Q.59 Teilchen im konstanten magnetischen Feld (F 2018.Q.1)

(a) Wegen $A_1 = 0$, $A_2 = B_0 x$, $A_3 = 0$ gelten offenbar

$$\begin{aligned}\big[p_a, A_b(\mathbf{r})\big] &= 0 \qquad \text{(falls } a \neq 1 \text{ und } b \neq 2\text{)},\\ \big[p_1, A_2(\mathbf{r})\big] &= -\mathrm{i}\hbar B_0 \big[\partial_x, x\big]\\ &= -\mathrm{i}\hbar B_0.\end{aligned}$$

(b) Vereinfachung von H:

$$H = \frac{1}{2m}\Big[p_x^2 + \Big(p_y - qB_0\,x\Big)^2 + p_z^2\Big].$$

Da also H (zwar von x, aber) nicht von y oder z abhängt, so folgt

$$[H, p_y] = [H, p_z] = 0 \qquad \Big(\text{aber} \quad [H, p_x] \neq 0\Big).$$

(c) Mit dem Ansatz $\psi(x, y, z) = \chi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0 y/\hbar}$ finden wir

$$\begin{aligned}p_x^2\psi &= -\hbar^2\,\chi''(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0 y/\hbar},\\ \Big(p_y - qB_0\,x\Big)^2\psi &= \Big(p_0 - qB_0\,x\Big)^2\psi,\\ p_z^2\psi &= 0,\end{aligned}$$

Somit folgt aus der stationären SGl

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

eine 1D SGl für die Funktion $\chi(x)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\chi''(x) + \frac{(qB_0)^2}{2m}\Big(x - \frac{p_0}{qB_0}\Big)^2\chi(x) = E\chi(x).$$

Dies ist die SGl eines 1D harmonischen Oszillators mit Frequenz

$$\omega_B = \frac{qB_0}{m}$$

(und Gleichgewichtslage $x_0 = \frac{p_0}{qB_0}$). Die möglichen Eigenwerte sind

$$E_n = \big(n + \tfrac{1}{2}\big)\hbar\omega_B \qquad (n = 0, 1, 2, ...),$$

die sog. **Landau-Niveaus**.

Q.60 Gebundene Zustände im endlich tiefen Potentialtopf (F 2018.Q.2)

(a) Anwendung von H auf die gegebene Wellenfunktion (2) ergibt (es gilt $V_0 > 0$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\phi_\pm(x) \;=\; \left\{\begin{array}{c} -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \\ \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - V_0\right) \\ -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \end{array}\right\}\phi_\pm(x) \;=\; E\phi_\pm(x).$$

Folglich besteht zwischen E, k und κ der Zusammenhang

$$E \;=\; -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \;=\; \frac{\hbar^2k^2}{2m} - V_0.$$

(b) Anschlußbedingungen bei $x = a$: Stetigkeit von (i) $\phi_\pm(x)$ und von (ii) $\phi'_\pm(x)$,

$$\begin{aligned}
\text{(i):}\quad \beta\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right) &\;=\; \alpha, \\
\text{(ii):}\quad \beta\mathrm{i}k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \mp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right) &\;=\; -\kappa\alpha.
\end{aligned}$$

Da $\phi_+(x)$ gerade und $\phi_-(x)$ ungerade sind, so sind die entsprechenden Bedingungen bei $x = -a$ hiermit bereits automatisch erfüllt.

(c) Einsetzen von (i) in (ii) ergibt

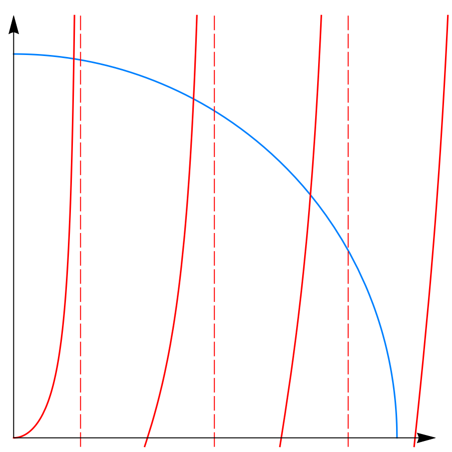
$$\begin{aligned}
\mathrm{i}k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \mp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right) &\;=\; -\kappa\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right), \\
\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \mp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}} &\;=\; \frac{-\kappa}{\mathrm{i}k}, \\
\pm\mathrm{i}\left[\tan(ka)\right]^{\pm 1} &\;=\; \mathrm{i}\,\frac{\kappa}{k} \;=\; \mathrm{i}\sqrt{\frac{k_0^2 - k^2}{k^2}} \qquad \left(\frac{\hbar^2k_0^2}{2m} = V_0\right),
\end{aligned}$$

also die gewünschte Beziehung: $\tan(ka) \;=\; \pm(\frac{k_0^2-k^2}{k^2})^{\pm 1/2}$.

(d) Für die Zustände gerader Parität (oberes VZ, $n = 1, 3, 5, ...$) lautet diese Beziehung

$$(ka)\,\tan(ka) \;=\; \sqrt{(k_0a)^2 - (ka)^2}.$$

Die Lösungen $k_n \;=\; \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_n + V_0)}$, mit $n \;=\; 1, 3, 5, ...$ findet man aus der Skizze: $k_n \;=\; k_0u_n$, mit den Abszissen u_n der Schnittpunkte von G_f (rot) mit G_g (blau).



Die Funktionen $f(u) = u\tan(k_0a\,u)$ (rot) und $g(u) = \sqrt{1-u^2}$ (blau), der Variable $u = \frac{ka}{k_0a} = \frac{k}{k_0}$, hier dargestellt für den Fall $k_0a = 9$.

Q.61 Variation (H 2018.Q.1)

(a) Normierung von $\psi_\lambda(x) = A(\lambda)\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ (wir benutzen ein angegebenes Integral):

$$1 \;\equiv\; \int \mathrm{d}x\, |\psi_\lambda(x)|^2 \;=\; A(\lambda)^2 \int \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-2\lambda x^2} \;=\; A(\lambda)^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}},$$

also

$$A(\lambda) \;=\; \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}.$$

(b) Der gesuchte Erwartungswert ist

$$\begin{aligned}
\langle\psi_\lambda|H|\psi_\lambda\rangle \;&=\; \int \mathrm{d}x\, \psi_\lambda^*(x)\, \hat{H}\psi_\lambda(x) \\
&=\; \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \int \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \;+\; kx^4\right] \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \\
&=\; \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \int \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\big(4\lambda^2 x^2 - 2\lambda\big) \;+\; kx^4\right] \mathrm{e}^{-\lambda x^2} \\
&=\; \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \int \mathrm{d}x\, \left[\frac{\hbar^2\lambda}{m} \;-\; \frac{2\hbar^2\lambda^2}{m}x^2 \;+\; kx^4\right] \mathrm{e}^{-2\lambda x^2} \\
&=\; \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \left[\frac{\hbar^2\lambda}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \;-\; \frac{2\hbar^2\lambda^2}{m}\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8\lambda^3}} \;+\; k\cdot\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{32\lambda^5}}\right] \\
&=\; \frac{\hbar^2}{2m}\lambda \;+\; \frac{3k}{16}\frac{1}{\lambda^2} \\
&=\; E(\lambda).
\end{aligned}$$

(c) Der minimierende Wert λ_0 von $E(\lambda)$ ist die Lösung der Gleichung

$$E'(\lambda) \;\equiv\; \frac{\hbar^2}{2m} \;-\; \frac{3k}{8}\lambda^{-3} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_0^3 \;=\; \frac{3km}{4\hbar^2}.$$

Das entsprechende Minimum von $E(\lambda)$ ist

$$E(\lambda_0) \;=\; \lambda_0\left(\frac{\hbar^2}{2m} \;+\; \frac{3k}{16\lambda_0^3}\right) \;=\; \left(\frac{3km}{4\hbar^2}\right)^{1/3}\frac{3\hbar^2}{4m}.$$

(d) Mit $|\psi_\lambda\rangle = \sum_n c_n(\lambda)|\phi_n\rangle$ folgt

$$\begin{aligned}
\langle\psi_\lambda|H|\psi_\lambda\rangle \;&=\; \sum_{n,n'=0}^{\infty} c_n^*(\lambda)c_{n'}(\lambda)\langle\phi_n|H|\phi_{n'}\rangle \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} |c_n(\lambda)|^2 E_n \\
&\geq\; \sum_{n=0}^{\infty} |c_n(\lambda)|^2 E_0 \;=\; E_0,
\end{aligned}$$

wobei benutzt wurde, daß: $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \ldots$ und $\sum_{n=0}^{\infty} |c_n(\lambda)|^2 = 1$.

Q. 62 Teilchen im Zylinder (H 2018.Q.2)

(a) Da das Potential außerhalb des Zylinders unendlich ist, $V(r) = \infty$ für $r > r_0$, so muß die Wellenfunktion dort verschwinden. Da außerdem $V(r) = 0$ für $r < r_0$, so können wir die zeitunabh. Schrödinger-Gleichung (SGl) (für $r \leq r_0$) schreiben als

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 \Phi(r,\phi,z) \;=\; E\,\Phi(r,\phi,z), \qquad\qquad (r \leq r_0),$$

mit der **Randbedingung** (bei $r = r_0$)

$$\Phi(r_0,\phi,z) \;=\; 0 \qquad (\text{alle } \phi, z). \tag{1}$$

Zusätzlich gilt (bezüglich ϕ) die **Periodizitätsbedingung**

$$\Phi(r,\phi+2\pi,z) \;=\; \Phi(r,\phi,z) \qquad (\text{alle } r, z). \tag{2}$$

Mit dem Produktansatz $\Phi(r,\phi,z) = R(r)P(\phi)Z(z)$ und der angegebenen Form des Laplaceoperators ergibt Division der SGl durch $-\frac{\hbar^2}{2M}R(r)P(\phi)Z(z)$

$$\frac{R''(r)}{R(r)} + \frac{R'(r)}{rR(r)} + \frac{P''(\phi)}{r^2P(\phi)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)} \;=\; -\frac{2ME}{\hbar^2}.$$

Als einziger z-abhängiger Term muß $\frac{Z''(z)}{Z(z)} = -k^2$ eine (negative) Konstante sein,

$$Z(z) \;=\; \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \qquad\qquad (k \in \mathbb{R})$$

(eine positive Konstante $+k^2$ hätte divergente Funktionen $Z(z) = \mathrm{e}^{kz}$ zur Folge). Multiplikation der resultierenden Gleichung mit r^2 liefert

$$\frac{r^2R''(r)}{R(r)} + \frac{rR'(r)}{R(r)} + \frac{P''(\phi)}{P(\phi)} + \left(\frac{2ME}{\hbar^2} - k^2\right)r^2 \;=\; 0.$$

Als einziger ϕ-abhängiger Term muß $\frac{P''(\phi)}{P(\phi)} = -m^2$ eine (negative) Konstante sein,

$$P(\phi) \;=\; \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}m\phi} \qquad\qquad (m \in \mathbb{N}_0)$$

(eine positive Konstante $+m^2$ ergäbe $P(\phi) = \mathrm{e}^{\pm m\phi}$, im Widerspruch zu Gl. (2)). Somit verbleibt für $R(r)$ [nach Multiplikation mit $R(r)$] die Eigenwertgleichung

$$r^2R''(r) + rR'(r) + \left[\left(\kappa^2 - k^2\right)r^2 - m^2\right]R(r) \;=\; 0 \qquad\qquad \left(E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2M}\right). \tag{3}$$

(b) Wir bemerken zuerst, daß $\kappa^2 - k^2 \geq 0$ ist, denn es gilt

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M} \;\equiv\; E \;=\; \frac{1}{2M}\langle -\hbar^2\nabla^2\rangle \;&=\; \frac{1}{2M}\langle \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2\rangle \\ &=\; \frac{1}{2M}\underbrace{\langle \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2\rangle}_{\geq 0} + \frac{\hbar^2k^2}{2M},\end{aligned}$$

wobei wir zuletzt $Z(z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ (und $\hat{P}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}$) benutzt haben.
Daher können wir substituieren

$$\lambda r \;=\; w \qquad\qquad \left(\lambda = \sqrt{\kappa^2 - k^2} \geq 0\right).$$

Schreiben wir entsprechend

$$R(r) \;=\; J(\lambda r) \;\equiv\; J(w),$$

so folgt (mit $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} = \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}w} = \lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}w}$)

$$\begin{aligned} r\,R'(r) \;&\equiv\; r\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\,R(r) \;&=\; \frac{w}{\lambda}\,\lambda\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}w}\,J(w) \;=\; w\,J'(w), \\ r^2 R''(r) \;&\equiv\; r^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\,R(r) \;&=\; \quad \ldots \quad \;=\; w^2 J''(w). \end{aligned}$$

Damit geht also Gl. (3) für $R(r)$ über in die **Besselsche DGl** für $J(w)$,

$$w^2 J''(w) \;+\; wJ'(w) \;+\; \big[w^2 - m^2\big]\,J(w) \;=\; 0.$$

(c) Damit die Wellenfunktion $\varPhi(r,\phi,z) \;=\; J(\lambda r)\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}m\phi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ bei gegebenem Wert von $m \in \{0,1,2,...\}$ normierbar ist, müssen wir $J(w) = J_m(w)$ wählen,

$$R(r) \;=\; J_m(\lambda r).$$

Damit außerdem die Randbedingung $R(r_0) = 0$ erfüllt ist, muß $w = \lambda r_0$ eine der Nullstellen von $J_m(w)$ sein,

$$\lambda r_0 \;=\; w_{m,n}.$$

λ kann also nur die Werte $\lambda_{m,n} = \frac{w_{m,n}}{r_0}$ annehmen, und die Energieeigenwerte sind

$$E_{m,n}(k) \;\equiv\; \frac{\hbar^2}{2M}\Big(\lambda_{m,n}^2 + k^2\Big) \;=\; \frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{w_{m,n}}{r_0}\right)^2 + k^2\right] \qquad \left\{\begin{array}{l} m = 0,1,2,..., \\ n = 1,2,3,..., \end{array}\right.$$

mit den zugehörigen Eigenfunktionen

$$\varPhi^{(k)}_{\pm m,n}(\mathbf{r}) \;=\; J_m(\lambda_{m,n} r)\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}m\phi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}.$$

Diese sind zugleich Eigenfunktionen der Erhaltungsgrößen $\hat{P}_z$ und $\hat{L}_z$,

$$\big[\hat{H},\hat{P}_z\big] \;=\; \big[\hat{H},\hat{L}_z\big] \;=\; 0.$$

Die Quantenzahlen k und m sind festgelegt durch deren Eigenwerte $\hbar k$ bzw. $\pm m\hbar$.

• Im Grundzustand gilt $k = 0$, $m = 0$, $n = 1$, da $w_{0,1}$ die kleinste aller Nullstellen $w_{m,n} > 0$ der $J_m(w)$ ist.

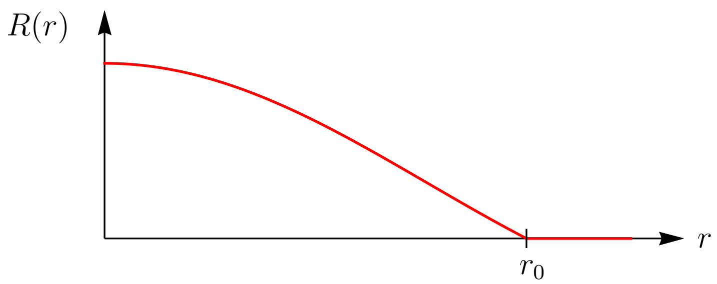


Figure 1: **Rot:** Die Radialfunktion $R(r) = N \cdot J_0(\lambda_{0,1} r)\cdot \varTheta(r_0 - r)$ im Grundzustand.