

A. Chassé, W. Hergert

Einführung in die Quantenphysik

Aufgaben und Lösungen

23. Mai 2013

Springer

Vorwort

Im Buch „Einführung in die Quantenmechanik“ sind zu allen Unterkapiteln Übungsaufgaben angegeben worden. Der Schwierigkeitsgrad entspricht dabei zumeist dem im Buch angebotenen Stoff. Es ist zu empfehlen, die Übungsaufgaben nach dem Durcharbeiten des jeweiligen Kapitels möglichst ohne das Buch und weitere Hilfsmittel zu lösen und erst dann die Lösung nachzuschlagen.

In diesem Material sind noch einmal alle Aufgaben sowie die dazugehörigen Lösungen angegeben. Einige Aufgaben werden dabei durch ein *Mathematica* Notebook ergänzt. Die Notebooks haben dabei einerseits die Aufgabe zu zeigen, wie man *Mathematica* außer zu numerischen Rechnungen zum Umformen komplexer Gleichungen nutzen kann. Andererseits soll das Verständnis des Lösungsweges durch entsprechende grafische Darstellungen erleichtert werden. Ein Überblick über alle zum Buch und zum Übungsmaterial gehörende Notebooks wird im Anhang gegeben.

Die Übungsaufgaben werden ebenfalls durch einen Index erschlossen, so dass man über den Index nach Aufgaben zu einem bestimmten Problemkreis suchen kann.

Dieses Lösungsheft und die *Mathematica* Notebooks werden im Internet unter <http://www.springer-spektrum.de/Buch/978-3-658-00769-0/Einführung-in-die-Quantenphysik.html> bereitgestellt. Das Zusatzmaterial wird regelmäßig ergänzt und erweitert.

Lehrbücher [1, 2, 3, 4, 5] und spezielle Aufgabensammlungen bieten eine Vielfalt weiterer Aufgaben, die jedoch teilweise über den im Buch gebotenen Stoff hinausgehen und ebenfalls vertiefte mathematische Kenntnisse voraussetzen.

Inhaltsverzeichnis

1	Experimentelle und theoretische Grundlagen der Quantenphysik . . .	1
1.1	Das Teilchenbild	1
1.2	Das Wellenbild	3
1.3	Die Hohlraumstrahlung und Gitterschwingungen	5
1.4	Atomspektren	7
1.5	Teilchen-Wellen-Dualismus	10
2	Stationäre Zustände	13
2.1	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	13
2.2	Gebundene Zustände	15
2.3	Streuzustände	20
2.4	Näherungsverfahren	23
3	Darstellung und Zeitablauf physikalischer Größen	29
3.1	Darstellung physikalischer Größen	29
3.2	Zeitablauf physikalischer Größen	30
3.3	Quasistationäre Zustände	33
4	Das Wasserstoffatom	39
4.1	Das Wasserstoffspektrum	39
4.2	Der Bahndrehimpuls	42
4.3	Die radiale Bewegung	44
4.4	Der Elektronenspin	46
5	Drehimpulsoperatoren	49
A	Mathematica Notebooks	53
	Sachverzeichnis	55
	Literaturverzeichnis	56

Kapitel 1

Experimentelle und theoretische Grundlagen der Quantenphysik

1.1 Das Teilchenbild

1.1. Die Kathode einer Vakuumphotozelle werde mit monochromatischem blaugrünen Licht ($\lambda = 500\text{ nm}$) bestrahlt.

- a) Berechnen Sie die kinetische Energie der Photoelektronen, wenn die Austrittsarbeit $\Phi = 2,72 \cdot 10^{-19}\text{ J}$ beträgt.
- b) Was sind die Folgen einer Änderung der Lichtintensität? Begründen Sie Ihre Antwort!
- c) Für welche Wellenlängen des eingestrahnten Lichtes fließt kein Photostrom? Begründung!

a) Folgende Energiebilanz gilt:

$$hf = \Phi + E_{\text{kin}} \quad (1.1)$$

Das bedeutet, dass die Energie des Photons zum Teil zur Aufbringung der Austrittsarbeit W dient. Der verbleibende Energieanteil ist die kinetische Energie des Elektrons. Gleichung (1.1) kann, um die numerische Rechnung zu erleichtern, wie folgt umgeformt werden:

$$E_{\text{kin}} = \frac{\lambda_C}{\lambda} E_0 - \Phi \quad (1.2)$$

Dabei ist $\lambda_C = h/(mc)$ die Compton-Wellenlänge des Elektrons und $E_0 = mc^2$ die Ruheenergie des Elektrons. Somit erhält man

$$E_{\text{kin}} = \frac{2,426 \cdot 10^{-12}\text{ m}}{5 \cdot 10^{-7}\text{ m}} 0,511\text{ MeV} - \frac{2,72 \cdot 10^{-19}\text{ J}}{1,60218 \cdot 10^{-19}\text{ J/eV}} \quad (1.3)$$

$$= 0,782\text{ eV} . \quad (1.4)$$

- b) Eine Erhöhung der Beleuchtungsstärke bewirkt eine größere Anzahl einfallender Photonen. Dadurch werden mehr Photoelektronen austreten.
- c) Je größer die Wellenlänge, desto kleiner ist die Energie des Photons. Wenn die Wellenlänge also zu groß wird, kann die Austrittsarbeit nicht mehr überwunden werden. Die Grenzwellenlänge ergibt sich mit der Bedingung $E_{\text{kin}} = 0$ aus (1.2) zu:

$$\lambda_G = \frac{\lambda_C E_0}{W} = 2,42631 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot \frac{0,511 \text{ MeV}}{1,69769 \text{ eV}} = 730,3 \text{ nm} . \quad (1.5)$$

1.2. Ein Photon habe eine Wellenlänge, die gerade genau so groß ist wie die Compton-Wellenlänge. Es trifft auf ein ruhendes Elektron. Dabei beträgt die Richtungsänderung des Photons gerade 90° . Welche Wellenlänge und welche Energie hat das gestreute Photon? Welche Energie wird auf das ruhende Elektron übertragen?

Die Wellenlängenänderung bei der Comptonstreuung ist gegeben durch

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos \vartheta) . \quad (1.6)$$

Bei einem Streuwinkel von $\vartheta = 90^\circ$ und der Wellenlänge $\lambda = \lambda_C$ für das einfallende Photon erhält man aus (1.6) die Wellenlänge $\lambda' = 2\lambda_C$ für das gestreute Photon. Ein Photon, dessen Wellenlänge der Comptonwellenlänge des Elektrons entspricht, besitzt eine Energie die gleich der Ruheenergie des Elektrons ist ($hc/\lambda_C = mc^2 = E_0$). Die Energiebilanz ist somit

$$\begin{aligned} E_0 &= E'_{\text{Photon}} + E'_{\text{Elektron}} \\ &= \frac{hc}{2\lambda_C} + E'_{\text{Elektron}} = \frac{E_0}{2} + E'_{\text{Elektron}} \end{aligned} \quad (1.7)$$

Somit besitzen Elektron und Photon nach dem Streuprozess jeweils die Energie $E_0/2$.

1.3. Welche Energie wurde bei einem Compton-Prozess an die Elektronen abgegeben, wenn die Frequenz der gestreuten Strahlung $f' = 0,99 \cdot 10^{19} \text{ Hz}$ und die der ursprünglichen Strahlung $f = 1,00 \cdot 10^{19} \text{ Hz}$ beträgt?

Während des Comptonprozesses gilt Energieerhaltung, d.h. die Differenz der Energie von Photon und gestreutem Photon wird auf das Elektron übertragen.

$$\begin{aligned} E_{\text{Elektron}} &= \Delta E_{\text{Photon}} = h\Delta f = \frac{\lambda_C \Delta f}{c} \cdot E_0 \\ &= \frac{2,42631 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot 10^{17} \text{ Hz}}{2,9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}} \cdot 0,511 \text{ MeV} = 413,57 \text{ eV} . \end{aligned} \quad (1.8)$$

Bei der Rechnung wurde die Gleichung wieder so umgeformt, dass elementare Längen und Energien (Comptonwellenlänge, Ruheenergie des Elektrons) auftauchen.

1.2 Das Wellenbild

1.4. Untersucht wird eine polykristalline Graphit-Probe. Der Netzebenenabstand in den Graphit-Kristalliten ist $d = 2,13 \cdot 10^{-10}$ m. Mit Hilfe einer Elektronenbeugungsröhre können die Interferenzen von Elektronen an einem Leuchtschirm sichtbar gemacht werden. Elektronen treten aus der glühenden Kathode aus und werden durch die Spannung U beschleunigt. Sie treten durch ein Loch in der Anode und erzeugen auf dem Leuchtschirm (Glaskolben) einen Lichtfleck. Bringt man die Graphit-Probe zwischen Anode und Leuchtschirm, werden Interferenzringe beobachtet.

- a) Leiten Sie eine Beziehung zwischen de-Broglie-Wellenlänge, Netzebenenabstand, Radius r der Interferenzringe und dem Abstand l der Probe vom Leuchtschirm ab. Es gilt $l \gg r$.
- b) Wie groß war die Beschleunigungsspannung, wenn bei Graphit-Kristalliten in erster Ordnung ein Ringradius von $r = 9,0$ mm auftrat. Der Abstand der Kristallite von der Beobachtungsebene war $l = 18$ cm. Relativistische Rechnung!

- a) Nach der Bragg-Bedingung gilt für die erste Ordnung

$$2d \sin \vartheta = \lambda . \quad (1.10)$$

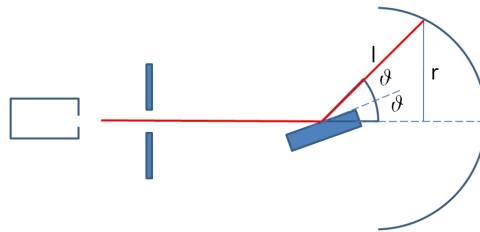


Abb. 1.1 Elektronenbeugung in einer Elektronenstrahlröhre .

Entsprechend Abb. 1.1 beträgt der Ablenkwinkel aus der Einfallsrichtung 2ϑ . Demzufolge gilt: $\sin 2\vartheta = r/l$, unter der Voraussetzung $l \gg r$ also $2\vartheta = r/l$.

$$\begin{aligned} \frac{r}{l} &\approx \frac{\lambda}{d} \\ \lambda &= \frac{r \cdot d}{l} . \end{aligned} \quad (1.11)$$

- b) Aus den gegebenen Daten kann man über (1.11) mit der de-Broglie-Beziehung den Impuls berechnen. Über die relativistische Energie-Impuls-Beziehung folgt

dann die kinetische Energie der Elektronen und damit die Beschleunigungsspannung. Für die kinetische Energie ergibt sich:

$$E_{kin} = E_0 \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda_{Cl}}{r d} \right)^2} - 1 \right) \quad (1.12)$$

$$E_{kin} = 511 \text{ keV} \left(\sqrt{1 + \frac{2,42 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot 0,18 \text{ m}}{0,009 \text{ m} \cdot 2,13 \cdot 10^{-10} \text{ m}}} - 1 \right)$$

$$E_{kin} = 13,02 \text{ keV} . \quad (1.13)$$

Die Beschleunigungsspannung müsste also etwa 13 keV betragen.

1.5. Zeigen Sie, dass man die Wellenlänge eines Elektrons, das in einem elektrischen Feld (Spannung U) beschleunigt wurde, für den Fall $|eU| \ll mc^2$ näherungsweise durch den folgenden Ausdruck beschreiben kann:

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{2m|eU|}} \left(1 - \frac{|eU|}{4mc^2} \right). \quad (1.14)$$

Der Energiesatz für den relativistischen Fall lautet

$$|eU| + mc^2 = c \sqrt{m^2 c^2 + p^2}. \quad (1.15)$$

Aus $\lambda = h/p$ folgt damit

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m|eU|}} \frac{1}{\sqrt{1 + |eU|/(2mc^2)}} \approx \frac{h}{\sqrt{2m|eU|}} \left(1 - \frac{|eU|}{4mc^2} \right). \quad (1.16)$$

Im letzten Schritt wurde $1/\sqrt{1+x} \approx 1 - x/2$ für $x \ll 1$ angenommen.

1.6. Elektronen mit einer kinetischen Energie von a) 5 eV, b) 100 eV und c) 1000 eV treffen auf die (111)-Oberfläche eines Ni Einkristalls (Gitterkonstante $a = 0.352 \text{ nm}$). Prüfen Sie, ob die Elektronen am Kristall gebeugt werden oder nicht.

Der Netzebenenabstand ergibt sich im kubischen Kristallsystem aus

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \Rightarrow d_{111} = \frac{1}{3} \sqrt{3} a = 0,203 \text{ nm} . \quad (1.17)$$

Die de-Broglie-Wellenlänge der Elektronen ist für a) $\lambda = 0,548 \text{ nm}$, b) $\lambda = 0,123 \text{ nm}$ und für c) $\lambda = 0.039 \text{ nm}$ (siehe Tabelle 1.3 in Kapitel 1.2.5). Nach der Bragg-Beziehung kann man keine Beugung beobachten, wenn für die niedrigste Ordnung $\lambda > 2d_{111}$ gilt. Demzufolge ist für den Fall a) keine Beugung möglich.

1.3 Die Hohlraumstrahlung und Gitterschwingungen

1.7. Es sollen Erde, Venus und Jupiter im Strahlungsgleichgewicht mit der Sonne betrachtet werden. Die mittleren Temperaturen können für die Erde mit $14,7^\circ\text{C}$, für die Venus mit 460°C und für den Jupiter mit -151°C angenommen werden. Welche mittleren Temperaturen ergeben sich im Vergleich zu diesen Werten aus der Diskussion des Strahlungsgleichgewichts? Welche Prozesse könnten zu einer Abweichung der berechneten Werte von den tatsächlichen Mittelwerten führen? (Strahlungsleistung der Sonne $\bar{N} = 3,845 \cdot 10^{26} \text{ W}$)

Planet	Abstand zur Sonne AE	Radius km
Erde	1,00	6378
Venus	0,72	6052
Jupiter	5,20	71398

Tabelle 1.1 Mittlerer Sonnenabstand und Äquatorradius der Planeten (1 AE = $149,6 \cdot 10^6 \text{ km}$).

Nach dem Kirchhoffschen Gesetz absorbiert ein schwarzer Körper die auf ihn einfallende Strahlung vollständig und strahlt diese auch wieder vollständig ab (Absorptions- und Emissionsgrad sind jeweils 1). Die gesamte abgestrahlte Leistung eines schwarzen Körpers pro Flächeneinheit, ist durch das Stefan-Boltzmannsche Strahlungsgesetz

$$u(T) = \sigma T^4, \quad \sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{J}}{\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}^4} \quad (1.18)$$

gegeben. Es sei nun R der Abstand des Planeten von der Sonne sowie r dessen Radius. Für das Strahlungsgleichgewicht ergibt sich somit

$$\begin{aligned} \frac{\bar{N}}{4\pi R^2} \pi r^2 &= 4\pi r^2 \sigma T^4 \\ \frac{\bar{N}}{4\pi R^2} &= E_S = 4\sigma T^4 \\ T &= \sqrt[4]{\frac{\bar{N}}{16\pi\sigma R^2}}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Dabei ist die von der Sonne bestrahlte Fläche πr^2 und die Fläche die abstrahlt (Planetenoberfläche) $4\pi r^2$. Die Größe E_S wird Solarkonstante des jeweiligen Planeten genannt. Aus den gegebenen Werten ergibt sich für die Erde

$$T = \sqrt[4]{\frac{3,845 \cdot 10^{26}}{16\pi \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot (149,6 \cdot 10^9)^2}} \text{ K}$$

$$T = 5,5^\circ\text{C} . \quad (1.20)$$

In analoger Weise erhält man für die Venus eine Temperatur von $55,2^\circ\text{C}$ und für den Jupiter von -151°C .

Die tatsächliche mittlere Temperatur der Erde ist $14,7^\circ\text{C}$. Die zusätzliche Wärme stammt aus dem Erdinneren (Erdmagma, radioaktive Prozesse). Die mittlere Venus-temperatur beträgt am Boden 460°C . Der große Unterschied zum berechneten Wert wird hier durch den Treibhauseffekt in der Venusatmosphäre (Die Venusatmosphäre besteht hauptsächlich aus Kohlendioxid.) hervorgerufen. Die tatsächliche Jupiter-temperatur beträgt -120°C . Beim Jupiter spielen gravitative Effekte eine Rolle.

1.8. Gemessen wird die Strahlungsintensität in Abhängigkeit von der Wellenlänge. Die Wellenlänge, bei der das Maximum der emittierten Strahlung liegt, erlaubt es, auf die Temperatur zu schließen. Mit dieser Methode kann man die Oberflächentemperaturen von Sternen oder Temperaturen anderer kosmischer Objekte abschätzen. Messungen an drei kosmischen Objekten liefern für die Lage des Maximums Wellenlängen von: $501,3 \text{ nm}$, $9,11 \mu\text{m}$, $1049 \mu\text{m}$. Berechnen Sie die zugehörigen Temperaturen. Um welche Objekte handelt es sich?

Betrachtet man den Energiefluss pro Wellenlängenintervall, so ergibt sich für das Maximum nach dem Planckschen Strahlungsgesetz die Bedingung:

$$\frac{x}{1 - e^{-x}} - 5 = 0 \quad , \quad x = \frac{hc}{\lambda k_B T} . \quad (1.21)$$

Man erhält aus der transzendenten Gleichung $x = 4.96511$ und damit das Wiensche Verschiebungsgesetz in der Wellenlängendarstellung zu:

$$\frac{hc}{\lambda k_B T} = x_{\max} \simeq 4,96511 . \quad (1.22)$$

Damit erhält man für die gesuchten Temperaturen

$$T = \frac{hc}{4,96511 \lambda k_B} = \frac{\lambda_C}{\lambda} \frac{E_0}{4,96511 \cdot k_B} . \quad (1.23)$$

Hierbei ist λ_C wieder die Comptonwellenlänge des Elektrons und E_0 dessen Ruheenergie. Die entsprechenden Temperaturen sind dann $2,76 \text{ K}$, $318,08 \text{ K}$, $5780,51 \text{ K}$. Die erste Temperatur ist die der kosmischen Hintergrundstrahlung, die zweite Temperatur entspricht der Oberflächentemperatur der Erde. Bei der dritten Temperatur handelt es sich um die Oberflächentemperatur der Sonne.

1.9. Aufgrund der Sonneneinstrahlung erreicht die Erde ein Wärmestrom von $E_S = 1,37 \text{ kW/m}^2$. Wie groß ist die Oberflächentemperatur der Sonne? (Abstand Sonne - Erde (Mittelpunkte) $r_{ES} = 149,6 \cdot 10^9 \text{ m}$, Radius der Sonne $r_S = 696 \cdot 10^6 \text{ m}$)

E_S ist die Solarkonstante der Erde. Für die Wärmestromdichte an der Sonnenoberfläche ergibt sich bei Benutzung des Stefan-Boltzmann Gesetzes

$$u = \frac{E_S 4\pi r_{SE}^2}{4\pi r_s^2} = E_S \left(\frac{r_{SE}}{r_s} \right)^2 = \sigma T^4. \quad (1.24)$$

Damit erhält man also für die gesuchte Temperatur

$$\begin{aligned} T &= \sqrt[4]{\frac{E_S}{\sigma} \left(\frac{r_{SE}}{r_s} \right)^2} \\ &= \sqrt[4]{\frac{1,37 \text{ kW/m}^2}{5,67 \cdot 10^{-11} \text{ kW/m}^2/\text{K}^4} \left(\frac{149,6 \cdot 10^9 \text{ m}}{696 \cdot 10^6 \text{ m}} \right)^2} \\ T &= 5780 \text{ K}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

1.4 Atomspektren

1.10. Betrachten Sie ein Teilchen welches sich in folgendem Potential bewegt:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{2\pi} \right) x, & x > 0 \end{cases} \quad (1.26)$$

Hierbei ist a eine Konstante. Ermitteln Sie unter Benutzung der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregel

$$\oint p \, dx = nh, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.27)$$

die erlaubten Energien.

Im vorgegeben Potential ist der Impuls im klassisch erlaubten Bereich durch

$$p = \pm \sqrt{2m \left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{2\pi} \right) x \right)} \quad (1.28)$$

gegeben, wobei die Vorzeichen entsprechend der Bewegung in $\pm x$ -Richtung gelten. Für die klassischen Umkehrpunkte gilt: $x_- = 0, x_+ = 2mE(2\pi)/(\hbar^2 a)$. Das Phasenintegral kann ausgewertet werden.

$$\oint p \, dx = 2 \int_0^{x_+} dx \sqrt{2m \left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{2\pi} \right) x \right)} = 2\sqrt{2mE} \int_0^{x_+} dx \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{2mE} \left(\frac{a}{2\pi} \right) x}$$

$$h(n + n_0) = 2\sqrt{2mE} \frac{4\pi m E}{\hbar^2 a} \int_0^1 d\xi \sqrt{1 - \xi} \quad (1.29)$$

Dies liefert dann für die Energiewerte

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3a}{4} \right)^{2/3} (n + n_0)^{2/3} . \quad (1.30)$$

1.11. Betrachten Sie ein Teilchen, welches senkrecht aus einer Höhe H auf eine waagerechte Ebene fällt und von der Ebene elastisch reflektiert wird. Ermitteln Sie unter Benutzung der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln die erlaubten Energien E_n und Höhen H_n .

In diesem Problem ist die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße (nur elastische Prozesse werden betrachtet). Zur Zeit $t = 0$ wird die Masse m aus der Höhe H mit dem Anfangsimpuls $p = 0$ fallen gelassen. Damit ergibt sich folgende Energiebilanz:

$$E = \frac{p^2}{2m} + mgz = mgH . \quad (1.31)$$

Aus (1.31) folgt damit für den Impuls:

$$p = \pm \sqrt{2m(E - mgz)} . \quad (1.32)$$

Führt man dimensionslose Größen für den Impuls $\tilde{p} = p/\sqrt{2mE}$ und die Höhe $\tilde{z} = z/H$ ein, ergibt sich für die Bahn in der Phasenebene $\tilde{p} = \sqrt{1 - \tilde{z}}$. Somit ergibt sich für die Auswertung der Bohr-Sommerfeld-Bedingung

$$\oint p(z) dz = 2 \int_0^H \sqrt{2m(E - mgz)} dz = 2\sqrt{2mEH} \int_0^1 \sqrt{1 - \tilde{z}} d\tilde{z} = \frac{4}{3} \sqrt{2mE} H . \quad (1.33)$$

Damit ergibt sich also:

$$\oint p(z) dz = \frac{4}{3} \sqrt{2mEH} = h(n + n_0) . \quad (1.34)$$

Da entsprechend der Energiebilanz (1.31) die Gesamtenergie durch die Fallhöhe ausgedrückt werden kann erhält man durch Umstellen:

$$H = \left(\frac{3}{4\sqrt{2}} \right)^{2/3} \frac{\hbar^{2/3}}{g^{1/3} m^{2/3}} (n + n_0)^{2/3} . \quad (1.35)$$

Setzt man Zahlen ein, so wird ein ΔH (Abstand zweier quantisierter Höhen) von der Größe eines Bohrschen Wasserstoffradius erreicht, wenn das Teilchen eine Masse

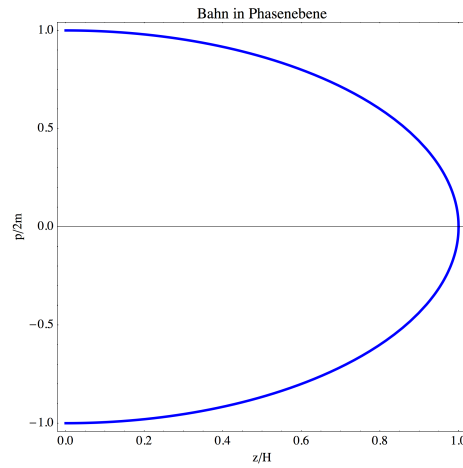


Abb. 1.2 Bahn der Masse in der Phasenebene.

von 10^{-18} kg hat!

1.12. Mit Hilfe der Bohr-Sommerfeldschen Quantenbedingung gebe man an, mit welcher Potenz von n die Energie E_n im Potential

$$V = V_0 \left(\frac{x}{x_0} \right)^\beta \quad (1.36)$$

anwächst.

Im Potential (1.36) können gebundene Zustände nur für $\beta = 2k$, $k = 1, 2, \dots$ existieren. Die Hamiltonfunktion ergibt sich zu:

$$H = E = \frac{p^2}{2m} + V_0 \left(\frac{x}{x_0} \right)^\beta. \quad (1.37)$$

Für die klassischen Umkehrpunkte erhält man

$$x_{\pm} = \pm \left[\frac{Ex_0^\beta}{V_0} \right]^{1/\beta} = \pm \left[\frac{E}{V_0} \right]^{1/\beta} x_0. \quad (1.38)$$

Damit kann man nun das Phasenintegral auswerten:

$$\begin{aligned}
\oint p \, dx &= 2 \int_{x_-}^{x_+} dx \left[2m \left(E - V_0(x/x_0)^\beta \right) \right]^{1/2} \\
&= 4 \int_0^{x_+} dx \left[2m \left(E - V_0(x/x_0)^\beta \right) \right]^{1/2} \\
&= 4\sqrt{2mE} \, x_+ \int_0^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^\beta} .
\end{aligned} \tag{1.39}$$

Dabei wurde die Substitution $\xi = x/x_+$ verwendet. Aus (1.38) ergibt sich mit der Bohr-Sommerfeldschen Quantenbedingung (1.39)

$$\sqrt{E_n} \sqrt[\beta]{E_n} \sim n \quad \Rightarrow \quad E_n \sim n^{2\beta/(2+\beta)} . \tag{1.40}$$

Für den harmonische Oszillator ($\beta = 2$) ergibt sich damit $E_n \sim n$.

1.5 Teilchen-Wellen-Dualismus

1.13. Ein Elektron e^- und ein Positron e^+ , die praktisch ruhen ($\mathbf{p}_{e^-} = \mathbf{p}_{e^+} = 0$) erzeugen bei einer Paarvernichtung zwei Lichtquanten γ und γ' . Man berechne den Impuls von γ und γ' . Dessen Betrag gebe man als Funktion der Compton-Wellenlänge an.

Nach dem Impulserhaltungssatz müssen die Impulse von γ und γ' gleich groß und entgegengesetzt gerichtet sein: $\mathbf{p}_\gamma = -\mathbf{p}_{\gamma'}$. Die Gesamtenergie der Teilchen

$$E = m_{e^+}c^2 + m_{e^-}c^2 = 2mc^2 \quad , \quad m_{e^+} = m_{e^-} = m \tag{1.41}$$

wird in die der beiden γ -Quanten umgewandelt.

$$\begin{aligned}
2mc^2 &= hf + hf' = 2hf \quad , \quad p_\gamma = \frac{hf}{c} \\
p_\gamma &= mc = mc \cdot \frac{h}{h} = \frac{h}{h/(mc)} \\
p_\gamma &= \frac{h}{\lambda_C} .
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Die Wellenlänge der γ -Quanten entspricht der Compton-Wellenlänge der Elektronen.

1.14. Im Bohrschen Atommodell bewegen sich Elektronen strahlungsfrei auf Kreisbahnen mit

$$r_n = a_0 n^2 \quad \text{und} \quad p_n = \frac{\hbar}{a_0 n} \tag{1.43}$$

($n = 1, 2, \dots$). Nehmen Sie an, dass für die Genauigkeit der Ortsbestimmung gilt:

$$\Delta x \approx r_{n+1} - r_n . \tag{1.44}$$

Schätzen Sie mit Hilfe der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation $(\Delta x) \cdot (\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}$ den relativen Fehler $\Delta p/p$ für die Unbestimmtheit des Impulses in Abhängigkeit von der Quantenzahl n ab.

Aus der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation folgt

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{2} \frac{1}{a_0(2n+1)}. \quad (1.45)$$

Damit erhält man für den relativen Fehler:

$$\frac{\Delta p}{p} \approx \frac{n/2}{2n+1}. \quad (1.46)$$

Die Unbestimmtheit des Impulses wird für wachsendes n größer. Für $n = 1$ liegt der Fehler bei ca. 16 %; für $n \rightarrow \infty$ bei 25 %.

1.15. Wie groß muss die kinetische Energie von Elektronen sein, damit man mit ihnen die Ladungsverteilung im Proton (Ausdehnung 10^{-15} m) untersuchen kann?

Eine Struktur des Protons ist nur beobachtbar, wenn die Wellenlänge des Elektrons unter 10^{-15} m liegt. Aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung und der de-Broglie-Beziehung folgt:

$$E_{\text{kin}} = c \sqrt{m^2 c^2 + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2} - mc^2. \quad (1.47)$$

Man erhält $E_{\text{kin}} \approx 1,24 \text{ GeV}$.

Kapitel 2

Stationäre Zustände

2.1 Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

2.1. Man berechne den Operator, der hermitesch konjugiert zu

$$\hat{A} = \exp\left(i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \quad (2.1)$$

ist.

Hinweis: Man entwickle die Exponentialfunktion in eine Reihe!

Die Reihenentwicklung ist durch

$$\exp\left(i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} \quad (2.2)$$

gegeben. Nun wird der hermitesch konjugierte Operator zu $\partial/\partial \varphi$ berechnet. ψ_1, ψ_2 sind Funktionen von φ .

$$\begin{aligned} \left(\psi_1, \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_2\right) &= \psi_1 \psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_1, \psi_2\right), \\ \left(\psi_1, \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} \psi_2\right) &= (-1)^n \left(\frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} \psi_1, \psi_2\right). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Somit ergibt sich für den hermitesch konjugierten Operator

$$\left[\exp\left(i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right]^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha^*)^n}{n!} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} = \exp\left(i\alpha^* \frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \quad (2.4)$$

Der Operator ist selbstadjungiert, wenn $\alpha = \alpha^*$ ist.

2.2. In Halbleitersupergittern bewegen sich die Elektronen in Wachstumsrichtung des Gitters (z -Richtung) in einem Potential $V(z)$, welches einer Aneinanderreihung

von Potentialtöpfen entspricht. In x - und y -Richtung bewegen sich die Elektronen frei. Vereinfachen Sie die Lösung der Schrödingergleichung.

Das Potential ist nicht zeitabhängig. Man kann die Zeit separieren und muss nur noch die zeitunabhängige Schrödingergleichung betrachten. Die Vereinfachung des Problems kann wegen $V(\mathbf{r}) = V(z)$ mittels eines Separationsansatzes für die Wellenfunktion erreicht werden.

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z) \quad (2.5)$$

Mit Ansatz (2.5) erhält man aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

drei gewöhnliche Differentialgleichungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_1(x) = E_1 \varphi_1(x) , \quad (2.7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \varphi_2(y) = E_2 \varphi_2(y) , \quad (2.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \varphi_3(z) + V(z) \varphi_3(z) = E_3 \varphi_3(z) . \quad (2.9)$$

Die Energien in (2.7) -(2.9) ergeben die Energie in (2.6): $E = E_1 + E_2 + E_3$.

2.3. Vorgegeben sind die Orthonormalsysteme $\varphi_n^A(\mathbf{r})$, $\varphi_n^B(\mathbf{r})$, $\varphi_n^C(\mathbf{r})$, wobei $\varphi_n^C(\mathbf{r})$ das Eigensystem des Operators \hat{C} ist. Zeigen Sie, dass die Spur des Operators

$$\text{Tr } \hat{C} = \sum_n (\varphi_n^A, \hat{C} \varphi_n^A) = \sum_n (\varphi_n^B, \hat{C} \varphi_n^B) = \sum_n c_n \quad (2.10)$$

unabhängig vom Orthonormalsystem ist, welches zur Berechnung der Spur verwendet wurde.

Man kann die Behauptung beweisen, wenn man die Vollständigkeitsrelationen der Orthonormalsysteme heranzieht. So gilt für $\varphi_n^A(\mathbf{r})$, $\varphi_n^B(\mathbf{r})$:

$$\sum_n \varphi_n^A(\mathbf{r}) \varphi_n^{A*}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.11)$$

$$\sum_n \varphi_n^B(\mathbf{r}) \varphi_n^{B*}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (2.12)$$

Man kann (2.10) umschreiben zu

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{C} &= \sum_n (\varphi_n^A, \hat{C} \varphi_n^A) \\ &= \sum_n \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \int d^3 \mathbf{r}'' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_n^{A*}(\mathbf{r}') \hat{C} \varphi_n^A(\mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') . \end{aligned} \quad (2.13)$$

In (2.13) setzt man nun die Vollständigkeitsrelation (2.12) ein. Man erhält dann

$$\text{Tr } \hat{C} = \sum_{n,l,k} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \int d^3 \mathbf{r}'' \varphi_l^B(\mathbf{r}') \varphi_l^{B*}(\mathbf{r}) \varphi_n^A(\mathbf{r}') \hat{C} \varphi_n^A(\mathbf{r}'') \varphi_k^B(\mathbf{r}) \varphi_k^{B*}(\mathbf{r}'') \quad (2.14)$$

Umsortieren in (2.14) führt zu

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{C} &= \sum_{l,k} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \int d^3 \mathbf{r}'' \varphi_k^{B*}(\mathbf{r}'') \left(\sum_n \varphi_n^A(\mathbf{r}'') \varphi_n^{A*}(\mathbf{r}') \right) \varphi_l^B(\mathbf{r}') \times \\ &\quad \times \varphi_l^{B*}(\mathbf{r}) \hat{C} \varphi_k^B(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{l,k} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \varphi_k^{B*}(\mathbf{r}') \varphi_l^B(\mathbf{r}') \varphi_l^{B*}(\mathbf{r}) \hat{C} \varphi_k^B(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{l,k} (\varphi_k^B, \varphi_l^B) (\varphi_l^B, \hat{C} \varphi_k^B) \\ &= \sum_l (\varphi_l^B, \hat{C} \varphi_l^B) . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dabei wurde die Vollständigkeitsrelation (2.11) sowie die Orthogonalität des Systems φ_n^B ausgenutzt. Somit ist die Spur unabhängig vom verwendeten Orthonormalsystem. Benutzt man $\varphi_n^C(\mathbf{r})$ erhält man:

$$\text{Tr } \hat{C} = \sum_n (\varphi_n^C, \hat{C} \varphi_n^C) = \sum_n (\varphi_n^C, \varphi_n^C) c_n = \sum_n c_n . \quad (2.16)$$

2.2 Gebundene Zustände

2.4. Vorgegeben ist das Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -(a+b) \\ 0 & -(a+b) \leq x \leq -b \\ V_0 & -b < x < +b \\ 0 & +b \leq x \leq +(a+b) \\ \infty & x > +(a+b) \end{cases} .$$

Wie groß muss die Schwelle $V_0 > 0$ gewählt werden, damit die Energie des Grundzustandes $E_0 = V_0$ wird?

Das Potential ist symmetrisch. Die Wellenfunktionen können daher nur symmetrisch oder antisymmetrisch sein. Der Grundzustand ist symmetrisch und knotenfrei. Aus diesem Grunde muss die Wellenfunktion im Bereich $|x| \leq b$ konstant sein. Die Teile der Grundzustandswellenfunktion im vorgegebenen Potential im Bereich $-(a+b) \leq x \leq -b$ und $b \leq x \leq (a+b)$ bilden zusammen die Grundzustandswellenfunktion in einem Topf mit unendlich hohen Wänden der Breite $2a$. Die Energieniveaus in einem solchen Topf sind gegeben durch

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 (n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

Nach (2.17) muss also die Schwellenhöhe

$$V_0 = E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 \quad (2.18)$$

sein. Die Aufgabe wird in **MA1** weiter diskutiert. Durch numerisches Integrieren erhält man die Wellenfunktionen bei Variation der Schwellenhöhe die in Abb. (2.1) gezeigte Verläufe.

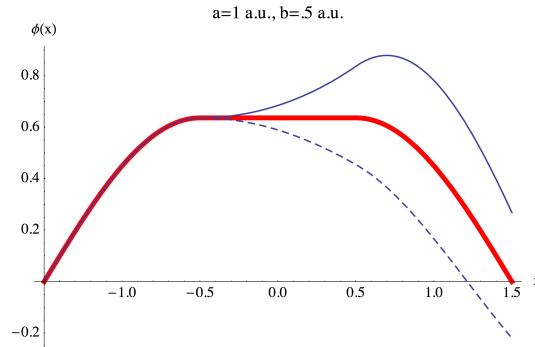


Abb. 2.1 Lösungen der Schrödingergleichung bei verschiedener Schwellenhöhe: $V_0 = E_0$ (rote Kurve), $V_0 < E_0$ (gestrichelte Kurve), $V_0 > E_0$ (durchgezogene Kurve). Für das Beispiel wurden gewählt: $a = 1 \text{ a.u.}$, $b = 0.5 \text{ a.u.}$

2.5. Durch Rückführung auf einen bekannten Fall berechne man die Eigenzustände im Potential

$$V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 \left[\left(x + \frac{a}{2} \right)^2 + \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] .$$

Das Potential lässt sich umschreiben zu:

$$V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 \left[\left(x + \frac{a}{2} \right)^2 + \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] = \frac{m}{2} \omega^2 \left(2x^2 + \frac{a^2}{2} \right) . \quad (2.19)$$

Das Potential (2.19) führt auf die Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} (\sqrt{2}\omega)^2 x^2 \right\} \varphi(x) = \left(E - \frac{m\omega^2 a^2}{4} \right) \varphi(x) . \quad (2.20)$$

Gleichung (2.20) stellt die Schrödingergleichung für einen harmonischen Oszillator mit der Frequenz $\sqrt{2}\omega$ dar, dessen Energieniveaus um $m\omega^2 a^2/4$ energetisch verschoben sind. Also kann man die Energieniveaus ohne Rechnung sofort angeben:

$$E_n = \hbar\sqrt{2}\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{m\omega^2 a^2}{4} . \quad (2.21)$$

2.6. Man stelle die transzendente Gleichung (Determinantenform!) zur Berechnung der Energie-Eigenwerte in einer Doppelmulde aus zwei rechteckigen Potentialtöpfen auf:

- Potentialtopf 1: $(a_1, b_1 > 0, V_1 < 0)$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x < -(a_1 + b_1) \\ V_1 & -(a_1 + b_1) \leq x \leq -b_1 \\ 0 & -b_1 < x < 0 \end{cases}$$

- Potentialtopf 2: $(a_2, b_2 > 0, V_2 < 0)$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x < b_2 \\ V_2 & b_2 \leq x \leq (b_2 + a_2) \\ 0 & (b_2 + a_2) < x < \infty \end{cases}$$

Diskutieren Sie die folgenden Grenzfälle:

- $b_1 = b_2 = 0, a_1 = a_2 = a, V_1 = V_2 = V_0$ (einfacher Potentialtopf)
- $b_1 = b_2 = b/2, a_1 = a_2 = a, V_1 = V_2 = V_0$ (symmetrischer Grenzfall).

Zeigen Sie, dass sich die Eigenwerte zu den symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zuständen im Fall b) dann aus

$$\begin{aligned} \tanh\left(\frac{b\kappa}{2}\right) &= \frac{k/\kappa \tan(ka) - 1}{\kappa/k \tan(ka) + 1} \\ \tanh\left(\frac{b\kappa}{2}\right) &= \frac{\kappa/k \tan(ka) + 1}{k/\kappa \tan(ka) - 1} \end{aligned}$$

berechnen lassen. Dabei wurde verwendet: $E = -\hbar^2 \kappa^2 / (2m), E - V_0 = \hbar^2 k^2 / (2m)$.

Das in der Aufgabenstellung vorgegebene Potential ist nicht symmetrisch, so dass von der Symmetrie zur Reduktion des Rechenaufwandes nicht Gebrauch gemacht werden kann. Das Potential wird in 5 Bereiche aufgeteilt:

- Bereich I $x \leq -(a_1 + b_1)$
 Bereich II $-(a_1 + b_1) \leq x \leq -b_1$
 Bereich III $-b_1 \leq x \leq b_2$
 Bereich IV $b_2 \leq x \leq (b_2 + a_2)$
 Bereich V $x \geq (b_2 + a_2)$

Für gebundene Zustände muss die Energie $E < 0$ sein. Wir führen wieder folgende Abkürzungen ein:

$$\kappa = -\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, k_1 = -\sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}}, k_2 = -\sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}}, \quad (2.22)$$

(vergleiche Abschnitt 2.2.1 im Buch) ein. In den Abschnitten I,III,V liegen exponentiell ansteigende oder abklingende Lösungen vor (κ). In den Abschnitten II und IV liegen oszillierende Lösungen vor (k_1, k_2). Die Ansätze für die Wellenfunktionen in den einzelnen Bereichen lauten:

$$\varphi_1(x) = A_2 e^{\kappa x} \quad (2.23)$$

$$\varphi_2(x) = B_1 e^{-ik_1 x} + B_2 e^{ik_1 x} \quad (2.24)$$

$$\varphi_3(x) = C_1 e^{-\kappa x} + C_2 e^{\kappa x} \quad (2.25)$$

$$\varphi_4(x) = D_1 e^{-ik_2 x} + D_2 e^{ik_2 x} \quad (2.26)$$

$$\varphi_5(x) = E_1 e^{-\kappa x} \quad (2.27)$$

Stetigkeit der Wellenfunktion und der Ableitungen sind an $x = -(a_1 + b_1)$, $x = -b_1$, $x = b_2$, $x = (b_2 + a_2)$ zu fordern. Man hat damit ein homogenes Gleichungssystem von 8 Gleichungen mit 8 Unbekannten. Eine nichttriviale Lösung existiert nur, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet. Die Auswertung kann mit *Mathematica* vorgenommen werden (s. **MA2**). Die gesuchte Determinante ist in Abb. (2.2) gegeben. Man kann die Spezialfälle aus dieser allgemeinen Form gewinnen.

- a) Man setzt $b_1 = b_2 = 0$, $a_1 = a_2 = a$, $k_1 = k_2 = k$. Man gewinnt dann aus der allgemeinen Form (2.2) in diesem Spezialfall

$$\frac{k}{\kappa} + \tan(ak) = \frac{\kappa}{k} + \cot(ak). \quad (2.29)$$

Diese Form entsteht gerade aus dem Produkt der Eigenwertbedingungen, die man für den symmetrischen und antisymmetrischen Fall bekommt (vergl. Abschnitt 2.2.1 im Buch).

- b) Im Falle der symmetrischen Doppelmulde bekommt man aus der allgemeinen Bedingung (2.2) mit Hilfe von *Mathematica*

$$\begin{aligned} 2e^{b\kappa} k \kappa (k^2 - \kappa^2 \sin(2ak) + [-(k^2 + \kappa^2)^2 + (k^2 - \kappa^2)^2 \cos(2ak)] \sinh(b\kappa) \\ = 4k^2 \kappa^2 \cos(2ak) \cosh(b\kappa) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Betrachtet man symmetrische und antisymmetrische Zustände getrennt (siehe Notebook) erhält man für die symmetrischen Zustände

$$\tanh\left(\frac{b\kappa}{2}\right) - \frac{k/\kappa \tan(ka) - 1}{\kappa/k \tan(ka) + 1} = 0 \quad (2.31)$$

und für die antisymmetrischen Zustände

$$\begin{vmatrix}
e^{-(a_1+b_1)\kappa} & -e^{i(a_1+b_1)k_1} & -e^{-i(a_1+b_1)k_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & e^{ib_1k_1} & e^{-ib_1k_1} & -e^{b_1\kappa} & -e^{-b_1\kappa} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & e^{-b_2\kappa} & e^{b_2\kappa} & -e^{-ib_2k_2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i(a_2+b_2)k_2} & -e^{ib_2k_2} & 0 \\
\kappa e^{-(a_1+b_1)\kappa} & ik_1 e^{i(a_1+b_1)k_1} & -ik_1 e^{-i(a_1+b_1)k_1} & \kappa e^{b_1\kappa} & -\kappa e^{-b_1\kappa} & 0 & 0 & 0 \\
0 & -ik_1 e^{ib_1k_1} & ik_1 e^{-ib_1k_1} & -\kappa e^{-b_2\kappa} & \kappa e^{b_2\kappa} & ik_2 e^{-ib_2k_2} & -ik_2 e^{ib_2k_2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -ik_2 e^{-i(a_2+b_2)k_2} & ik_2 e^{i(a_2+b_2)k_2} & \kappa e^{(a_2+b_2)\kappa} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{vmatrix} = 0. \quad (2.28)$$

Abb. 2.2 Eigenwertbedingung für die Doppelmulde in Determinantenform.

$$\tanh\left(\frac{b\kappa}{2}\right) - \frac{\kappa/k \tan(ka) + 1}{k/\kappa \tan(ka) - 1} = 0 \quad (2.32)$$

Das Produkt von (2.31) und (2.32) entspricht (2.30), wie mit *Mathematica* leicht zu zeigen ist.

2.3 Streuzustände

2.7. Bestimmen Sie Reflexions- und Durchlasskoeffizient eines Teilchens an der Potentialstufe

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases},$$

wobei $V_0 > 0$ gilt. Das einfallende Teilchen bewegt sich von links nach rechts. Die Energie des einfallenden Teilchens sei größer als V_0 . Zeigen Sie, dass Reflexions- und Durchlasskoeffizient in der Summe Eins ergeben. Wie verhält sich der Durchlasskoeffizient für kleine Werte von $E - V_0$?

Für die Wellenfunktion wird folgender Ansatz gemacht:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_L = e^{ik_L x} + R e^{-ik_L x}, & x \leq 0 \\ \varphi_R = D e^{ik_R x} & x > 0 \end{cases}. \quad (2.33)$$

Dabei gilt: $k_L = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_R = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Durch die Stetigkeitsbedingungen an $x = 0$ lassen sich R und D bestimmen. Es ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} 1 + R &= D, \\ k_L(1 - R) &= k_R D. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Aus den Gleichungen (2.34) ergeben sich die Lösungen:

$$R = \frac{k_L - k_R}{k_L + k_R}, \quad D = \frac{2k_L}{k_L + k_R}. \quad (2.35)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte einer ebenen Welle $\psi = A \exp(ikx)$ erhält man:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} \mathbf{e}_x. \quad (2.36)$$

Die Stromdichten für einfallenden, durchgelassenen und reflektierten Stromanteil ergeben sich somit zu:

$$\mathbf{j}_0 = \frac{\hbar k_L}{m} \mathbf{e}_x, \quad (2.37)$$

$$\mathbf{j}_D = \frac{\hbar k_R}{m} |D|^2 \mathbf{e}_x, \quad (2.38)$$

$$\mathbf{j}_R = -\frac{\hbar k_L}{m} |R|^2 \mathbf{e}_x. \quad (2.39)$$

Transmissions- und Reflexionskoeffizient berechnen sich nun aus den durchgelassenen und reflektierten Stromdichten, normiert auf die einfallende Stromdichte. Man erhält:

$$T_T = \frac{|\mathbf{j}_D|}{|\mathbf{j}_0|} = \frac{k_R}{k_L} D^2 = \frac{4k_R k_L}{(k_L + k_R)^2}, \quad T_R = \frac{|\mathbf{j}_R|}{|\mathbf{j}_0|} = R^2 = \frac{(k_L - k_R)^2}{(k_L + k_R)^2}. \quad (2.40)$$

Aus (2.40) folgt sofort: $T_R + T_T = 1$.

Für $E \rightarrow V_0$ folgt:

$$\lim_{E \rightarrow V_0} k_L = k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}, \quad \lim_{E \rightarrow V_0} k_R = 0. \quad (2.41)$$

Damit sieht man aus (2.40), dass der Transmissionskoeffizient gegen Null und der Reflexionskoeffizient gegen Eins gehen.

2.8. Man bestimme den Durchlasskoeffizienten für das δ -Potential $V(x) = \alpha \delta(x)$, wobei $\alpha > 0$ gelten soll. Das einfallende Teilchen bewegt sich von links nach rechts. Betrachten Sie die Grenzfälle $E \rightarrow \infty$ und $E \rightarrow 0$.

Für die Diracsche δ -Funktion gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta(x-a) = f(a).$$

Leiten Sie zuerst die Stetigkeitsbedingungen für die Ableitung der Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$ ab.

Für die Wellenfunktion setzt man eine Linearkombination von einer einlaufenden und einer reflektierten Welle sowie eine transmittierte Welle an.

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_L = e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x \leq 0 \\ \varphi_R = D e^{ikx} & x > 0 \end{cases} \quad (2.42)$$

Bei dieser Aufgabe hat man zu beachten, dass die δ -Funktion eine verallgemeinerte Funktion, ein Funktional, ist. Dadurch ist die Randbedingung für die Ableitung der Wellenfunktion zu modifizieren. Man erhält mit $V(x) = \alpha \delta(x)$ an der Stelle $x = 0$ aus der Schrödingergleichung bei Betrachtung von $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha \delta(0) \right) \psi(x) &= E \int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx \psi(x) \\
-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'(x) \Big|_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} + \alpha \psi(0) &= 0 \\
\psi'(x)|_{0+\varepsilon} - \psi'(x)|_{0-\varepsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0) .
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Damit erhält man die Gleichungen zur Bestimmung von R und D zu

$$\begin{aligned}
1 + R &= D, \\
Dik - (1 - R)ik &= \beta D
\end{aligned} \tag{2.44}$$

($\beta = 2m\alpha/\hbar^2$). Lösen der Gleichungen (2.44) führt auf den Transmissionskoeffizienten

$$T_T = |D|^2 = DD^* = \frac{4k^2}{4k^2 + \beta^2} . \tag{2.45}$$

Der Grenzfall $E \rightarrow \infty$ entspricht dem Fall $k \gg \beta = 2m\alpha/\hbar^2$. In diesem Fall sieht man aus (2.45), dass der Transmissionskoeffizient gegen Eins geht. Geht E und damit k gegen Null verschwindet der Transmissionskoeffizient.

2.9. Man berechne die Streuphase zu folgendem Potential

$$V = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ V_0 & 0 \leq x < a \\ -V_1 & a \leq x < b \\ 0 & b \leq x \end{cases} . \tag{2.46}$$

Das Potential wird in drei Bereiche eingeteilt und die Wellenfunktionen werden in den Bereichen entsprechend der Aufgabenstellung angesetzt.

$$\begin{array}{lll}
\text{Bereich I} & 0 \leq x < a & \varphi_I(x) = c_0 \sin(\kappa x) & \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \\
\text{Bereich II} & a \leq x < b & \varphi_{II}(x) = c_1 e^{ik_1(x-a)} + c_2 e^{-ik_1(x-a)} & k_1 = \sqrt{2m(E + V_1)}/\hbar \\
\text{Bereich III} & b \leq x & \varphi_{III}(x) = c_3 \sin(k_2 x + \delta) & k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar
\end{array} .$$

Der Ansatz für die Wellenfunktion im Bereich I gilt für $E < V_0$. Stetigkeitsbedingungen sind an $x = a$ und $x = b$ zu erfüllen. Damit hat man 4 Gleichungen zur Bestimmung der Konstanten $c_0, c_1, c_2, c_3, \delta$. Die Amplitude der Wellenfunktion ist jedoch frei wählbar, so dass die Gleichungen zur Bestimmung aller Größen ausreichend sind. Die Stetigkeit der Wellenfunktionen und der Ableitungen liefert folgende 4 Gleichungen:

$$c_0 \sinh(\kappa a) = c_1 + c_2, \quad (2.47)$$

$$\kappa c_0 \cosh(\kappa a) = ik_1(c_1 - c_2), \quad (2.48)$$

$$c_1 e^{ik_1 d} + c_2 e^{-k_1 d} = c_3 \sin(k_2 b + \delta), \quad (2.49)$$

$$ik_1 (c_1 e^{ik_1 d} - c_2 e^{-k_1 d}) = k_2 c_3 \cos(k_2 b + \delta). \quad (2.50)$$

Aus (2.49) und (2.50) gewinnt man:

$$\tan(k_2 b + \delta) = \frac{k_2}{ik_1} \frac{c_1/c_2 e^{ik_1 d} + e^{-ik_1 d}}{c_1/c_2 e^{ik_1 d} - e^{-ik_1 d}}. \quad (2.51)$$

Das Verhältnis c_1/c_2 kann man aus (2.47) und (2.48) gewinnen:

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{ik_1 \tanh(\kappa a) + \kappa}{ik_1 \tanh(\kappa a) - \kappa}. \quad (2.52)$$

Einsetzen von (2.52) in (2.51) liefert dann:

$$\tan(k_2 b + \delta) = \frac{k_2}{k_1} \frac{k_1 \tanh(\kappa a) + \kappa \tan(k_1 d)}{\kappa - \tanh(\kappa a) \tan(k_1 d)}. \quad (2.53)$$

Die Bestimmungsgleichung (2.52) für die Streuphase geht für $a = 0$ in den im Buch behandelten Spezialfall über.

Gibt man sich nun c_0 vor, so können c_1 , c_2 , c_3 aus den obigen Gleichungen bestimmt werden. Um einen Vergleich mit der numerischen Rechnung in **MA3** zu haben wird c_0 so eingerichtet, dass der Anstieg der Wellenfunktion an $x = 0$ gleich 1 ist. Dies führt zu $c_0 = 1/\kappa$. Aus (2.47) folgt nun

$$c_2 = \frac{\sinh(\kappa a)}{(c_1/c_2 + 1)\kappa}, \quad (2.54)$$

wobei c_1/c_2 aus (2.52) folgt. Somit hat man auch $c_1 = (c_1/c_2)c_2$. c_3 folgt nun aus (2.49) zu

$$c_3 = \frac{1}{\sin(k_2 b + \delta)} (c_1 e^{ik_1 d} + c_2 e^{-k_1 d}). \quad (2.55)$$

Ergebnisse für $V_0 = 4$ a.u., $V_1 = 5$ a.u., $a = 2$ a.u., $b = 5$ a.u., $E = 2$ a.u. sind in den Abbildungen 2.3 und 2.4 gegeben.

2.4 Näherungsverfahren

2.10. Durch Variation ist die Energie im Grundzustand des Wasserstoffatoms zu berechnen. Als Ansatz für die Wellenfunktion verwende man

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{-\alpha r/a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad (2.56)$$

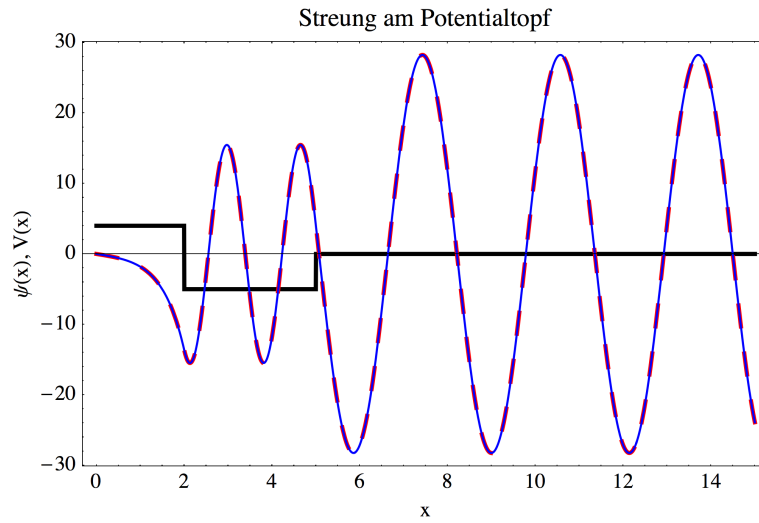


Abb. 2.3 Analytische (rot gestrichelt) und numerische (blau durchgezogen) Streulösung.

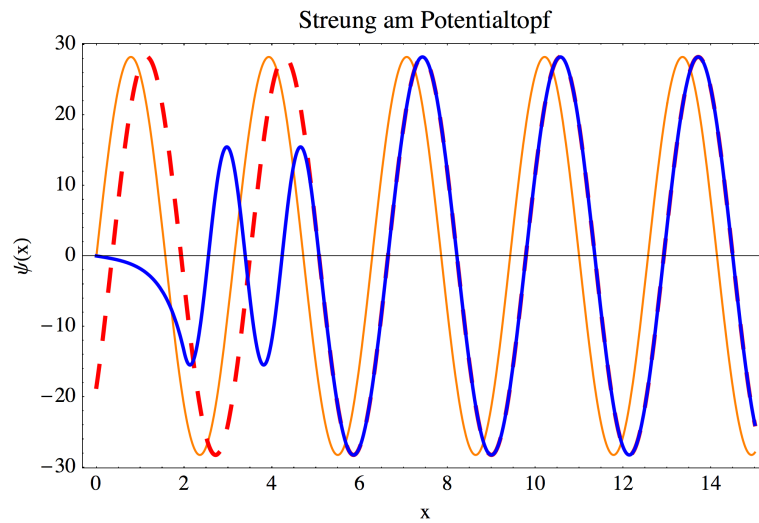


Abb. 2.4 Demonstration der Phasenverschiebung. Die Lösung für $x > b$ (rot gestrichelt) ist gegenüber der Lösung für konstantes Potential $V(x) = 0$ (orange) phasenverschoben. Die phasenverschobene Kurve entspricht der im ganzen Gebiet $x \geq 0$ gültigen Lösung im Bereich $x \geq b$.

mit α als dimensionslosem Variationsparameter.

Für die Auswertung ist die folgende Beziehung nützlich:

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-cr} = \left(-\frac{d}{dc}\right)^n \int_0^\infty dr e^{-cr} = \left(-\frac{d}{dc}\right)^n \frac{1}{c} = \frac{n!}{c^{n+1}} \quad (2.57)$$

Damit kann man die Konstante A über die Normierung bestimmen. Man erhält

$$1 = (\psi, \psi) = 4\pi A^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-2\alpha r/a_0} \Rightarrow A^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\alpha}{a_0} \right)^3. \quad (2.58)$$

Die Erwartungswerte der potentiellen und kinetischen Energie ergeben sich damit zu:

$$E_{\text{pot}} = -(\psi, \frac{\epsilon^2}{r} \psi) = -\alpha \frac{\epsilon^2}{a_0}, \quad (2.59)$$

$$E_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi, \nabla^2 \psi) = \frac{\alpha^2}{2} \frac{\epsilon^2}{a_0}. \quad (2.60)$$

Aus (2.59) und (2.60) erhält man nun die Gesamtenergie als Funktion des Variationsparameters:

$$E(\alpha) = \left(\frac{\alpha^2}{2} - \alpha \right) \frac{\epsilon^2}{a_0}. \quad (2.61)$$

Die Variation liefert dann als Endergebnis $\alpha = 1$ und somit

$$E_0 = -\frac{\epsilon^2}{2a_0}, \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}. \quad (2.62)$$

Die analytische Form des gewählten Variationsansatzes entspricht dem exakten Ergebnis. Die Durchführung der Variation liefert daher den korrekten Grundzustand.

2.11. Der Hamilton-Operator eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{m\omega^2}{2} y^2. \quad (2.63)$$

Berechnen Sie mit Störungstheorie erster Ordnung die durch das Störungspotential

$$V(x, y) = \lambda x^2 y^2 \quad (2.64)$$

bewirkte Energieverschiebung im Grundzustand.

Die Lösung des durch (2.63) beschriebenen zweidimensionalen harmonischen Oszillators läßt sich mit der Separationsmethode auf das eindimensionale Problem zurückführen. Man setzt also $\psi_0(x, y) = \varphi_0(x) \varphi_0(y)$ für die Grundzustandswellenfunktion an, wobei φ_0 die Grundzustandswellenfunktion des eindimensionalen harmonischen Oszillators ist:

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\beta}} e^{-(x/\beta)^2/2}. \quad (2.65)$$

In erster Ordnung Störungstheorie ist die Änderung der Grundzustandsenergie gegeben durch

$$\Delta E = (\psi_0, \lambda x^2 y^2 \psi_0) = \lambda (\varphi_0, x^2 \varphi_0) (\varphi_0, y^2 \varphi_0) . \quad (2.66)$$

Die Integrale bzgl. x und y sind gleich, so dass nur ein Integral weiter ausgewertet werden muss:

$$(\varphi_0, x^2 \varphi_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-(x/\beta)^2} = \frac{\beta^2}{2} . \quad (2.67)$$

Somit erhält man für die Energieverschiebung $\Delta E = \lambda \beta^4/4$.

2.12. Berechnen Sie mit Hilfe des Ritzschen Variationsverfahrens die Energie des 1. angeregten Zustandes eines eindimensionalen harmonischen Oszillators. Benutzen Sie als Testfunktion

$$\psi_1(x) = Ax \exp(-\frac{\alpha}{2} x^2) . \quad (2.68)$$

Hinweis: Benutzen Sie die Integrale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}} , \quad (2.69)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} , \quad (2.70)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}} . \quad (2.71)$$

Für die Normierung der Testfunktion erhält man

$$\begin{aligned} (\psi_1, \psi_1) &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} = A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} \equiv 1 \\ A^2 &= \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} \right)^{-1} . \end{aligned} \quad (2.72)$$

Die zweite Ableitung der Testfunktion ergibt sich zu:

$$\frac{d^2}{dx^2} A e^{-\alpha x^2/2} = A e^{-\alpha x^2/2} (x^2 \alpha - 3) x \alpha . \quad (2.73)$$

Damit lässt sich die kinetische Energie auswerten:

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} (x^4 \alpha^2 - 3x^2 \alpha) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \left[\alpha^2 \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}} - 3\alpha \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3\alpha}{2} . \end{aligned} \quad (2.74)$$

Für die potentielle Energie folgt:

$$\begin{aligned}
E_{\text{pot}} &= \frac{m\omega^2}{2} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^4 e^{-\alpha x^2} \\
&= \frac{m\omega^2}{2} A^2 \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{3}{2\alpha} .
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Für die Gesamtenergie ergibt sich somit

$$E(\alpha) = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{3}{2} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{\alpha} \right] . \tag{2.76}$$

Die Ausführung der Variation liefert nun

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} &= \frac{3}{2} \left[\frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{\alpha^2} \right] \\
\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} &= 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{\beta^2} .
\end{aligned} \tag{2.77}$$

Somit erhält man aus der Testfunktion letztlich:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}\beta^3}} x e^{-(x/\beta)^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}\beta}} \frac{2x}{\beta} e^{-(x/\beta)^2/2} . \tag{2.78}$$

Man bekommt somit die exakte Lösung für die Wellenfunktion. Die aus (2.76) folgende Energie $E(m\omega/\hbar) = 3\hbar\omega/2$ entspricht ebenfalls der exakten Lösung.

Kapitel 3

Darstellung und Zeitablauf physikalischer Größen

3.1 Darstellung physikalischer Größen

3.1. Man zeige, dass der Erwartungswert des Impulses in einem zum diskreten Spektrum gehörigen stationären Zustand verschwindet.

Der Erwartungswert des Impulses ist durch

$$\bar{\mathbf{p}} = \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}) = (\psi, \hat{\mathbf{p}} \psi) \quad (3.1)$$

gegeben, wobei ψ der Schrödingergleichung $\hat{H}\psi = E\psi$ genügt. $\bar{\mathbf{p}}$ kann mit dem Ehrenfestschen Satz ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{p}} &= \frac{im}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] \psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{im}{\hbar} \int d^3\mathbf{r} (\psi^*(\mathbf{r}) \hat{H} \hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \hat{H} \psi(\mathbf{r})) . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Die Verwendung der Schrödingergleichung in (3.2) liefert

$$\bar{\mathbf{p}} = \frac{im}{\hbar} E \{ (\psi, \mathbf{r} \psi) - (\psi, \mathbf{r} \psi) \} = 0 . \quad (3.3)$$

3.2. Der Erwartungswert des Impulses bei der eindimensionalen Bewegung errechnet sich bekanntlich nach der Formel

$$\bar{p}_x = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) . \quad (3.4)$$

Es ist zu zeigen, dass dieser Mittelwert auch durch die „symmetrisierte“ Formel

$$\bar{p}_x = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) - \psi(x) \frac{d}{dx} \psi^*(x) \right) \quad (3.5)$$

dargestellt werden kann.

Hinweis:

Man untersuche das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d}{dx} (\psi^*(x) \psi(x)) \quad (3.6)$$

mit Hilfe der Grenzbedingungen für die Wellenfunktion.

Geht man von (3.6) aus ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d}{dx} (\psi^* \psi) = |\psi, \psi|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad (3.7)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{d\psi^*}{dx} \psi + \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) = 0, \quad (3.8)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d\psi^*}{dx} \psi = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^* \frac{d\psi}{dx} .$$

(3.7) folgt aus den Randbedingungen für die Wellenfunktion. Diese muss im Unendlichen verschwinden, damit das Normierungsintegral existiert.

3.3. Berechnen Sie den Erwartungswert des Operators $\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{H}}$ (β : reelle Konstante) für Eigenzustände von \hat{H} , die als Lösungen der Eigenwertgleichung $\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$ gegeben sind.

Der Erwartungswert des Operators $\hat{\rho}$ ist definiert durch

$$\bar{\rho} = (\psi_n | \hat{\rho} | \psi_n) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} (\psi_n | \hat{H}^k | \psi_n). \quad (3.9)$$

Im zweiten Schritt wurde der Operator in eine Reihe entwickelt. Mit $\hat{H}^k \psi_n = (E_n)^k \psi_n$ und $(\psi_n, \psi_n) = 1$ folgt dann: $\bar{\rho} = e^{-\beta E_n}$.

3.2 Zeitablauf physikalischer Größen

3.4. Da die Schrödingergleichung bezüglich der Zeit von erster Ordnung ist, wird $\psi(t)$ eindeutig durch $\psi(0)$ bestimmt. Man schreibt den Zusammenhang in der Form

$$\psi(t) = \hat{S}(t) \psi(0), \quad (3.10)$$

wobei \hat{S} ein Operator ist. Es ist zu zeigen, dass $\hat{S}(t)$

a) der Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}(t) = \hat{H} \hat{S}(t) \quad (3.11)$$

genügt und

b) für einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator \hat{H} die Form

$$\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (3.12)$$

besitzt und unitär ist, d.h. $\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}$ gilt.

a) Einsetzen von (3.10) in die zeitabhängige Schrödingergleichung liefert unmittelbar (3.11):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) &= \hat{H} \psi(t) \\ i\hbar \psi(0) \frac{d}{dt} \hat{S}(t) &= \psi(0) \hat{H} \hat{S}(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}(t) &= \hat{H} \hat{S}(t) . \end{aligned} \quad (3.13)$$

b) Ist \hat{H} zeitunabhängig, kann man (3.13) formal durch Trennung der Variablen integrieren.

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}}{\hat{S}} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \\ \ln \hat{S} + \ln c &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \\ \hat{S} &= c \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Auf Grund von (3.10) muss $c = 1$ gelten. Aus (3.14) folgt sofort die Unitarität, da \hat{H} hermitesch ist.

$$\hat{S}^\dagger = \left(e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right)^\dagger = e^{i\hat{H}^\dagger t/\hbar} = e^{i\hat{H}t/\hbar} = \hat{S}^{-1} \quad (3.15)$$

3.5. Die Energie des Grundzustandes des harmonischen Oszillators ist mit Hilfe der Unschärferelation abzuschätzen.

Man geht von

$$E = \frac{\overline{\hat{p}^2}}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \overline{x^2} \quad (3.16)$$

aus. Die Mittelwerte werden durch die mittleren quadratischen Schwankungen ausgedrückt. Man erhält:

$$\overline{\hat{p}^2} = \overline{(\Delta \hat{p})^2} + \tilde{p}^2, \quad \overline{x^2} = \overline{(\Delta x)^2} + \bar{x}^2. \quad (3.17)$$

Die Mittelwerte von Impuls und Ort verschwinden, so dass man mit (3.17) aus (3.16)

$$E = \frac{(\Delta \hat{p})^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 (\Delta x)^2 \quad (3.18)$$

erhält. Man ersetzt $\overline{(\Delta \hat{p})^2}$ durch die Heisenbergsche Unschärferelation und schätzt damit die Energie ab:

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{m}{2} \omega^2 (\Delta x)^2 = f\left((\Delta x)^2\right) . \quad (3.19)$$

Nun sucht man das Minimum der Funktion.

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{z} + \frac{m}{2} \omega^2 z \\ f'(z) &= -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{z^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0 \\ z &= \overline{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar}{2m\omega} . \end{aligned} \quad (3.20)$$

Einsetzen von (3.20) in (3.19) liefert dann

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2} . \quad (3.21)$$

Man bekommt also auch durch diese Betrachtung das Ergebnis, dass die Energieeigenwerte beim harmonischen Oszillator immer größer gleich der Nullpunktsenergie $\hbar\omega/2$ sein müssen.

3.6. Man zeige, dass für die Erwartungswerte des Drehimpulses $\overline{\hat{\mathbf{L}}}$ und des Drehmomentes $\overline{\hat{\mathbf{D}}}$ die klassische Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \overline{\hat{\mathbf{L}}} = \overline{\hat{\mathbf{D}}} \quad (3.22)$$

gilt.

Mit der Definition des Drehimpulses folgt aus (3.22)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \overline{\hat{\mathbf{L}}} &= \frac{i}{\hbar} \overline{[\hat{\mathbf{H}}, \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]} + \frac{\partial \overline{\hat{\mathbf{L}}}}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2m} \overline{[\hat{\mathbf{p}}^2, \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]} + \overline{[V(\mathbf{r}), \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]} \right\} . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Die erste Vertauschung verschwindet und die zweite führt auf:

$$\begin{aligned}
[V(\mathbf{r}), \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] &= V(\mathbf{r})(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) - (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})V(\mathbf{r}) \\
&= V(\mathbf{r})(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times (\nabla V(\mathbf{r})) - V(\mathbf{r})(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) \\
&= \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \mathbf{F} .
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Das Ergebnis (3.24) liefert dann mit (3.23)

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{L}} = \overline{\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{F}}} = \bar{\mathbf{D}} \tag{3.25}$$

3.3 Quasistationäre Zustände

3.7. Mit Hilfe der quasiklassische Näherung (Berechnung des Gamovfaktors) ist die Durchlasswahrscheinlichkeit einer Metalloberfläche für Elektronen in einem starken homogenen elektrischen Feld der Feldstärke $\mathbf{E}_a = E_a \mathbf{e}_x$ zu bestimmen. Das Feld ist dabei parallel zur Oberflächennormale des Metalls gerichtet.

- Diskutieren Sie die durch das elektrische Feld hervorgerufene Barriere an der Oberfläche. Berechnen Sie die Durchlasswahrscheinlichkeit.
- In Wirklichkeit erfolgt die Änderung des Potentials in der Nähe einer Metalloberfläche kontinuierlich. So wirkt z.B. in großen Abständen von der Metalloberfläche das Potential der elektrischen Bildkraft

$$V_B = -\frac{e^2}{4x} . \tag{3.26}$$

Die Durchlasswahrscheinlichkeit ist unter Berücksichtigung der Bildkraft zu berechnen.

Das Potential an der Metalloberfläche ist in Abb. (3.1) dargestellt. Die Durchlasswahrscheinlichkeit der Schwelle wird durch den Gamovfaktor bestimmt:

$$|D|^2 \sim e^{-2G} , \quad G = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]} . \tag{3.27}$$

Für die klassischen Umkehrpunkte erhält man: $x_- = 0, x_+ = |E|/E_a$. Die Berechnung des Gamov-Faktors nach (3.27) führt auf ($\xi = x/x_+$)

$$\begin{aligned}
G &= \int_0^{|E|/E_a} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (|E| - E_a x)} = \frac{|E| \sqrt{2m|E|}}{\hbar E_a} \int_0^1 d\xi \sqrt{1 - \xi} \\
G &= \frac{2}{3} \frac{|E| \sqrt{2m|E|}}{\hbar E_a} .
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Damit erhält man:

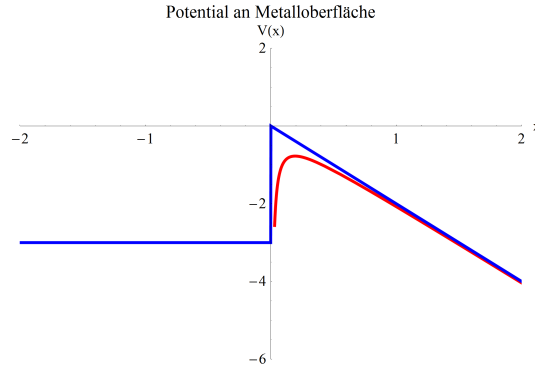


Abb. 3.1 Schematische Darstellung des Potentials an einer Metalloberfläche. $x \leq 0$ Metallinneres, $x > 0$ Außenraum.

$$|D|^2 \sim \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar E_a} |E|^{3/2}\right). \quad (3.29)$$

Beachtet man nun den Einfluss des Bildpotentials hat man

$$G = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(|E| - E_a x - \frac{\epsilon^2}{4x} \right)} \quad (3.30)$$

auszuwerten. Aus $|E| - E_a x - \epsilon^2/(4x) = 0$ ergeben sich die klassischen Umkehrpunkte zu

$$x_{\pm} = \frac{|E| \pm \sqrt{|E|^2 - \epsilon^2 E_a}}{2E_a}. \quad (3.31)$$

Das Integral (3.30) ist nicht elementar auszuwerten. Mit der Substitution $\xi = E_a x/|E|$ erhält man aus (3.30)

$$G = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar E_a} |E|^{3/2} \int_{\xi_-}^{\xi_+} d\xi \sqrt{1 - \frac{y^2}{\xi} - \xi} \quad (3.32)$$

wobei sich die Grenzen (3.31) zu

$$\xi_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - y^2} \quad (3.33)$$

ergeben. Hierbei ist y ein Parameter, der durch $y = \sqrt{\epsilon^2 E_a}/(2|E|)$ gegeben ist. Aus (3.27) folgt somit für den Durchlasskoeffizienten:

$$|D|^2 \sim e^{-k_0 \Phi(y)} \quad , \quad k_0 = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}|E|^{3/2}}{E_a} \quad (3.34)$$

$$\Phi = \frac{3}{2} \int_{\xi_-}^{\xi_+} d\xi \sqrt{1 - \frac{y^2}{\xi} - \xi} \quad .$$

Ohne Berücksichtigung des Bildpotentials ($y = 0$) geht (3.34) in (3.29) über.

3.8. Ein α -Teilchen mit der Energie E befindet sich im Feld des Restkerns. Das Potential sei durch einen Kasten der Breite R_0 (Kernradius), der durch einen Wall der Breite d und der Höhe U_0 begrenzt wird, gegeben.

$$V(r) = \begin{cases} 0 & 0 \leq r \leq R \\ U_0 & R \leq r \leq R+d \\ 0 & r > R+d \end{cases} \quad (3.35)$$

Das Geiger-Nuttallsche Gesetz stellt eine Beziehung zwischen der Zerfallswahrscheinlichkeit eines α -Strahlers und der kinetischen Energie des emittierten α -Teilchens her. Es gilt:

$$\ln \lambda = A + B \ln E \quad (3.36)$$

Zeigen Sie, dass das Modell-Potential (3.35) in der Lage ist das Geiger-Nuttallsche Gesetz qualitativ zu erklären.

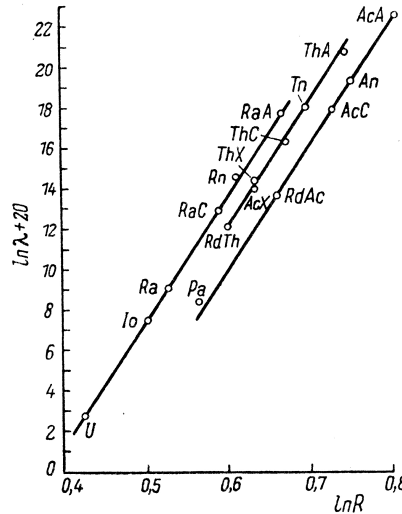


Abb. 3.2 Geiger-Nuttallsches Gesetz. R ist hierbei die Reichweite der α -Teilchens in Luft, die proportional zur kinetischen Energie ist. [6]

Das Geiger-Nuttallsche Gesetz besagt, dass zwischen der kinetischen Energie der α -Teilchen und der Zerfallswahrscheinlichkeit λ ein direkter Zusammenhang

besteht. Zu größeren Zerfallswahrscheinlichkeiten λ gehören α -Teilchen mit größerer kinetischer Energie (vergl. Abb. 3.2). Im Experiment drückt sich die größere kinetische Energie in einer größeren Reichweite R der α -Teilchen in Luft aus. Die Zerfallswahrscheinlichkeit ist umgekehrt proportional der Lebensdauer und durch den Gamovfaktor bestimmt.

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = A \cdot e^{-2G} \quad (3.37)$$

A ist hierbei eine energieunabhängige Konstante, die durch R_0 und die Masse der α -Teilchen bestimmt wird. Für den Gamovfaktor der Schwelle in Abb. 3.3 ergibt sich

$$G = \int_0^d dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{U_0 - E} \cdot d. \quad (3.38)$$

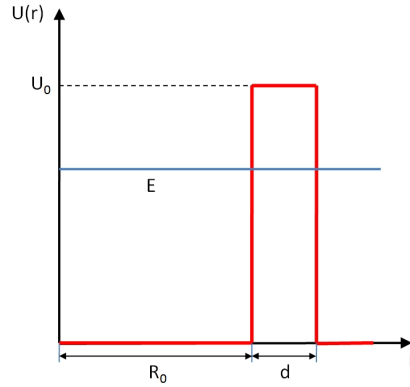


Abb. 3.3 Potentialverlauf

Aus (3.37) folgt

$$\ln \lambda = \ln A - 2G = \ln A - \frac{4\pi\sqrt{2m}}{h} \sqrt{U_0 - E} \cdot d = \ln A + f(E). \quad (3.39)$$

Das ist aber gerade ein Zusammenhang, der dem Geiger-Nuttallschen Gesetz entspricht.

Ein quantitativ besseres Ergebnis erhält man, wenn man das Potentialmodell entsprechend Abb. 3.4 zur Auswertung des Gamovfaktors benutzt.

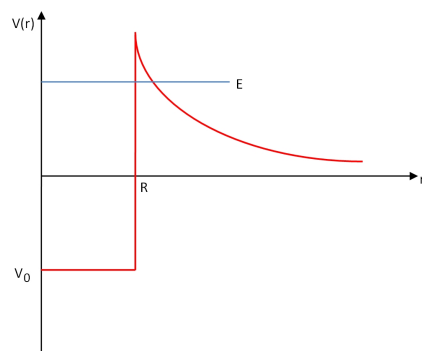


Abb. 3.4 Verbessertes Potentialmodell zur Diskussion des α -Zerfalls.

Kapitel 4

Das Wasserstoffatom

4.1 Das Wasserstoffspektrum

4.1. Ein System bestehe aus zwei Teilchen der Massen m_1 und m_2 . Der Operator des Gesamtimpulses $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ ist durch die Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} und die Relativkoordinate \mathbf{r} auszudrücken. Zerlegen Sie den Hamiltonoperator in Anteile der Schwerpunkts- und Relativbewegung, wenn die potentielle Energie nur eine Funktion des Abstandes der Teilchen ist.

Schwerpunkts und Relativkoordinaten sind gegeben durch

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad , \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad . \quad (4.1)$$

Dabei ist $M = m_1 + m_2$ die Gesamtmasse. Löst man (4.1) nach \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 auf, erhält man:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r} \quad (4.2)$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r} \quad (4.3)$$

Daraus folgt sofort für den klassischen Gesamtimpuls

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 = M \dot{\mathbf{R}} \quad (4.4)$$

Der Gesamtimpuls ist also gleich dem Schwerpunktimпульs.

Für die Wellenfunktion gelte $\tilde{\psi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Somit ergibt sich für die x -Komponente des Gesamtimpulses :

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_x \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \tilde{\psi} &= \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial X} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial X} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial x_2} \\
&= \mathbf{e}_x \left[\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial X} \frac{m_1}{M} - \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial X} \frac{m_2}{M} \right] \\
&= \mathbf{e}_x \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial X}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Die Summe der Impulsoperatoren der Teilchen ergibt somit den Operator des Gesamtimpulses.

Da das Potential nur vom Abstand der Teilchen abhängt gilt sofort: $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r)$. Man erhält:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial r_{1x}} &= \frac{m_1}{M} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial R_x} + \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial r_x} \\
\frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial r_{1x}^2} &= \frac{m_1}{M} \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial R_x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial r_x \partial R_x} \right) + \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial R_x \partial r_x} + \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial r_x^2} \right) \\
&= \frac{m_1^2}{M^2} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial R_x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial r_x^2} + \frac{2m_1}{M} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial R_x \partial r_x}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Nach der Betrachtung der anderen Komponenten erhält man mit den zu (4.6) analogen Beziehungen für den Hamiltonian:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{\mathbf{r}_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{m_1^2}{M^2} \Delta_{\mathbf{R}} + \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{2m_1}{M} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial r_i} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\frac{m_2^2}{M^2} \Delta_{\mathbf{R}} + \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{2m_2}{M} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial r_i} \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V(r)
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Hierbei ist μ die reduzierte Masse. $\mu = (m_1 + m_2)/(m_1 \cdot m_2)$.

4.2. Das Positronium ist ein exotisches Atom, in dem ein Positron, das Antiteilchen des Elektrons, das Proton im Kern des Wasserstoffatoms ersetzt. Im Myonium ersetzt ein Anti-Myon das Proton als Kernteilchen. Beide Systeme sind nicht stabil. Elektron und Positron annihilieren unter Aussendung von Photonen. Elektron und Positron haben die gleiche Masse m . Die Masse des Anti-Myons beträgt $206,768m$. Wie berechnen sich die Energieniveaus im Positronium und Myonium?

Für die Übergänge im Wasserstoffatom erhält man experimentell:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \tag{4.8}$$

Bei Wasserstoff und wasserstoffähnlichen Systemen handelt es sich um Zweikörperprobleme, so dass man die Mitbewegung des Kerns, zu berücksichtigen hat. In

der Schrödingergleichung der Relativbewegung ist die Masse durch die effektive Masse zu ersetzen. Das führt auf eine Modifikation der Rydbergkonstante:

$$R_M = \frac{R_\infty}{1 + m/M} \quad , \quad R_\infty = \frac{\alpha^2}{2\lambda_C} . \quad (4.9)$$

Hierbei ist R_∞ die Rydbergkonstante bei unendlich großer Kernmasse. Diese wird durch die Feinstrukturkonstante α und die Compton-Wellenlänge des Elektrons λ_C bestimmt. R_M berücksichtigt die Mitbewegung des Kerns. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 gegeben.

System	Kernmasse	$1/(1 + m/M)$
Wasserstoff	1836,153 m_e	0.999456
Positronium	1,0 m_e	0,5
Myonium	206,768 m_e	0,995187

Tabelle 4.1 Rydbergkonstanten bei Berücksichtigung der Kernmitbewegung.

4.3. Man berechne in erster Ordnung Störungstheorie die 1s-Niveaushiftung (ΔE_{1s}), die durch die Existenz eines endlichen Kernradius R hervorgerufen wird. Das Potential $V(r)$ und die ungestörte Wellenfunktion $\psi_{1s}(\mathbf{r}) = R_{1s}(r)Y_{00}(\hat{\mathbf{r}})$ sind durch die folgenden Ausdrücke gegeben:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\epsilon^2}{r} & r > R \\ \frac{\epsilon^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right) & r < R \end{cases} \quad , \quad R_{1s}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} . \quad (4.10)$$

In erster Ordnung Störungstheorie ist die Energieverschiebung durch das Matrixelement der Störung mit den ungestörten Wellenfunktionen gegeben: $\Delta E_{1s} = (\psi_{1s}, \Delta V \psi_{1s})$. Nach (4.10) ist die Störung gegeben durch:

$$\begin{aligned} \Delta V &= \left[\frac{\epsilon^2}{r} + \frac{\epsilon^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right) \right] \theta(R-r) \\ &= \frac{\epsilon^2}{R} \left[\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right] \theta(R-r) . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Der Kernradius ist klein gegenüber dem Bohrschen Wasserstoffradius. Demzufolge kann die Näherung $R_{1s}(r) \approx R_{1s}(0)$ verwendet werden. Mit der Substitution $x = r/R$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Delta E_{1s} &= \frac{\epsilon^2}{R} \frac{4}{a_0^3} \int_0^R r^2 \left[\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right] \\
&= \frac{\epsilon^2}{R} \frac{4}{a_0^3} R^3 \int_0^1 x^2 \left[\frac{x^2}{2} - \frac{3}{2} + \frac{1}{x} \right] \\
&= \frac{4}{5} \left(\frac{\epsilon^2}{2a_0} \right) \left(\frac{R^2}{a_0^2} \right) .
\end{aligned} \tag{4.12}$$

4.2 Der Bahndrehimpuls

4.4. Der Hamiltonoperator eines starren Hantel-Moleküls, welches im Raum um den Koordinatenursprung rotiert („Rotator“ mit zwei Freiheitsgraden, den Winkeln ϑ, φ (Kugelkoordinaten)) ist durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} \tag{4.13}$$

gegeben. Dabei ist $\hat{\mathbf{L}}$ der Operator des Bahndrehimpulses und I ist das Trägheitsmoment. Wie lauten die Energieeigenwerte E des zugehörigen Rotators? Sind die Energieeigenwerte entartet?

Die stationäre Schrödingergleichung lautet:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi &= \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} \psi = E\psi \\
\hat{\mathbf{L}}^2 \psi &= 2IE\psi
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Die Gleichung (4.14) ist die Eigenwertgleichung für den Operator $\hat{\mathbf{L}}^2$, dessen Eigenfunktionen die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} sind. Die Eigenwerte sind $\hbar^2 l(l+1)$. Somit ergibt sich aus (4.14) für die Eigenwerte:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad , \quad l = 0, 1, 2, \dots \tag{4.15}$$

Jeder Eigenwert ist $(2l+1)$ -fach entartet.

4.5. Ein Rotator mit zwei Freiheitsgraden, dem Polarwinkel ϑ und dem Azimutwinkel φ , sei zu einem bestimmten Zeitpunkt im Zustand mit der Wellenfunktion

$$u(\vartheta, \varphi) = N \left(\sin \vartheta \cos \varphi + \sin \vartheta \sin \varphi + \sqrt{3} \cos \vartheta \right) . \tag{4.16}$$

(N -Normierungsfaktor)

- a) Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Drehimpulsquadrats in diesem Zustand des Rotators den Wert $2\hbar^2$ findet?

- b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man bei einer Messung des Observablenpaars Drehimpulsquadrat und z -Komponente des Drehimpulses das Messwertpaar $2\hbar^2$ für $\hat{\mathbf{L}}^2$ und 0 für \hat{L}_z ?

Die Funktion $u(\vartheta, \varphi)$ ist eine Linearkombinationen der Kugelflächenfunktionen zum Drehimpuls $l = 1$. Man kann u in diesen Kugelflächenfunktionen

$$Y_{1,\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}, \quad Y_{1,0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \quad (4.17)$$

ausdrücken. Aus (u, u) kann man die Normierungskonstante N bestimmen. Man erhält für die Normierungskonstante $N = \sqrt{3/(20\pi)}$. Somit ergibt sich für die normierte Wellenfunktion

$$\tilde{u}(\vartheta, \varphi) = -\frac{1-i}{\sqrt{10}} Y_{1,1} + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{1,0} + \frac{(1+i)}{\sqrt{10}} Y_{1,-1}. \quad (4.18)$$

Die Erwartungswerte für das Drehimpulsquadrat und die z -Komponente des Drehimpulses ergeben sich zu:

$$(\tilde{u}, \hat{\mathbf{L}}^2 \tilde{u}) = 2\hbar^2 \quad (4.19)$$

$$(\tilde{u}, \hat{L}_z \tilde{u}) = \frac{|1-i|^2}{10} (-1 \cdot \hbar) + \frac{3}{5} (0 \cdot \hbar) + \frac{|1+i|^2}{10} (+1 \cdot \hbar) \quad (4.20)$$

\tilde{u} ist eine Eigenfunktion von $\hat{\mathbf{L}}^2$, aber keine Eigenfunktion von \hat{L}_z . Somit ist die Wahrscheinlichkeit bei der Messung von $\hat{\mathbf{L}}^2$ den Wert $2\hbar^2$ zu messen $W_1 = 1$. Die Wahrscheinlichkeit einen Wert 0 bei der Messung der z -Komponente zu finden ist $W_z = 3/5$. Somit ist die Wahrscheinlichkeit bei der Messung von $\hat{\mathbf{L}}^2$ den Wert $2\hbar^2$ und bei der Messung der z -Komponente den Wert 0 zu finden $W = W_1 \cdot W_z = 3/5$.

4.6. Es ist zu zeigen, dass die Erwartungswerte von \hat{L}_x und \hat{L}_y in einem Zustand ψ mit definiertem Wert von \hat{L}_z verschwinden.

ψ ist ein Eigenzustand von \hat{L}_z , also:

$$\hat{L}_z \psi = \hbar m \psi. \quad (4.21)$$

Mit Hilfe der Vertauschungsregeln lassen sich \hat{L}_x und \hat{L}_y darstellen als:

$$\hat{L}_x = -\frac{i}{\hbar} [\hat{L}_y, \hat{L}_z], \quad \hat{L}_y = -\frac{i}{\hbar} [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \quad (4.22)$$

Es ergibt sich somit für den Erwartungswert von \hat{L}_x :

$$\begin{aligned}
\overline{\hat{L}_x} &= (\psi, \hat{L}_x \psi) = -\frac{i}{\hbar} \{ (\psi, \hat{L}_y \hat{L}_z \psi) - (\psi, \hat{L}_z \hat{L}_y \psi) \} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \{ (\psi, \hat{L}_y \hat{L}_z \psi) - (\hat{L}_z \psi, \hat{L}_y \psi) \} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \{ \hbar m (\psi, \hat{L}_y \psi) - \hbar m (\psi, \hat{L}_y \psi) \} = 0 .
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Der Beweis für \hat{L}_y erfolgt analog.

4.3 Die radiale Bewegung

4.7. Man berechne die Fouriertransformierte der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms im $1s$ -Zustand

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} . \tag{4.24}$$

Dabei ist a_0 der Bohrsche Wasserstoffradius.

Die Fouriertransformierte berechnet sich zu

$$\psi_{1s}(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} \, \psi_{1s}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \tag{4.25}$$

Mit (4.24) hat man also

$$\psi_{1s}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \int_0^\infty dr \, r^2 \int_0^\pi d\vartheta \, \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{-r/a_0} e^{-ikr \cos \vartheta} \tag{4.26}$$

zu berechnen. Die φ -Integration lässt sich sofort ausführen. Es wird weiterhin die Substitution $\xi = \cos \vartheta$ verwendet. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\psi_{1s}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} 2\pi \int_0^\infty dr \, r^2 e^{-r/a_0} \int_0^1 d\xi \, e^{-ikr\xi} \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{k} a_0^{-3/2} \int_0^\infty dr \, r \sin(kr) e^{-r/a_0} \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{k} a_0^{-3/2} \cdot \frac{2a_0^3 k}{(1+a_0^2 k^2)^2} \\
&= 4\sqrt{\pi} a_0^{3/2} \cdot \frac{1}{(1+a_0^2 k^2)^2} .
\end{aligned} \tag{4.27}$$

4.8. Gegeben sei ein Zentralkraftfeld, in dem ein diskretes Energiespektrum existiert. Man beweise, dass der zu einer bestimmten Drehimpulsquantenzahl l gehörige kleinste Energiewert mit zunehmendem l größer wird.

Der Hamiltonoperator kann in der folgende Form

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right\} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} = \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (4.28)$$

dargestellt werden. Damit ergeben sich die Energien durch die Erwartungswerte von \hat{H} mit den entsprechenden Wellenfunktionen aus:

$$E_l^{\min} = \int d^3\mathbf{r} \psi_l^* \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_l \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} E_{l+1}^{\min} &= \int d^3\mathbf{r} \psi_{l+1}^* \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} \right) \psi_{l+1} \\ &= \int d^3\mathbf{r} \psi_{l+1}^* \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_{l+1} + \int d^3\mathbf{r} \psi_{l+1}^* \frac{\hbar^2}{m} \frac{(l+1)}{r^2} \psi_{l+1} . \end{aligned} \quad (4.30)$$

Der zweite Summand in (4.30) ist immer positiv. Da ψ_l zum kleinsten Eigenwert von

$$\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (4.31)$$

gehört, muss gelten:

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{l+1}^* \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_{l+1} > \int d^3\mathbf{r} \psi_l^* \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_l . \quad (4.32)$$

Damit ist die Behauptung bewiesen.

4.9. Die Wechselwirkung zwischen einem Proton und einem Neutron sei näherungsweise durch das Potential

$$V(r) = -Ae^{-r/a} \quad (4.33)$$

beschreibbar. Man berechne die Wellenfunktion des Grundzustandes ($l=0$) und die Beziehung zwischen der Topftiefe A und der Größe a , die die Reichweite der Wechselwirkung charakterisiert.

Hinweis: Man führe die radiale Schrödingergleichung auf die Besselsche Differentialgleichung zurück.

Es wird ein Zweikörperproblem behandelt, bei dem die Teilchen nahezu gleiche Masse haben. $m_n = 1838,6836605 m_e$, $m_p = 1836,152672 m_e$. Für die effektive Masse ergibt sich damit $\mu = m_n m_p / (m_n + m_p) \approx m_p / 2$. Die radiale Schrödingergleichung für $l=0$ lautet dann, wenn man für den Radialteil $R_0(r) = u_0/r$ ansetzt:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} - A e^{-r/a} u_0(r) &= E u_0(r) \\ \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E + A e^{-r/a}] u_0(r) &= 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Mit einer Transformation $\xi = \exp(-r/2a)$ ergibt sich die Besselsche Differentialgleichung

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d\chi}{d\xi} + \left(c^2 - \frac{k^2}{\xi^2}\right)\chi = 0. \quad (4.35)$$

Dabei gilt

$$c^2 = \frac{8\mu}{k^2} Aa^2, \quad k^2 = -\frac{8\mu}{\hbar^2} Ea^2 > 0. \quad (4.36)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist:

$$\chi(\xi) = B_1 J_k(c\xi) + B_2 Y_k(c\xi). \quad (4.37)$$

Der Radialteil der Wellenfunktion muss für $r \rightarrow \infty$ verschwinden. Außerdem muss $R_0(0)$ endlich sein. Aus diesem Grunde ist $B_2 = 0$. Damit lautet die Lösung

$$R_0(r) = \frac{B_1}{r} J_k\left(ce^{-r/(2a)}\right). \quad (4.38)$$

Damit $R_0(r)$ an $r = 0$ endlich ist, muss $J_k(c) = 0$ gelten. Diese Gleichung liefert implizit über die erste Nullstelle der Besselfunktion den Zusammenhang zwischen A und a .

4.4 Der Elektronenspin

4.10. Der Spin ist ein Drehimpuls. Es gelten also auch die Vertauschungsregeln für Drehimpulse. Die Spinkomponenten \hat{S}_i können durch die Paulischen Spinmatrizen $\hat{\sigma}_i$ dargestellt werden. Die Paulischen Spinmatrizen sind durch

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

gegeben. Man zeige, dass die Spinoperatoren $\hat{S}_i = \hbar \hat{\sigma}_i / 2$ die Drehimpulsvertauschungsregeln erfüllen. Man gebe die Eigenfunktionen χ_+ , χ_- von $\hat{\sigma}_z$ an. Man werte mit $\hat{\sigma}_+ = (\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)/2$ den Ausdruck $\hat{\sigma}_+ \chi_-$ aus. $\hat{\sigma}_\pm = (\hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y)/2$ sind die sogenannten Umklapp- oder Leiter-Operatoren. Machen Sie sich die Bedeutung der Bezeichnung klar.

Der Spin ist ein Drehimpuls. Daher genügen der Spin und die Spinmatrizen folgenden Vertauschungsregeln

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, \quad [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hbar \hat{\sigma}_z. \quad (4.40)$$

Dies gilt auch für die zyklischen Vertauschungen der Komponenten. Die Vertauschungsregeln der Spinmatrizen werden durch die entsprechenden Matrixmultiplikationen verifiziert.

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

$$= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

$$= 2i \hat{\sigma}_z . \quad (4.43)$$

Die Eigenfunktionen von $\hat{\sigma}_z$ sind Spaltenvektoren, für die gelten muss:

$$\hat{\sigma}_z \chi_{\pm} = c \chi_{\pm} . \quad (4.44)$$

Die Eigenwerte von \hat{S}_z sind $\pm \hbar/2$. Die Konstante c ist deshalb ± 1 . Als linear unabhängige Eigenvektoren werden zwei orthogonale Spaltenvektoren der Norm 1 gewählt. Die Eigenvektoren sind also:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (4.45)$$

Es ergibt sich für die Anwendung von $\hat{\sigma}_+$ auf χ_-

$$\hat{\sigma}_+ \chi_- = \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (4.46)$$

Durch $\hat{\sigma}_+$ wird ein Spin \downarrow in einen Spin \uparrow “umgeklappt“.

4.11. Man beweise durch vollständige Induktion für $n \geq 2$:

$$(\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^n = \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \quad (4.47)$$

für natürliche n .

Die Umklapp-Operatoren sind durch

$$\hat{\sigma}_{\pm} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x \pm i \hat{\sigma}_y) \quad (4.48)$$

gegeben. Damit folgt

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- &= \frac{1}{4} \{ \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + i \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x - i \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \} \\ &= \frac{1}{4} \{ 2\hat{I}_2 + i [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_x] \} \\ &= \frac{1}{2} (\hat{I}_2 + \hat{\sigma}_z) . \end{aligned} \quad (4.49)$$

Dabei ist \hat{I}_2 die zweidimensionale Einheitsmatrix.

• *Induktionsstart* $n = 2$

$$(\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^2 = \frac{1}{4} (\hat{I}_2 + \hat{\sigma}_z^2 + 2\hat{\sigma}_z) = \frac{1}{2} (\hat{I}_2 + \hat{\sigma}_z) = \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \quad (4.50)$$

- *Induktionsbehauptung* $n = k$

$$(\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^k = \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \quad (4.51)$$

- *Induktionsschritt* $n = k + 1$

$$(\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^{k+1} = (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^k (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-) = (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-)^2 = (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-) \quad (4.52)$$

4.12. Wie groß ist die Projektion des Quadrates des Spins $\hbar/2$ auf eine gegebene Richtung \mathbf{a} .

Hinweis: Man berechne $(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{a})^2 / a^2$.

Man drückt $\hat{\mathbf{S}}$ durch die Paulischen Spinmatrizen aus:

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y + \hat{\sigma}_z \mathbf{e}_z) . \quad (4.53)$$

Damit erhält man dann:

$$\begin{aligned} \frac{(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{a})^2}{a^2} &= \frac{\hbar^2}{4a^2} (\hat{\sigma}_x a_x + \hat{\sigma}_y a_y + \hat{\sigma}_z a_z) \cdot (\hat{\sigma}_x a_x + \hat{\sigma}_y a_y + \hat{\sigma}_z a_z) \\ &= \frac{\hbar^2}{4a^2} \{ \hat{\sigma}_x^2 a_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 a_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 a_z^2 + a_x a_y (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x) + a_x a_z (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x) \} \\ &= \frac{\hbar^2}{4a^2} \{ \hat{I}_2 a^2 + 0 \} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \hat{I}_2 . \end{aligned} \quad (4.54)$$

Dabei wurde verwendet, dass die Quadrate der Paulischen Spinmatrizen Einheitsmatrizen liefern und das $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 0$ für $i \neq j$ gilt.

Kapitel 5

Drehimpulsoperatoren

5.1. Es ist zu zeigen, dass

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (5.1)$$

der Umklappoperator \hat{L}_+ des Bahndrehimpulses ist. Man wende den Operator auf Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses an.

Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses sind Kugelflächenfunktionen. Es gilt

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad , \quad \hat{L}_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi) . \quad (5.2)$$

Die Kugelflächenfunktionen sind durch

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N_{lm} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (5.3)$$

gegeben. Die zugeordneten Legendreschen Polynome sind über

$$P_l^m \sim \sin^m \vartheta \frac{d^{l+m} \sin^{2l} \vartheta}{d(\cos \vartheta)^{l+m}} \quad (5.4)$$

definiert. Somit ergibt sich

$$\hat{L}_+ Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sim \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (5.5)$$

$$\sim \hbar e^{i\varphi} \left[m \cot \vartheta P_l^m e^{im\varphi} - P_l^{m+1} e^{im\varphi} - m \cot \vartheta P_l^m e^{im\varphi} \right] \quad (5.6)$$

$$\sim P_l^{m+1} e^{i(m+1)\varphi} \sim Y_{l,m+1}(\vartheta, \varphi) . \quad (5.7)$$

5.2. Die Beziehung

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{A}] = i (\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{J}} \times \mathbf{A}) \quad (5.8)$$

ist zu beweisen. Dabei ist \mathbf{A} eine vektorielle Größe, die den Vertauschungsregeln

$$[\hat{\mathbf{J}}_i, A_k] = i\epsilon_{ikl}A_l \quad (5.9)$$

genügt. ϵ_{ijk} ist der vollständig antisymmetrische Tensor dritter Stufe.

Der antisymmetrische Einheitstensor dritter Stufe ϵ_{ikl} ist definiert als ein Tensor, der in allen drei Indizes antisymmetrisch ist und für den $\epsilon_{123} = 1$ gilt. Von den 27 Komponenten sind nur die 6 von Null verschieden für die die Indizes eine Kombination der Zahlen 1, 2 und 3 bilden. Der Tensor hat den Wert +1, wenn die Indizes i, k und l durch eine gerade Anzahl von Permutationen aus 1, 2 und 3 hervorgehen. Wird eine ungerade Anzahl von Permutationen benötigt, um i, k, l aus 1, 2, 3 zu erzeugen, so hat der Tensor den Wert -1.

Die Richtigkeit von (5.8) wird anhand der x -Komponente gezeigt. Die Auswertung der linken Seite liefert:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{A}]_x = [\hat{\mathbf{J}}^2, A_x] = [\hat{J}_x^2, A_x] + [\hat{J}_y^2, A_x] + [\hat{J}_z^2, A_x] \quad (5.10)$$

$$= (\hat{J}_y \hat{J}_y A_x - A_x \hat{J}_y \hat{J}_y) + (\hat{J}_y \hat{J}_y A_x - A_x \hat{J}_y \hat{J}_y) \quad (5.11)$$

Der erste Summand auf der rechten Seite von (5.10) verschwindet auf Grund der Vertauschungsregel (5.9). (5.11) wird jetzt mit dieser Vertauschungsregel weiter ausgewertet. So erhält man mit $[\hat{J}_y, A_x] = \hat{J}_y A_x - A_x \hat{J}_y = i\epsilon_{yxz} A_z = -iA_z$

$$\begin{aligned} [\hat{J}_y^2, A_x] &= \hat{J}_y \hat{J}_y A_x - A_x \hat{J}_y \hat{J}_y \\ &= \hat{J}_y \{A_x \hat{J}_y - iA_z\} - \{\hat{J}_y A_x + iA_z\} \hat{J}_y \\ &= -i \{\hat{J}_y A_z + A_z \hat{J}_y\} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die Auswertung des anderen Summanden ergibt analog:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z^2, A_x] &= \hat{J}_z \hat{J}_z A_x - A_x \hat{J}_z \hat{J}_z \\ &= \hat{J}_z \{A_x \hat{J}_z + iA_y\} - \{\hat{J}_z A_x - iA_y\} \hat{J}_z \\ &= i \{\hat{J}_z A_y + A_y \hat{J}_z\} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Somit erhält man für (5.10) mit (5.12) und (5.13)

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{A}]_x = i \{ (\hat{J}_z A_y + A_y \hat{J}_z) - (\hat{J}_y A_z + A_z \hat{J}_y) \} \quad (5.14)$$

Die Auswertung der rechten Seite von (5.8) liefert

$$i(\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{J}} \times \mathbf{A})_x = i \left\{ \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ A_x & A_y & A_z \\ \hat{J}_x & \hat{J}_y & \hat{J}_z \end{vmatrix}_x - \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \hat{J}_x & \hat{J}_y & \hat{J}_z \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix}_x \right\} \quad (5.15)$$

Bei der weiteren Auswertung hat man zu beachten, dass die Komponenten von $\hat{\mathbf{J}}$ und \mathbf{A} gemäß (5.9) nicht vertauschbar sind. Man erhält also:

$$\begin{aligned}
i(\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{J}} \times \mathbf{A})_x &= i \{ (A_y \hat{J}_z - A_z J_y) - (\hat{J}_y A_z - \hat{J}_z A_y) \} \\
&= i \{ (\hat{J}_z A_y + A_y \hat{J}_z) - (\hat{J}_y A_z + A_z J_y) \} .
\end{aligned} \tag{5.16}$$

(5.14) und (5.16) sind gleich und damit ist die Behauptung bewiesen.

Anhang A

Mathematica Notebooks

Zum vertiefenden Einarbeiten in den Stoff wurden *Mathematica* Notebooks erstellt. Tabelle A.1 gibt einen Überblick über die ergänzenden Notebooks zum Inhalt des Buches. In Tabelle A.2 werden die Notebooks die sich direkt auf Übungsaufgaben beziehen, zusammengefaßt.

<i>Notebook</i>	<i>Kapitel</i>	<i>Inhalt</i>
MB1	2.2.1	Potentialtopf
MB2	2.2.1	Transfermatrixmethode
MB3	2.2.3	Beliebige Potentiale und WKB-Näherung
MB4	2.3.3	Reflexion und Streuung an Potentialtopf und Schwelle
MB5	2.3.5	Streuphasen und Resonanz-Streuung
MB6	2.4.2	Ritzsches Variationsverfahren
MB7	2.4.3	Störungsrechnung
MB8	3.3.1	Zerfallswahrscheinlichkeit, Berechnung der Zustände
MB9	4.2.4	Kugelflächenfunktionen
MB10	4.3.3	Radiale Wellenfunktionen im Wasserstoffatom
MB11	4.3.4	Wasserstoffatom im Potentialtopf
MB12	4.3.4	Numerov-Methode

Tabelle A.1 *Mathematica* Notebooks zum Buch.

<i>Notebook</i>	<i>Kapitel</i>	<i>Aufgabe</i>	<i>Inhalt</i>
MA1	2.2	2.4	Num. Integration der 1D-Schrödingergleichung
MA2	2.2	2.6	Doppelmulde
MA3	2.3	2.9	Streuung am 1D-Potentialtopf

Tabelle A.2 *Mathematica* Notebooks zu den Übungsaufgaben.

Sachverzeichnis

- α -Zerfall, 35
- δ -Potential, 21
- Atomkern, 45
- Bahndrehimpuls, 43
 - Umklappoperator, 49
- Bohr-Sommerfeldsche Quantenbedingung, 7–9
- Comptoneffekt, 2
- de-Broglie-Wellenlänge, 4
- Doppelmulde, 17
- Ehrenfestsche Sätze, 32
- Elektronenbeugung, 3
- Erwartungswert
 - Impuls, 29
- Geiger-Nuttall-Gesetz, 35
- harmonischer Oszillator, 31
- Mathematica-Notebook, 16, 18, 23
- Metalloberfläche, 33
- Myonium, 40
- Operatoren
 - hermitesche, 13
- Orthonormalsysteme, 14
- Paulische Spinmatrizen, 46, 47
- Photoeffekt, 1
- Positronium, 40
- Rotator, 42
- Schrödingergleichung
 - Zeitablauf, 30
- Separation, 13
 - Schwerpunktsbewegung, 39
- Spin, Projektion auf Richtung, 48
- starrer Rotator, 42
- statistischer Operator, 30
- Strahlungsgesetze, 6
- Strahlungsgleichgewicht in Himmelskörpern, 5
- Streuphase, 22
- Streuzustände, 21
- Struktur Proton, 11
- Unbestimmtheitsrelation, 10, 31
- Variationsprinzip, 26
- Wasserstoffatom
 - endlicher Kernradius, 41
 - Fouriertransformierte, 44
 - Grundzustand, 23
 - Variationsrechnung, 23
- Welle-Teilchen-Dualismus, 11
- Zentralkraftfeld, 39, 44

Literaturverzeichnis

1. W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik, Band 5 Quantenmechanik Teil 1: Grundlagen*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1992.
2. Wolfgang Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik, Band 5 Quantenmechanik, Teil 2: Methoden und Anwendungen*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1993.
3. F. Schwabl. *Quantenmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, 1992.
4. Walter Greiner. *Theoretische Physik - Ein Lehr- und Übungsbuch für Anfangssemester, Band 4: Quantenmechanik I - Eine Einführung*. Verlag Harry Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 1984.
5. Torsten Fließbach. *Quantenmechanik - Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*. Spektrum Akademischer Verlag, 2008.
6. E.W. Schpolksi. *Atomphysik, Band II*. Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1969.