Prof. U. Mosel, Dr. H. van Hees **10. Juli 2009**

2. Klausur zur Quantenmechanik I - Lösungen

Aufgabe 1 (15 Punkte)

(a) $\hat{H}$ ist symmetrisch unter Drehungen um den Ursprung. Geeignete Koordinaten sind also Kugelkoordinaten, und die Energieeigenfunktionen können in der Form

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,\mathrm{Y}_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{1}$$

dargestellt werden.

Bemerkung: Tatsächlich ist die Symmetrie des harmonischen Oszillators noch größer, und die Energieeigenwerte sind entartet (ähnlich wie bei den wasserstoffartigen Atomen). Die Symmetriegruppe ist die U(3). Das erkennt man daran, daß der Hamiltonoperator in der Form

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{3} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega \mathbb{1} \tag{2}$$

mit den Absteigeoperatoren

$$\hat{a}_j = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\hat{x}_j + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}}\hat{p}_j \tag{3}$$

geschrieben werden kann. Offensichtlich ändert sich nämlich $\hat{H}$ nicht, wenn man neue Absteigeoperatoren

$$\hat{a}'_j = \sum_{k=1}^{3} U_{jk}\hat{a}_k \tag{4}$$

verwendet, wenn (U_{jk}) eine beliebige unitäre $\mathbb{C}^{3\times 3}$-Matrix ist.

(b) Geeignete Koordinaten sind Kugelkoordinaten, in denen der Hamiltonoperator in der Ortsdarstellung die Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\vec{l}}^2}{2\mu r^2} + \frac{\mu\omega^2}{2}r^2 \tag{5}$$

mit

$$\hat{\vec{l}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{6}$$

annimmt.

(c) In der Form (1) geschrieben lautet der Grundzustand

$$\psi_0(\vec{x}) = \frac{1}{a^{3/2}\pi^{3/4}}\exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right) = \frac{2}{a^{3/2}\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right)\mathrm{Y}_{00}(\vartheta, \varphi), \tag{7}$$

denn es gilt

$$\mathrm{Y}_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \tag{8}$$

Demnach sind $\vec{l}^2$ und m beide mit Sicherheit 0.

(d) Der angegebene erste angeregte Zustand läßt sich wie folgt in die Form (1) bringen

$$\psi_1(\vec{x}) = \frac{1}{a^{5/2}\pi^{3/4}} r \sin\vartheta \exp(\mathrm{i}\varphi) \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right) = -\frac{2\sqrt{2}}{a^{5/2}\sqrt{3}} r \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right) \mathrm{Y}_{11}(\vartheta,\varphi). \tag{9}$$

Es ist also diese Wellenfunktion eine Eigenfunktion von $\hat{\vec{l}}^2$ zu $l=1$, also zum Eigenwert $\vec{l}^2 = \hbar^2 1 \times (1+1) = 2\hbar^2$. Gleichzeitig ist sie Eigenfunktion von $\hat{l}_z$ mit $m=1$, d.h. zum Eigenwert $l_z = \hbar$.

Aufgabe 2 (5 Punkte)

Ψ_A kann nicht die gewünschte Wellenfunktion sein, denn der n-te Energieeigenzustand des harmonischen Oszillators (zum Energieeigehwert $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$) besitzt gleichzeitig die wohlbestimmte Parität $(-1)^n$, und Ψ_A ist keine Eigenfunktion des Raumspiegeloperatore $\hat{\mathcal{P}}$, der durch $\hat{\mathcal{P}}\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$ definiert ist. ψ_B hat zwar „gute Parität“, kann aber auch nicht korrekt sein, weil man x^2 nicht zu einer dimensionslosen Konstanten addieren kann. Der Ausdruck ist also gar nicht wohldefiniert. Außerdem sollte der zweite angeregte Zustand zwei Nullstellen aufweisen (Knotensatz), was für die gegebene Wellenfunktion nicht der Fall ist.

Aufgabe 3 (15 Punkte)

(a)

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_0}{\hbar}t\right)|0\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_1}{\hbar}t\right)|1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega}{2}t\right)|0\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega}{2\hbar}t\right)|1\rangle . \end{aligned} \tag{10}$$

(b)

$$\begin{aligned} P_0(t) &= |\langle 0 \,|\, \psi(t)\rangle|^2 = 1/2, \\ P_1(t) &= |\langle 1 \,|\, \psi(t)\rangle|^2 = 1/2, \\ P_n(t) &= |\langle n \,|\, \psi(t)\rangle|^2 = 0 \quad \text{für} \quad n \geq 2. \end{aligned} \tag{11}$$

(c) Diese Aufgabe löst man am bequemsten algebraisch mit Hilfe der Erzeuger- und Vernichteroperatoren. Es gilt

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \tag{12}$$

und

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle . \tag{13}$$

Aus (12) folgt

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \tag{14}$$

Zusammen mit der Orthonormiertheit der $|n\rangle$ ergibt dies mit Hilfe von (13)

$$\begin{aligned} \langle x\rangle(t) &= \langle \psi(t) \,|\, \hat{x}\psi(t)\rangle = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sin(\omega t), \\ \langle p\rangle(t) &= \langle \psi(t) \,|\, \hat{p}\psi(t)\rangle = -\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\cos(\omega t). \end{aligned} \tag{15}$$

Letzteres hätte man auch aus dem Ehrenfestschen Theorem herleiten können:

$$\langle p \rangle (t) = m \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle x \rangle (t). \tag{16}$$

(d) Die Wellenfunktion ist durch

$$\Psi(x,t) = \langle x \,|\, \psi(t) \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega t}{2}\right) \psi_0(x) - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega t}{2}\right) \psi_1(x) \tag{17}$$

gegeben. Es gilt für die n-te Energieeigenfunktion

$$\psi_n(x) = \langle x \,|\, n \,\rangle = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}2^n n!}} \mathrm{H}_n\left(\frac{x}{a}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right), \tag{18}$$

Dabei ist H_n das n-te Hermitesche Polynom und $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Setzen wir die Hermitepolynome $\mathrm{H}_0(x) = 1$ und $\mathrm{H}_1(x) = 2x$ ein, ergibt (17) für die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2a} + \frac{x^2}{a^3} - \sqrt{2}\sin(\omega t)\frac{x}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right). \tag{19}$$

Aufgabe 4 (5 Punkte)

Es gilt

$$\psi_{210}(\vec{x}) = R_{21}(r)\, \mathrm{Y}_{10}(\vartheta, \varphi). \tag{20}$$

Diese Wellenfunktion besitzt die Parität $(-1)^l = -1$ (denn es ist $l = 1$). Also ist $|\psi_{210}(\vec{x})|^2$ eine unter Raumspiegelungen gerade Funktion und folglich

$$\left\langle \vec{P} \right\rangle = -e \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3 x |\psi_{210}(\vec{x})|^2 \vec{x} = 0. \tag{21}$$

Aufgabe 5 (10 Punkte)

(a) Es gilt

$$\begin{aligned} \psi_{200}(\vec{x}) &= R_{20}(r)\, \mathrm{Y}_{00}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ \psi_{211}(\vec{x}) &= R_{21}(r)\, \mathrm{Y}_{11}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{24a^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\right) \sin\vartheta \exp(\mathrm{i}\varphi). \end{aligned} \tag{22}$$

Dabei ist der Bohrsche Radius $a = \hbar^2/(\mu e^2)$, wobei μ die reduzierte Masse des Proton-Elektronsystems und e die Elementarladung bezeichnen. Zusammen mit

$$\hat{P}_x = -e\hat{x} = -er\sin\vartheta\cos\varphi \tag{23}$$

ergibt dies das Übergangsmatrixelement

$$\left\langle 200 \left| \hat{P}_x \right| 211 \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3 x \psi^*_{200}(\vec{x}) \hat{P}_x \psi_{211}(\vec{x}) = -\frac{3}{\sqrt{2}} ea. \tag{24}$$

(b) Da die Kugelflächenfunktionen zu $m = 0$ nicht von φ abhängen, ist der Integrand für das Übergangsmatrixelement in diesem Fall $\propto \cos\varphi$, so daß das Integral über φ verschwindet und somit auch das Übergangsmatrixelement.

Aufgabe 6 (10 Punkte)

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

(b) Es gilt die Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \Psi(\vec{x},t) = \hat{H}\Psi(\vec{x},t). \tag{25}$$

Die Wahrscheinlichhkeitsdichte und der Wahrscheinlichkeitsstrom sind

$$P(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2, \quad \vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}[\psi^*(\vec{x},t)\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi(\vec{x},t)]. \tag{26}$$

Aus der Schrödingergleichung folgt

$$\begin{aligned}\partial_t P(\vec{x},t) &= [\partial_t\psi^*(\vec{x},t)]\psi(x,t) + \psi^*(\vec{x},t)\partial_t\psi(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\{[-\hat{H}\psi(\vec{x},t)]^*\psi(\vec{x},t) + \psi^*(\vec{x},t)\hat{H}\psi(\vec{x},t)\}\\ &= \frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}[\psi^*(\vec{x},t)\hat{H}\psi(\vec{x},t)].\end{aligned} \tag{27}$$

Weiter ist

$$\mathrm{div}\,\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\{[\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi]^*[\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi] + \psi^*(\vec{x},t)\Delta_{\vec{x}}\psi(\vec{x},t)\} = -\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\psi^*(\vec{x},t)\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(\vec{x},t)\right]. \tag{28}$$

Die beiden voranstehenden Gleichungen addiert ergibt schließlich

$$\partial_t P(\vec{x},t) + \mathrm{div}\,\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[V(\vec{x})|\psi(\vec{x},t)|^2\right] = -\frac{2}{\hbar}V_2(\vec{x})P(\vec{x},t). \tag{29}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}^3x P(\vec{x},t) = -\frac{2}{\hbar}\langle V_2\rangle, \tag{30}$$

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 7 (15 Punkte)

(a) Wir lösen das Eigenwertproblem für $\hat{\sigma}_y$. Das charakteristische Polynom liefert die Eigenwerte:

$$\det(\hat{\sigma}_y - \lambda\mathbb{1}) = \lambda^2 - 1 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1. \tag{31}$$

Die möglichen Meßwerte für s_y sind also $\pm\hbar/2$. Die dazugehörigen normierten Eigenvektoren lauten

$$\begin{aligned}|s_y = \hbar/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\mathrm{i}\,|s_z = \hbar/2\rangle + |s_z = -\hbar/2\rangle\right),\\ |s_y = -\hbar/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\,|s_z = \hbar/2\rangle - |s_z = -\hbar/2\rangle\right).\end{aligned} \tag{32}$$

(b)

$$
\begin{aligned}
P(s_y = \hbar/2) &= |\,\langle s_y = \hbar/2\,|\, s_z = \hbar/2\,\rangle\,|^2 = 1/2, \\
P(s_y = -\hbar/2) &= |\,\langle s_y = -\hbar/2\,|\, s_z = \hbar/2\,\rangle\,|^2 = 1/2.
\end{aligned}
\tag{33}
$$

(c) Es gibt keine gemeinsamen Eigenvektoren von $\hat{s}_z$ und $\hat{s}_y$; also lassen sich die entsprechenden Observablen auch nicht gleichzeitig scharf bestimmen.