2$

$$T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{1 + mV_0^2/(2E\hbar^2)} = \frac{2E\hbar^2}{2E\hbar^2 + mV_0^2}, \quad S = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{mV_0^2}{2E\hbar^2 + mV_0^2} = 1 - T. \tag{21}$$

(d) Es gibt **keine** gebundenen Zustände, denn die Energie kann nicht negativ werden. Für eine Energieeigenfunktion $\psi_E(x)$ gilt nämlich

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi_E^*(x) \underbrace{\hat{H}\psi_E(x)}_{E\psi_E(x)} = E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi_E^*(x) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 \delta(x) \right) \psi_E(x). \tag{22}$$

Wegen der Hermitezität von $\hat{p}$ ist weiter

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left\{ \frac{1}{2m} [\hat{p}\psi_E(x)]^* [\hat{p}\psi_E(x)] \right\} + V_0 |\psi_E(0)|^2 > 0, \tag{23}$$

d.h. es kann keine Energieeigenwerte $E < 0$ und folglich auch keine gebundenen Zustände geben.

Es war auch schon ausreichend, zu argumentieren, daß das Potential $V_0\delta(x)$ mit $V_0 > 0$ ein Grenzfall einer Potentialschwelle ist und nicht eines Potentialtopfes, so daß das Potential keine Mulde bildet, in der das Teilchen „gefangen“ werden könnte.

Aufgabe 5 (10 Punkte)

(a) Die Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihre Ableitung $\psi'(x)$ müssen bei $x = \pm b$ stetig sein, da dort gemäß zeitunabhängiger Schrödingergleichung allenfalls die zweite Ableitung einen Sprung aufweisen kann. Da die Wellenfunktion gerade ist, also wegen $\psi(x) = \psi(-x)$, genügt es, die Stetigkeitsbedingungen bei $x = b$ nachzuprüfen, was in der Klausur explizit nachzurechnen war.

(b) Für $|x| < b$ ist

$$\hat{H}\psi(x) = A \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0 \right) \cos(k_1 x) = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{32mb^2} A \cos(k_1 x) = E\psi(x). \tag{24}$$

Ebenso folgt für $|x| \geq 0$, daß $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$. ψ also tatsächlich Energieeigenfunktion zum Eigenwert

$$E = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{32mb^2} \tag{25}$$

ist.

(c) Es gilt

$$P(|x| > b) = 2 \int_b^{\infty} |\psi(x)|^2 = \int_b^{\infty} \mathrm{d}x A^2 \exp\left[-\frac{\pi}{2b}(x - b) \right] = \frac{2b}{\pi} A^2 = \frac{2}{\pi + 4} \simeq 28\%. \tag{26}$$

Aufgabe 6 (10 Punkte)

(a) $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

(b) Es ist

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x x |\psi_1(x)|^2 = 0, \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x (-\mathrm{i}\hbar) \psi_1^*(x) \psi_1'(x), \tag{27}$$

denn weil ψ_1 eine gerade Funktion ist, sind die Integranden jeweils ungerade Funktionen und die Integrale verschwinden daher bei Integration über $\mathbb{R}$.

(c) $\Delta p \geq \hbar/(2\Delta x) \simeq \hbar/(4b)$.

(d) Wegen $\langle p \rangle = 0$ ist $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle$, d.h. es ist $\langle p^2 \rangle \geq \hbar^2/(16b^2)$. Es ist also

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{H} \psi_1(x) = E_1 = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle - V_0 \underbrace{\int_{-b}^{b} \mathrm{d}x |\psi_1(x)|^2}_{<1} \geq \frac{\hbar^2}{32mb^2} - V_0. \tag{28}$$

(e) Im Gegensatz zur klassischen Mechanik können aufgrund der Unschärferelation Ort und Impuls nicht simultan scharfe Werte haben, d.h. $\Delta p > 0$ und folglich muß $\langle p^2 \rangle > 0$ sein. Damit ist aber der Erwartungswert der kinetischen Energie $\langle T \rangle > 0$. Befindet sich das Teilchen in einem Energieeigenzustand zum Energieeigenwert E, gilt $\langle E \rangle = E$, und folglich $E = \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle > \langle V \rangle \geq \min V$. In der klassischen Theorie ist der kleinstmögliche Energieeigenwert $E_{\text{min,kl}} = \min V$, aber das bedeutet dann aufgrund des Energiesatzes zwangsläufig, daß $T = p^2/2m = 0$ und folglich $p = 0$ ist. Da in der Quantenmechanik aber p keinen scharfen Wert haben kann, ist dies in der Quantentheorie nicht möglich, und folglich muß selbst der kleinste Energieeigenwert $> \min V_0$ sein.

Aufgabe 7 (12 Punkte)

(a) Der Operator $\hat{H}$ ist linear aber wegen des Imaginärteils im Potential nicht hermitesch.

(b) Es gilt die Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar \partial_t \Psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{x}, t). \tag{29}$$

Die Wahrscheinlichhkeitsdichte und der Wahrscheinlichkeitsstrom sind

$$P(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2, \quad \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}[\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi(\vec{x}, t)]. \tag{30}$$

Aus der Schrödingergleichung folgt

$$\begin{aligned} \partial_t P(\vec{x}, t) &= [\partial_t \psi^*(\vec{x}, t)] \psi(x, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \{[-\hat{H} \psi(\vec{x}, t)]^* \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \psi(\vec{x}, t)\} \\ &= \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im}[\psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \psi(\vec{x}, t)]. \end{aligned} \tag{31}$$

Weiter ist

$$\operatorname{div} \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\{[\vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi]^* [\vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi] + \psi^*(\vec{x}, t) \Delta_{\vec{x}} \psi(\vec{x}, t)\} = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im}\left[\psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(\vec{x}, t)\right]. \tag{32}$$

Die beiden voranstehenden Gleichungen addiert ergibt schließlich

$$\partial_t P(\vec{x},t) + \operatorname{div} \vec{j}(\vec{x},t) = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \left[V(\vec{x}) |\psi(\vec{x},t)|^2 \right] = -\frac{2}{\hbar} V_2(\vec{x}) P(\vec{x},t). \tag{33}$$

Integriert man diese Gleichung über den ganzen Raum, fällt der Term mit $\operatorname{div} \vec{j}$ wegen des Gaußschen Integralsatzes weg, weil die Wellenfunktion im Unendlichen verschwindet. Es ist also

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3 x P(\vec{x},t) = -\frac{2}{\hbar} \langle V_2 \rangle , \tag{34}$$

d.h. wegen des Imaginärteils im Potential, ist die Gesamtwahrscheinlichkeit nicht mehr erhalten wie bei einem hermiteschen Hamiltonoperator. Da wir $V_2 > 0$ vorausgesetzt haben, nimmt die Gesamtwahrscheinlichkeit mit der Zeit ab. Ein solcher Imaginärteil im Potential beschreibt also die Absorption von Teilchen.

Aufgabe 8 (3 Punkte)

Die Aussage ist **falsch**. Die Energieeigenzustände, also die Energieeigenfunktionen, die die **zeitunabhängige Schrödingergleichung** $\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$ erfüllen, wo E der dazugehörige Energieeigenwert ist, sind die **stationären** Zustände, für die die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x})|^2$ nicht von der Zeit abhängt.

Man kann aber ein Teilchen zu einer bestimmten Anfangszeit $t = t_0$ in jedem beliebigen Zustand, beschrieben durch irgendeine quadratintegrable Wellenfunktion $\psi_0(\vec{x})$, präparieren (zumindest im Prinzip)[2]. Der Zustand wird dann i.a. zeitabhängig sein, und die Zeitabhängigkeit ist durch die **zeitabhängige** Schrödingergleichung gegeben. Nur wenn man zu Beginn die Energie des Teilchens exakt bestimmt, befindet sich das Teilchen in einem Energieeigenzustand, der die zeitunabhängige Schrödingergleichung erfüllt.

[2]Wir vernachlässigen hier den subtilen Punkt, daß es sog. Superauswahlregeln geben kann, die bestimmte Superpositionen von Zuständen aus Symmetriegründen verbieten. Z.B. kann es in der nichtrelativischen Quantentheorie keine Superpositionen von Zuständen, die zu Teilchen unterschiedlicher Masse gehören, geben.