

Q.55 Teilchen im sphärischen Delta-Potential (F2017.Q.1)

(a) Da $\Psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r}$ nicht von den Winkeln θ, ϕ abhängt, so gilt

$$\begin{aligned}\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{ru'(r) - u(r)}{r^2} = \frac{1}{r^2} [ru''(r)] \\ &= \frac{u''(r)}{r}.\end{aligned}\quad (1)$$

Mit dem Potential $V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nu\delta(r - R)$ lautet die Schrödinger-Gleichung also

$$u''(r) + \nu\delta(r - R)u(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u(r).\quad (2)$$

Wie in der Angabe schreiben wir hierfür

$$u''(r) - \kappa^2 u(r) = -\nu\delta(r - R)u(r), \quad \kappa^2 \equiv \frac{2m(-E)}{\hbar^2} > 0.\quad (3)$$

Da der Operator $\hat{\mathbf{L}}^2$ nach den Winkelvariablen θ, ϕ ableitet, so gilt $\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\mathbf{r}) = 0$. Somit ist $\Psi(\mathbf{r})$ Eigenfunktion von $\hat{\mathbf{L}}^2$ zum Eigenwert $\ell(\ell + 1)\hbar^2 = 0$,

$$\ell = 0.\quad (4)$$

(b) Integration $\int_{R-\epsilon}^{R+\epsilon} du \dots$ der Schrödinger-Gleichung liefert zunächst

$$\left[u'(R + \epsilon) - u'(R - \epsilon) \right] - \kappa^2 \int_{R-\epsilon}^{R+\epsilon} du u(r) = -\nu u(R).\quad (5)$$

Im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ folgt die gewünschte Beziehung,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[u'(R + \epsilon) - u'(R - \epsilon) \right] = -\nu u(R).\quad (6)$$

(c) In den Bereichen I ($r < R$) und II ($r > R$) gilt jeweils

$$u''(r) - \kappa^2 u(r) = 0 \quad (r \neq R).\quad (7)$$

Wegen $\kappa > 0$ ($E < 0$) ist die Lösung jeweils von der Form

$$u(r) = \left\{ \begin{array}{ll} Ae^{\kappa r} + Be^{-\kappa r} & (r < R) \\ Ce^{\kappa r} + De^{-\kappa r} & (r > R) \end{array} \right\}.\quad (8)$$

Damit $\Psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r}$ am Ursprung regulär ist, muß $u(0) = 0$, also $A + B = 0$ sein. Damit $\Psi(\mathbf{r})$ normierbar ist, muß $C = 0$ sein,

$$u(r) = \left\{ \begin{array}{ll} A(e^{\kappa r} - e^{-\kappa r}) & (r < R) \\ De^{-\kappa r} & (r > R) \end{array} \right\}.\quad (9)$$

(d) Nur Skizze (i) ist mit dem Ansatz aus Teil (c) verträglich.

(e) Der Ansatz aus Teil (c) muß bei $r = R$ stetig sein,

$$A(e^{\kappa R} - e^{-\kappa R}) = D e^{-\kappa R} \quad \Rightarrow \quad D = A(e^{2\kappa R} - 1). \quad (10)$$

Damit ergibt sich (mit A als Normierungskonstante) die Funktion

$$u(r) = \left\{ \begin{array}{ll} A(e^{\kappa r} - e^{-\kappa r}) & (r < R) \\ A(e^{2\kappa R} - 1)e^{-\kappa r} & (r > R) \end{array} \right\}. \quad (11)$$

Der Wert von κ folgt aus der in Teil (b) hergeleiteten Bedingung für $u'(r)$,

$$-\kappa D e^{-\kappa R} - \kappa A(e^{\kappa R} + e^{-\kappa R}) = -\nu D e^{-\kappa R}. \quad (12)$$

Mit $D = A(e^{2\kappa R} - 1)$ aus der Stetigkeitsbedingung wird daraus

$$\nu R = \frac{2\kappa R}{1 - e^{-2\kappa R}}. \quad (13)$$

(f) Man plote die Funktion $f(\beta) = \frac{\beta}{1 - e^{-\beta}}$ des dimensionslosen Parameters $\beta = 2\kappa R$ und bestimme die Schnittpunkte des Graphen mit der Horizontalen $g(\beta) = \alpha \equiv \nu R$. Da $f(\beta)$ streng monoton steigend ist, mit $f(0) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\beta}{\beta + O(\beta^2)} = 1$, so gibt es

- **keine Lösung** im Fall $\alpha < 1$,
- **genau eine Lösung** im Fall $\alpha \geq 1$.

Der Parameter α ist, ebenso wie β , dimensionslos.

Q.56 Oszillierende Zustände (F2017.Q.2)

(a) Die gegebene Wellenfunktion,

$$\Psi(x, t) = e^{-i\omega t/3} \left[\sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right) + \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(2\pi \frac{x}{a}\right) e^{-i\omega t} \right], \quad (14)$$

läßt sich schreiben als

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_1(x) e^{-i\omega t/3} + \phi_2(x) e^{-i4\omega t/3} \right] \quad \left\{ \begin{array}{l} \phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right), \\ \phi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(2\pi \frac{x}{a}\right). \end{array} \right. \quad (15)$$

LS der zeitabh. Schrödinger-Gleichung (zaSGl):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar\omega}{3} \phi_1(x) e^{-i\omega t/3} + \frac{4\hbar\omega}{3} \phi_2(x) e^{-i4\omega t/3} \right]. \quad (16)$$

RS der zaSGl:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \phi_1(x) e^{-i\omega t/3} + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \phi_2(x) e^{-i4\omega t/3} \right]. \quad (17)$$

Die zaSGl ist also erfüllt, "LS = RS", wenn $\omega = \frac{3\hbar\pi^2}{2ma^2}$.

(b) Die Energie $\hbar\omega = \frac{4}{3}\hbar\omega - \frac{1}{3}\hbar\omega$ ist gleich der Energiedifferenz $E_2 - E_1$ der beiden beteiligten Eigenzustände $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ von \hat{H} ,

$$\Psi(x, t) = e^{-iE_1 t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_1(x) + \phi_2(x) e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right]. \quad (18)$$

- (c) Da ϕ_1 (Grundzustand) und ϕ_2 mit gleicher Wahrscheinlichkeitsamplitude $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ beteiligt sind, gilt $W_1 = |c|^2 = \frac{1}{2}$.
 W_1 ist zeitunabhängig, da Eigenzustände stationär und paarweise orthogonal sind.
- (d) Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Intervall $[0, \frac{a}{4}]$ zu finden, beträgt

$$\begin{aligned}
W(t) &= \int_0^{a/4} dx |\Psi(x, t)|^2 \\
&= \frac{1}{a} \int_0^{a/4} dx \left\{ \left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(2\pi\frac{x}{a}\right) \cos \omega t \right]^2 + \left[\sin\left(2\pi\frac{x}{a}\right) \sin \omega t \right]^2 \right\} \\
&= \int_0^{1/4} dy \left\{ \left[\sin(\pi y) + \sin(2\pi y) \cos \omega t \right]^2 + \left[\sin(2\pi y) \sin \omega t \right]^2 \right\} \\
&= \int_0^{1/4} dy \left\{ \sin^2(\pi y) + 2 \sin(\pi y) \sin(2\pi y) \cos \omega t + \sin^2(2\pi y) \right\} \\
&= \frac{1}{8} - \frac{\sin \frac{\pi}{2}}{4\pi} + 2 \left[\frac{\sin \frac{\pi}{4}}{2\pi} - \frac{\sin \frac{3\pi}{4}}{6\pi} \right] \cos \omega t + \frac{1}{8} - \frac{\sin \pi}{4\pi}, \tag{19}
\end{aligned}$$

wobei wir zuletzt einige der angegebenen Integrale benutzt,
sowie $\int_0^{1/4} dy \sin^2(2\pi y) = \frac{1}{2} \int_0^{1/2} du \sin^2(\pi u)$ substituiert haben,

$$W(t) = \underbrace{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{1}{\pi}\right)}_{0.170} + \underbrace{\frac{\sqrt{2}}{3\pi}}_{0.150} \cos \omega t, \quad \omega = \frac{3\hbar\pi^2}{2ma^2}. \tag{20}$$

Die Oszillationsfrequenz $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ entspricht der Periode $T = \frac{2\pi}{\omega}$.
Bei der (kinetischen) Energie $\bar{E} = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) = \frac{5}{6} \hbar\omega$ hätte ein klassisches Teilchen die Geschwindigkeit $v_{\text{cl}} = \sqrt{2\bar{E}/m}$, also die Periode

$$T_{\text{cl}} = \frac{2a}{v_{\text{cl}}} = \frac{2a\sqrt{m}}{\sqrt{2\bar{E}}} = \frac{2a\sqrt{m}}{\sqrt{\frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^4}{m^2 a^4}}} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^4}{m^2 a^4}}} = \frac{3}{\sqrt{10}} \frac{2\pi}{\omega} \approx T. \tag{21}$$

- (e) Der Mittelwert des Ortes x zur Zeit t berechnet sich gemäß

$$\langle x \rangle_t = \int_0^a dx x |\Psi(x, t)|^2. \tag{22}$$

Mit der gleichen Substitution wie in Teil (d) ergibt dies

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle_t &= a \int_0^1 dy y \left\{ \sin^2(\pi y) + 2 \cdot \sin(\pi y) \sin(2\pi y) \cos \omega t + \sin^2(2\pi y) \right\} \\
&= a \left\{ \frac{1}{4} - 2 \cdot \frac{8}{9\pi^2} \cos \omega t + \frac{1}{4} \right\} \\
&= a \left(\frac{1}{2} - \frac{16}{9\pi^2} \cos \omega t \right). \tag{23}
\end{aligned}$$

Dieser Mittelwert überquert den Mittelpunkt $x = \frac{a}{2}$ des Kastens immer dann, wenn $\cos \omega t$ gleich null wird, also zu den Zeiten

$$t = \frac{\pi}{2\omega}, \quad \frac{3\pi}{2\omega}, \quad \frac{5\pi}{2\omega}, \quad \dots \tag{24}$$

Q.57 Teilchen im Kastenpotential mit durchlässiger Wand (H2017.Q.1)

- (a) Die Wellenfunktionen von Grundzustand (gerade) und erstem angeregten Zustand (ungerade) sind im Limes $g \rightarrow \infty$ gegeben durch

$$\psi_0^\infty(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \left| \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right|, \quad \psi_1^\infty(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right). \quad (25)$$

In beiden Fällen gilt offenbar

$$\hat{H}\psi_{0,1}^\infty(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{0,1}^\infty(x) = \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}}_{E_0^\infty} \psi_{0,1}^\infty(x). \quad (26)$$

Im Limes $g \rightarrow \infty$ sind diese Zustände also tatsächlich **entartet**.

- (b) Wir schreiben die zeitunabh. SGI in der Form

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} g \delta(x) \psi(x) - \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad (|x| < L). \quad (27)$$

Integration $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \dots$ und anschließender Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ liefert

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m}{\hbar^2} g \psi(0). \quad (28)$$

- (c) Bei endlichem $g > 0$ bleibt die ungerade Wellenfunktion unverändert,

$$\psi_1^g(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right). \quad (29)$$

Dagegen nimmt die gerade Wellenfunktion folgende Form an,

$$\psi_0^g(x) = \begin{cases} \mathcal{N} \sin(k(L-x)) & (0 \leq x \leq L), \\ \mathcal{N} \sin(k(L+x)) & (-L \leq x \leq 0), \end{cases} \quad (30)$$

mit einer Normierungskonstante \mathcal{N} und einem $k < \frac{\pi}{L}$, welches durch die Bedingung aus Teil (b) festgelegt wird. Im Grenzfall $g \rightarrow 0$ wird $k = \frac{\pi}{2L}$ und

$$\psi_0^0(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{2L}x\right). \quad (31)$$

Da die Funktion $\psi_0^g(x)$ für $0 \leq g < \infty$ schwächer gekrümmt ist als $\psi_1^g(x)$, so gilt

$$E_0^g < E_1^g = E_0^\infty. \quad (32)$$

- (d) Der Anfangszustand $\psi(x, 0) = \phi_0(x) + \phi_1(x)$ entwickelt sich im Laufe der Zeit t als

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \phi_0(x) e^{-i\omega_0 t} + \phi_1(x) e^{-i\omega_1 t} \\ &= e^{-i\omega_0 t} \left[\phi_0(x) + \phi_1(x) e^{-i\omega t} \right], \quad \omega = \omega_1 - \omega_0 = \frac{E_1 - E_0}{\hbar}. \end{aligned} \quad (33)$$

Die W'keitsdichte $|\psi(x, t)|^2$ geht also nach Ablauf der Zeit $T = \frac{\pi}{\omega}$, mit $e^{-i\omega T} = -1$, in ihr Spiegelbild bezüglich $x = 0$ über, $|\psi(x, T)|^2 = |\psi(-x, 0)|^2$.

Mit $g \rightarrow \infty$ wird $\omega_1 = \omega_0$, also $\omega = 0$ und $|\psi(x, t)|^2$ zeitunabhängig: $T \rightarrow \infty$.

Q.58 Bindungszustand im sphärischen Potentialtopf (H 2017.Q.2)

Vorbem.: Laplace-Operator $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ in Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) ,

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}}_{= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hat{L}^2}{r^2}.\end{aligned}$$

Das Quadrat \hat{L}^2 des Bahndrehimpulsoperators wirkt nur auf die Winkelkoordinaten (θ, ϕ) ,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).$$

Dabei gilt: $\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.

(a) Die Wellenfunktion faktorisiert gemäß $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.

Schreiben wir $R(r) = \frac{u(r)}{r}$, so genügt $u(r)$ bekanntlich¹ der **Radialgleichung**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + V_{\text{eff}}^{(\ell)}(r) u(r) = E u(r), \quad V_{\text{eff}}^{(\ell)}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2}.$$

Im Fall $\ell = 1$ und mit $E = 0$ wird daraus (nach Multiplikation mit $-\frac{2m}{\hbar^2}$)

$$u''(r) = \begin{cases} \left[\frac{2}{r^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right] u(r) & (r < a : V(r) = -V_0) \\ \frac{2}{r^2} u(r) & (r > a : V(r) = 0) \end{cases}$$

Außenraum $r > a$: Der Ansatz $u(r) = r^n$ liefert die Lösung $u(r) = C_1 r^{-1} + C_2 r^2$.

Eine normierbare Wellenfunktion $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ erfordert $C_2 = 0$, also $u(r) = \frac{C_1}{r}$,

$$\int_a^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = \int_a^\infty dr |u(r)|^2 = \int_a^\infty dr \frac{|C_1|^2}{r^2} < \infty.$$

(b) Innenraum $r < a$: Dem Hinweis $R(r) \propto j_1(kr)$ folgend setzen wir $u(r) = C r j_1(kr)$,

$$\begin{aligned}u(r) &= \frac{C}{k} \left[\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right], \\ \Rightarrow u'(r) &= \frac{C}{k} \left[\frac{\cos kr}{r} - \frac{\sin kr}{kr^2} + k \sin kr \right], \\ \Rightarrow u''(r) &= \frac{C}{k} \left[\frac{2}{r^2} \left(\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right) - k^2 \left(\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right) \right] = \left[\frac{2}{r^2} - k^2 \right] u(r).\end{aligned}$$

Die Radialgleichung für $r < a$ ist also tatsächlich erfüllt, wenn wir identifizieren

$$k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}.$$

¹Mit der angegebenen Form von ∇^2 und mit $\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ sieht man dies so:

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right) \frac{u(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} u(r) \right) Y_{\ell m}(\theta, \phi).\end{aligned}$$

(c) Nach den Teilen (b) und (a) hat die Radialfunktion nunmehr die Form

$$R(r) \equiv \frac{u(r)}{r} = \begin{cases} \frac{C}{kr} \left[\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right] & (r < a) \\ \frac{C_1}{r^2} & (r > a) \end{cases} \quad \left(k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \right). \quad (34)$$

Bei $r = a$ muß sowohl $R(r)$ selbst als auch die Ableitung $R'(r)$ stetig sein. Letzteres trifft genau dann zu, wenn auch die einfachere (nennerfreie) Funktion

$$r^2 R(r) = \begin{cases} \frac{C}{k^2} [\sin kr - kr \cos kr] & (r < a), \\ C_1 & (r > a), \end{cases}$$

bei $r = a$ eine stetige Ableitung hat, wenn also

$$\frac{d}{dr} r^2 R(r) = \begin{cases} Cr \sin kr & (r < a), \\ 0 & (r > a), \end{cases}$$

bei $r = a$ stetig ist. Zu diesem Ende muß offenbar $\sin ka = 0$ sein,

$$ka \equiv \frac{\sqrt{2mV_0} a^2}{\hbar} = n\pi \quad (n \in \mathbb{Z}).$$

Der Fall $n = 0$ ($k = 0$) ist auszuschließen, da sonst im Innern $R(r) \propto j_1(0) = 0$ wäre. Wegen $j_1(-x) = -j_1(x)$ können wir uns außerdem auf positive $n > 0$ beschränken. Der kleinstmögliche Wert von $V_0 a^2$ (bei dem es gerade noch einen gebundenen Zustand mit $\ell = 1$ gibt) gehört also zum Fall $n = 1$,

$$V_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}.$$

(d) Stetigkeit von $R(r)$, Gl. (34), bei $r = a$ erfordert nun (mit $ka = \pi$):

$$\frac{C}{\pi} = \frac{C_1}{a^2} \Leftrightarrow C_1 = C \frac{\pi}{k^2} : \quad R(r) = C \cdot \begin{cases} j_1\left(\pi \frac{r}{a}\right) & (r < a) \\ \frac{1}{\pi} \frac{a^2}{r^2} & (r > a) \end{cases},$$

mit $j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$ und einer Normierungskonstante $N_1 = C$.

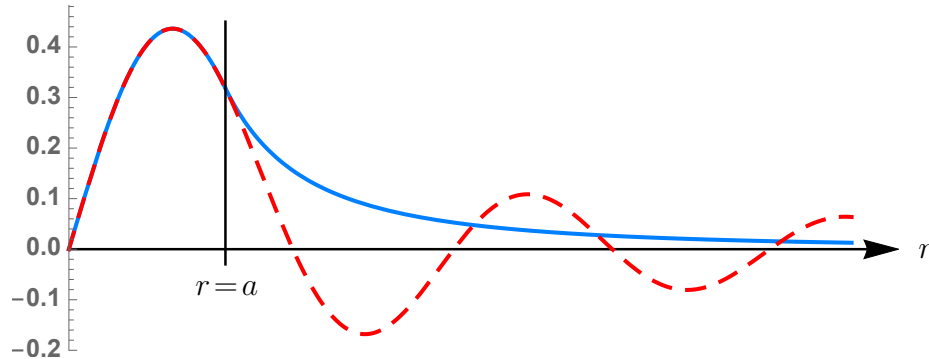


Figure 1: **Blau:** Radialfunktion $R(r)$, mit $C = 1$. **Rot (gestrichelt):** $j_1\left(\pi \frac{r}{a}\right)$.

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

Vgl. Aufgabe Q.33! Q.59 ist fast identisch zur "Bem.:" in meiner Lösung zu Q.33!!!

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

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

(b) Vereinfachung von H :

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

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

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

(c) Mit dem Ansatz $\psi(x, y, z) = \chi(x) e^{ip_0 y/\hbar}$ finden wir

$$\begin{aligned}p_x^2 \psi &= -\hbar^2 \chi''(x) e^{ip_0 y/\hbar}, \\ (p_y - qB_0 x)^2 \psi &= (p_0 - qB_0 x)^2 \psi, \\ p_z^2 \psi &= 0,\end{aligned}$$

Somit folgt aus der stationären SGI

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

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

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

Dies ist die SGI 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

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_B \quad (n = 0, 1, 2, \dots),$$

die sog. **Landau-Niveaus** (siehe "Bem." in meiner Lösung zu Aufgabe Q.33).

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

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

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

Folglich besteht zwischen E , k und κ der Zusammenhang

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

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

$$(i): \quad \beta(e^{ika} \pm e^{-ika}) = \alpha,$$

$$(ii): \quad \beta i k (e^{ika} \mp e^{-ika}) = -\kappa \alpha.$$

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

$$i k (e^{ika} \mp e^{-ika}) = -\kappa (e^{ika} \pm e^{-ika}),$$

$$\frac{e^{ika} \mp e^{-ika}}{e^{ika} \pm e^{-ika}} = \frac{-\kappa}{i k},$$

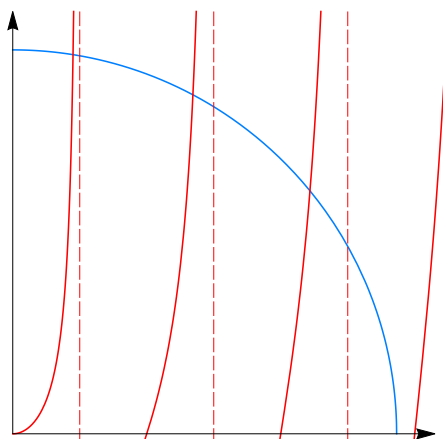
$$\pm i [\tan(ka)]^{\pm 1} = i \frac{\kappa}{k} = i \sqrt{\frac{k_0^2 - k^2}{k^2}} \quad \left(\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = V_0 \right),$$

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

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

$$(ka) \tan(ka) = \sqrt{(k_0 a)^2 - (ka)^2}.$$

Die Lösungen $k_n = \frac{1}{a} \sqrt{(k_0 a)^2 - (k_n a)^2}$, mit $n = 1, 3, 5, \dots$ findet man aus der Skizze: $k_n = k_0 u_n$, mit den Abszissen u_n der Schnittpunkte von G_f (rot) mit G_g (blau).



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

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

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

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

also

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

(b) Der gesuchte Erwartungswert ist

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

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

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

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: $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$ 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

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

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

$$\Phi(r_0, \phi, z) = 0 \quad (\text{alle } \phi, z). \quad (35)$$

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

$$\Phi(r, \phi + 2\pi, z) = \Phi(r, \phi, z) \quad (\text{alle } r, z). \quad (36)$$

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,

$$Z(z) = e^{ikz} \quad (k \in \mathbb{R})$$

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

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

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

$$P(\phi) = e^{\pm im\phi} \quad (m \in \mathbb{N}_0)$$

(eine positive Konstante $+m^2$ ergäbe $P(\phi) = e^{\pm m\phi}$, im Widerspruch zu Gl. (36)). Somit verbleibt für $R(r)$ [nach Multiplikation mit $R(r)$] die Eigenwertgleichung

$$r^2 R''(r) + r R'(r) + \left[(\kappa^2 - k^2) r^2 - m^2 \right] R(r) = 0 \quad \left(E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} \right). \quad (37)$$

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

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

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

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

Schreiben wir entsprechend

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

so folgt (mit $\frac{d}{dr} = \frac{dw}{dr} \frac{d}{dw} = \lambda \frac{d}{dw}$)

$$\begin{aligned} r R'(r) &\equiv r \frac{d}{dr} R(r) = \frac{w}{\lambda} \lambda \frac{d}{dw} J(w) = w J'(w), \\ r^2 R''(r) &\equiv r^2 \frac{d^2}{dr^2} R(r) = \dots = w^2 J''(w). \end{aligned}$$

Damit geht also Gl. (37) für $R(r)$ über in die **Besselsche DGI** für $J(w)$,

$$w^2 J''(w) + w J'(w) + [w^2 - m^2] J(w) = 0.$$

- (c) Damit die Wellenfunktion $\Phi(r, \phi, z) = J(\lambda r) e^{\pm im\phi} e^{ikz}$ bei gegebenem Wert von $m \in \{0, 1, 2, \dots\}$ 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

$$E_{m,n}(k) \equiv \frac{\hbar^2}{2M} (\lambda_{m,n}^2 + k^2) = \frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{w_{m,n}}{r_0} \right)^2 + k^2 \right] \quad \begin{cases} m = 0, 1, 2, \dots, \\ n = 1, 2, 3, \dots, \end{cases}$$

mit den zugehörigen Eigenfunktionen

$$\Phi_{\pm m,n}^{(k)}(\mathbf{r}) = J_m(\lambda_{m,n} r) e^{\pm im\phi} e^{ikz}.$$

Diese sind zugleich Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ und $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$, deren Eigenwerte $\hbar k$ bzw. $\pm m\hbar$ die Quantenzahlen k und m festlegen.

Beachte: P_z und L_z sind Erhaltungsgrößen, da ihre Operatoren mit \hat{H} kommutieren,

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

- 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.

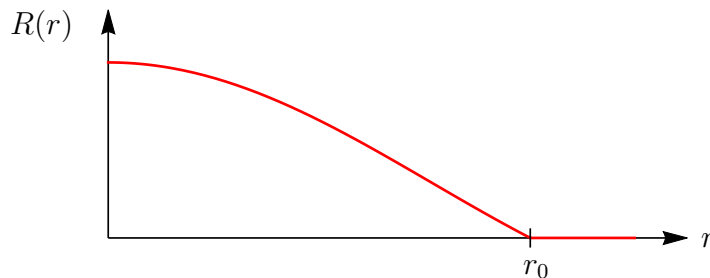


Figure 2: **Rot:** Die Radialfunktion $R(r) = N \cdot J_0(\lambda_{0,1} r) \cdot \Theta(r_0 - r)$ im Grundzustand.

Q. 63 Verschwinden eines antisymmetrischen Zustands (F 2019.Q.1)

(a) Wir betrachten zunächst das **einfache** Deltapotential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} g \delta(x) \quad (g > 0).$$

Der Graph einer Eigenfunktion $\psi(x)$ mit $E < 0$ ist an jeder Stelle x mit $V(x) = 0$ (also für alle $x \neq 0$) von der x -Achse weggekrümmt. Ein antisymmetrisches $\psi(x)$ mit $\psi(x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$ kann also bei $x = 0$ nicht stetig sein und kommt daher als Wellenfunktion nicht in Frage.

Ab jetzt betrachten wir das **doppelte** Deltapotential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} g [\delta(x+a) + \delta(x-a)] \quad (a, g > 0).$$

(b) Für die antisymmetrische Eigenfunktion $\psi(x)$ zum niedrigsten Eigenwert $E < 0$ gilt

$$\frac{\psi(x)}{N} = \left\{ \begin{array}{ll} -e^{\kappa(x+a)} & (x < -a) \\ \frac{1}{C} [-e^{-\kappa(x+a)} + e^{\kappa(x-a)}] & (|x| < a) \\ e^{-\kappa(x-a)} & (x > a) \end{array} \right\} \quad \kappa > 0, \quad C = 1 - e^{-2\kappa a},$$

mit einer geeigneten Normierungskonstante N . (Die Konstante C ist so gewählt, daß ψ bei $x = \pm a$ stetig ist). Dabei gilt

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x) \quad \Rightarrow \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Die Ableitung $\psi'(x)$, mit

$$\frac{\psi'(x)}{N} = \left\{ \begin{array}{ll} -\kappa e^{\kappa(x+a)} & (x < -a) \\ \frac{\kappa}{C} [e^{-\kappa(x+a)} + e^{\kappa(x-a)}] & (|x| < a) \\ -\kappa e^{-\kappa(x-a)} & (x > a) \end{array} \right\},$$

hat die Eigenschaft [man beachte, daß $\psi(-a) = -N$ und $\psi(a) = N$]

$$\frac{\psi'(-a+0) - \psi'(-a-0)}{\psi(-a)} = \frac{\psi'(a+0) - \psi'(a-0)}{\psi(a)} = -\frac{2\kappa}{1 - e^{-2\kappa a}}.$$

Nach Gl. (2) der Angabe wird der Wert von $\kappa > 0$ also festgelegt durch

$$\frac{2\kappa}{1 - e^{-2\kappa a}} = g.$$

Multiplikation mit a ergibt die Bedingung [Gl. (3) der Angabe]

$$\frac{\kappa a}{g a} = f(\kappa a), \quad f(x) = \frac{1 - e^{-2x}}{2}. \quad (38)$$

[Die triviale Lösung $\kappa = 0$ dieser Bedingung ist zu verwerfen, da sie (erstens) zum nicht-niedrigsten Eigenwert $E = 0$ gehören, (zweitens) eine unstetige Wellenfunktion $\psi(x) = \pm N$ liefern und (drittens) die Sprungbedingung an $\psi'(x)$ verletzen würde.]

- (c) Zur graphischen Lösung von Gl. (38) zeichnen wir die Graphen der Funktionen $\ell(\kappa a) = \frac{\kappa a}{ga}$ (eine Gerade) sowie $f(\kappa a)$ in ein Diagramm ein (Fig. 3).

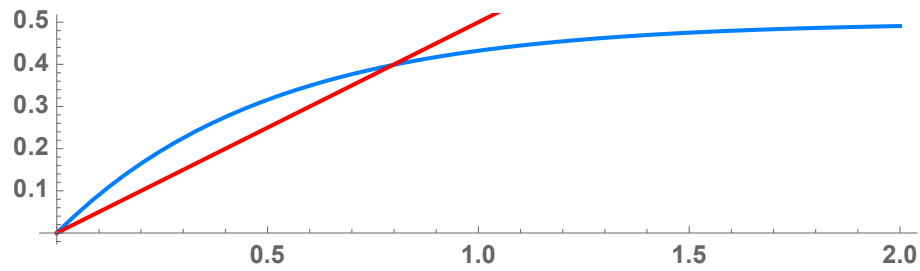


Figure 3: Die Funktionen $\ell(x) = \frac{x}{ga}$ (rote Gerade, mit $ga = 2$) und $f(x) = \frac{1-e^{-2x}}{2}$ (blau).

Die Lösung $\kappa a > 0$ von Gl. (38) ist die Abszisse des Schnittpunkts beider Graphen.

- Damit ein solcher Schnittpunkt existiert, muß die Steigung der Gerade < 1 sein,

$$ga > 1.$$

- (d) Für $ga \rightarrow \infty$ zeigt die Lösung $\kappa a > 0$ von Gl. (3) das Verhalten

$$\kappa a \rightarrow \frac{ga}{2} \quad \Rightarrow \quad E \equiv -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}.$$

Bei abnehmendem $g > 0$ verringert sich der Betrag von $E < 0$ (der Zustand wird also immer schwächer gebunden). Im Grenzfall $g \rightarrow \frac{1}{a} + 0$ geht E gegen null.

Bem. (nicht verlangt): Ein **symmetrischer** Zustand existiert dagegen **immer**.

Um dies zu sehen, wiederholen wir die Teile (b), (c) und (d) für diesen Fall:

- (β) Ein **symmetrischer** Zustand muß folgende abschnittsweise Form haben,

$$\psi(x) = \left\{ \begin{array}{ll} e^{\kappa(x+a)} & (x < -a) \\ \frac{1}{D}[e^{-\kappa(x+a)} + e^{\kappa(x-a)}] & (|x| < a) \\ e^{-\kappa(x-a)} & (x > a) \end{array} \right\} \quad D = 1 + e^{-2\kappa a}$$

(die Konstante D garantiert wieder Stetigkeit bei $x = \pm a$), da in diesem Fall gilt

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x) \quad \Rightarrow \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Damit $\psi(x)$ normierbar ist, muß offenbar $\kappa > 0$ sein.

- (γ) Mit der Ableitung

$$\psi'(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \kappa e^{\kappa(x+a)} & (x < -a) \\ \frac{\kappa}{D}[-e^{-\kappa(x+a)} + e^{\kappa(x-a)}] & (|x| < a) \\ -\kappa e^{-\kappa(x-a)} & (x > a) \end{array} \right\} \quad D = 1 + e^{-2\kappa a}.$$

finden wir [man beachte, daß jetzt $\psi(-a) = \psi(a) = 1$]

$$\frac{\psi'(-a+0) - \psi'(-a-0)}{\psi(-a)} = \frac{\psi'(a+0) - \psi'(a-0)}{\psi(a)} = -\frac{2\kappa}{1 + e^{-2\kappa a}}.$$

Nach Gl. (2) der Angabe wird der Wert von $\kappa > 0$ also festgelegt durch $\frac{2\kappa}{1 + e^{-2\kappa a}} = g$,

$$\frac{\kappa a}{ga} = \frac{1 + e^{-2\kappa a}}{2} \equiv f(\kappa a).$$

- (δ)

Q. 64 Spinpräzession (F 2019.Q.2)

(a) Der Hamiltonoperator ist gegeben durch die Matrix

$$H = \omega S_z = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_z = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

hat also die Eigenwerte $\pm \frac{\hbar\omega}{2}$. Die entsprechenden Eigenzustände sind

$$|\chi_\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |S_z \uparrow\rangle, \quad |\chi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |S_z \downarrow\rangle.$$

Dies sind natürlich zugleich die beiden (korrekt normierten) Eigenzustände von S_z .

(b) Für den gegebenen Zustand $|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ und die Matrix $S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$ gilt

$$S_x |\chi\rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\chi\rangle.$$

$|\chi\rangle$ ist also tatsächlich Eigenzustand von S_x zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$: $|\chi\rangle = |S_x \uparrow\rangle$.
 $|\chi\rangle$ ist außerdem korrekt normiert, denn mit $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ gilt

$$\langle \chi | \chi \rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = (a^* \quad b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a^* a + b^* b = 1.$$

(c) Mit $|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}$ lautet diese Schrödingergleichung

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\psi}_1(t) \\ \dot{\psi}_2(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ -\psi_2(t) \end{pmatrix}.$$

Dies sind zwei entkoppelte Gleichungen für $\psi_1(t)$ und $\psi_2(t)$, mit den Lösungen

$$\psi_1(t) = C_1 e^{-i\omega t/2}, \quad \psi_2(t) = C_2 e^{+i\omega t/2}.$$

Die Werte der beiden Integrationskonstanten C_1 und C_2 werden durch die Anfangsbedingung $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ festgelegt,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}.$$

(d) Schreiben wir $|\Psi(t)\rangle$ als **Linearkombination** der beiden Eigenzustände von S_z ,

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \gamma_\uparrow(t) |S_z \uparrow\rangle + \gamma_\downarrow(t) |S_z \downarrow\rangle \\ &\equiv \gamma_\uparrow(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma_\downarrow(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

so beträgt die W'keit, bei Messung von S_z das Ergebnis $+\frac{\hbar}{2}$ (also "↑") zu erhalten,

$$P_z(t) = |\gamma_\uparrow(t)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} \right|^2 = \frac{1}{2}.$$

(e) Nach Teil (b) hat S_x die Eigenzustände $|S_x \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $|S_x \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Mit

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha_{\uparrow}(t)|S_x \uparrow\rangle + \alpha_{\downarrow}(t)|S_x \downarrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

gilt wegen $e^{\mp i\omega t/2} = \cos \frac{\omega t}{2} \mp i \sin \frac{\omega t}{2}$ also offenbar

$$\alpha_{\uparrow}(t) = \cos \frac{\omega t}{2}, \quad \alpha_{\downarrow}(t) = -i \sin \frac{\omega t}{2}.$$

Die W'keit, bei Messung von S_x das Ergebnis $+\frac{\hbar}{2}$ zu erhalten, ist also

$$P_x(t) = |\alpha_{\uparrow}(t)|^2 = \cos^2 \frac{\omega t}{2}.$$

(f) Nach Definition des Erwartungswerts in der Quantenmechanik gilt jeweils

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | S_x | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}^\dagger \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{+i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+i\omega t/2} \\ e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} [e^{+i\omega t} + e^{-i\omega t}] = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t), \\ \langle S_z \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | S_z | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}^\dagger \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{+i\omega t/2} & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ -e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} [1 + (-1)] = 0. \end{aligned}$$

(g) Interpretation der Ergebnisse von Teil (f): Der mittlere Spinvektor $\langle \mathbf{S} \rangle(t)$ hat den Betrag $\frac{\hbar}{2}$ und rotiert mit Winkelgeschwindigkeit ω in der xy -Ebene.

Q. 65 Unschärferelation (H 2019.Q.1)

(a) Im Fall $A = x$ und $B = p^2$ gilt

$$[A, B] = [x, p^2] = p[x, p] + [x, p]p = 2i\hbar p \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p^2 \geq \hbar |\langle p \rangle|.$$

(b) Der Operator $A_0 = A - \langle A \rangle_\psi$ ist für jede gegebene Wellenfunktion $\psi(x)$ hermitesch, da A hermitesch ist und folglich $\langle A \rangle_\psi$ reell und damit ebenfalls hermitesch ist.

$$\begin{aligned} \langle A_0 \rangle &= \langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle - \langle \langle A \rangle \rangle = 0, \\ \langle A_0^2 \rangle &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = (\Delta A)^2. \end{aligned}$$

(c) Da A_0 und B_0 hermitesch sind und $\gamma \in \mathbb{R}$, so gilt

$$\begin{aligned} \langle \chi | \chi \rangle &= \langle \psi | (A_0 + i\gamma B_0)^\dagger (A_0 + i\gamma B_0) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (A_0 - i\gamma B_0)(A_0 + i\gamma B_0) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | A_0^2 + i\gamma[A_0, B_0] + \gamma^2 B_0^2 | \psi \rangle = \langle A_0^2 \rangle + i\gamma \langle [A, B] \rangle + \gamma^2 \langle B_0^2 \rangle, \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt $[A_0, B_0] = [A, B]$ benutzt haben.²

Bem.: Der Kommutator hermitescher Operatoren A, B ist **anti-hermitesch**,

$$[A, B] = iC,$$

mit einem weiteren hermiteschen Operator C . Daher ist $\langle [A, B] \rangle$ rein imaginär

$$\langle [A, B] \rangle = i\langle C \rangle, \quad \langle C \rangle \in \mathbb{R}.$$

(d) Die Funktion $f(\gamma) = \langle \chi | \chi \rangle$ hat $D_f = \mathbb{R}$ und $W_f \subseteq \mathbb{R}_0^+$. Es gilt also $f(\gamma) \geq 0$. Der minimierende Wert $\gamma = \gamma_0$ ist gegeben durch $f'(\gamma_0) = 0$,

$$i\langle [A, B] \rangle + 2\gamma_0 \langle B_0^2 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \gamma_0 = -\frac{\langle i[A, B] \rangle}{2\langle B_0^2 \rangle} \in \mathbb{R}.$$

Wegen $f(\gamma_0) \geq 0$ gilt also

$$\begin{aligned} \langle A_0^2 \rangle + i\gamma_0 \langle [A, B] \rangle + \gamma_0^2 \langle B_0^2 \rangle &\geq 0, \\ \langle A_0^2 \rangle - \frac{\langle i[A, B] \rangle^2}{2\langle B_0^2 \rangle} + \frac{\langle i[A, B] \rangle^2}{4\langle B_0^2 \rangle} &\geq 0, \\ \langle A_0^2 \rangle &\geq \frac{\langle i[A, B] \rangle^2}{4\langle B_0^2 \rangle}, \\ \langle A_0^2 \rangle \langle B_0^2 \rangle &\geq \frac{\langle i[A, B] \rangle^2}{4}. \end{aligned}$$

Radizieren beider Seiten liefert genau die angegebene Unschärferelation,

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle i[A, B] \rangle|}{2}.$$

²In Gl. (2) der Angabe ist statt $\langle B_0 \rangle^2$ wohl $\langle B_0^2 \rangle$ gemeint, denn $\langle B_0 \rangle = 0$.

Q. 66 Wasserstoffatom in zwei Dimensionen (H 2019.Q.2)

Vorbem.: $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ ist die **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante**.

(a) Es muß für alle $\phi \in [0, 2\pi)$ gelten $\psi(r, \phi + 2\pi) = \psi(r, \phi)$, also

$$\mu \in \mathbb{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}.$$

(b) Nach der angegebenen stationären SGI muß für $\psi_0(r, \phi) = N_0 \exp(-\frac{\nu_0}{a_B} r)$ gelten

$$\begin{aligned} (\hat{H} - E_0)\psi_0(r, \phi) &= N_0 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\alpha\hbar c}{r} - E_0 \right] e^{-\nu_0 r/a_B} \\ &= N_0 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu_0^2}{a_B^2} - \frac{\nu_0}{ra_B} \right) - \frac{\alpha\hbar c}{r} - E_0 \right] e^{-\nu_0 r/a_B} = 0. \end{aligned}$$

Wegen $\frac{1}{a_B} = \frac{m\alpha c}{\hbar}$ impliziert dies

$$\left[-\frac{m\alpha^2 c^2}{2} \nu_0^2 - E_0 + \frac{1}{r} \left(\frac{\alpha\hbar c}{2} \nu_0 - \alpha\hbar c \right) \right] = 0,$$

also (mit der Ruhenergie $mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$ des Elektrons):

$$\nu_0 = 2, \quad E_0 = -2\alpha^2 mc^2 = -54.5 \text{ eV}.$$

• Mit $\kappa = \frac{2\nu_0}{a_B} = \frac{4}{a_B}$ lautet die **Normierungs-Bedingung**

$$1 = \int d^2r |\psi_0|^2 = N_0^2 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\phi e^{-\kappa r} = N_0^2 \frac{2\pi}{\kappa^2} \int_0^\infty du u e^{-u} = N_0^2 \frac{2\pi}{\kappa^2},$$

sodaß $N_0 = \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi}} = \frac{4}{\sqrt{2\pi} a_B}$.

(c) Für $\psi_1(r, \phi) = N_1 r \exp(i\phi - \frac{\nu_1}{a_B} r)$ berechnen wir zuerst die Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\psi_1(r, \phi)}{N_1} &= \frac{1}{r} \left(1 - \frac{\nu_1}{a_B} r \right) \exp \left(i\phi - \frac{\nu_1}{a_B} r \right), \\ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\psi_1(r, \phi)}{N_1} &= -\frac{\nu_1}{a_B} \left(2 - \frac{\nu_1}{a_B} r \right) \exp \left(i\phi - \frac{\nu_1}{a_B} r \right), \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \frac{\psi_1(r, \phi)}{N_1} &= -\frac{1}{r^2} r \exp \left(i\phi - \frac{\nu_1}{a_B} r \right). \end{aligned}$$

Mit der SGI folgt also die Bedingung

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{\nu_1}{a_B} \left(2 - \frac{\nu_1}{a_B} r \right) + \frac{1}{r} \left(1 - \frac{\nu_1}{a_B} r \right) - \frac{1}{r} \right] - r \left(\frac{\alpha\hbar c}{r} + E_1 \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-3\frac{\nu_1}{a_B} + \left(\frac{\nu_1}{a_B} \right)^2 r \right] - \left(\alpha\hbar c + E_1 r \right). \end{aligned}$$

Wegen $\frac{1}{a_B} = \frac{m\alpha c}{\hbar}$ impliziert dies

$$\nu_1 = \frac{2}{3}, \quad E_1 = -\frac{2}{9} \alpha^2 mc^2 = -6.05 \text{ eV}.$$

• Mit $\lambda = \frac{2\nu_1}{a_B} = \frac{4}{3a_B}$ lautet die **Normierungs-Bedingung**

$$1 = \int d^2r |\psi_1|^2 = N_1^2 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\phi r^2 e^{-\lambda r} = N_1^2 \frac{2\pi}{\lambda^4} \int_0^\infty du u^3 e^{-u} = N_1^2 \frac{12\pi}{\lambda^4},$$

sodaß $N_1 = \frac{\lambda^2}{2\sqrt{3\pi}} = \frac{8}{9\sqrt{3\pi} a_B^2}$.

(d) Das Betragsquadrat des Matrixelements $\langle \psi_0 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle$ ist gegeben durch

$$\left| \langle \psi_0 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} \langle \psi_0 | x | \psi_1 \rangle \\ \langle \psi_0 | y | \psi_1 \rangle \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \langle \psi_0 | x | \psi_1 \rangle \right|^2 + \left| \langle \psi_0 | y | \psi_1 \rangle \right|^2.$$

Im Einzelnen findet man

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | x | \psi_1 \rangle &= N_0^* N_1 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\phi \exp\left(-\frac{\nu_0}{a_B} r\right) (r \cos \phi) r e^{i\phi} \exp\left(-\frac{\nu_1}{a_B} r\right) \\ &= N_0^* N_1 \int_0^{2\pi} d\phi \cos \phi e^{i\phi} \int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{\nu_0 + \nu_1}{a_B} r\right) \\ &= N_0^* N_1 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi}_{\pi} \left(\frac{a_B}{\nu_0 + \nu_1}\right)^4 \underbrace{\int_0^\infty du u^3 e^{-u}}_{3!} \\ &= \frac{4}{\sqrt{2\pi} a_B} \cdot \frac{8}{9\sqrt{3\pi} a_B^2} \cdot \pi \cdot \frac{a_B^4}{\left(2 + \frac{2}{3}\right)^4} \cdot 6 \\ &= \frac{27}{64\sqrt{6}} a_B, \\ \langle \psi_0 | y | \psi_1 \rangle &= N_0^* N_1 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\phi \exp\left(-\frac{\nu_0}{a_B} r\right) (r \sin \phi) r e^{i\phi} \exp\left(-\frac{\nu_1}{a_B} r\right) \\ &= i \frac{27}{64\sqrt{6}} a_B. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\left| \langle \psi_0 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle \right|^2 = 2 \left(\frac{27}{64\sqrt{6}} a_B \right)^2 = \frac{3^5}{2^{12}} a_B^2.$$

Q.67 Bewegung im harmonischen Potential (F2020.Q.1)

- (a) Wir wenden auf $\psi_0(x)$ den Oszillator-Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$ an,

$$\hat{H}\psi_0(x) = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2mx_0^4} + \frac{m\omega^2}{2} \right) x^2 + \frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \right] \psi_0(x).$$

Soll also $\psi_0(x)$ ein Eigenzustand sein, $\hat{H}\psi_0(x) = E_0\psi_0(x)$, so muß gelten

$$x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2mx_0^2} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

- (b) Mit der Substitution $u = \frac{x}{x_0}$ (also $dx = x_0 du$) gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 &= |\mathcal{N}_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} (x_0 du) e^{-u^2} \\ &= |\mathcal{N}_0|^2 x_0 \sqrt{\pi} = 1 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{N}_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}}. \end{aligned}$$

Da $\psi_0(x)$ und $\psi_1(x)$ reelle Funktionen sind (wir wählen $\mathcal{N}_0, \mathcal{N}_1 \in \mathbb{R}$), so gilt ferner für die gegebene Linearkombination $\psi(x)$ (wir schreiben $\cos \frac{\alpha}{2} = c$ und $\sin \frac{\alpha}{2} = s$)

$$\begin{aligned} \int dx |\psi(x)|^2 &= \int dx \left[c\psi_0(x) + s e^{-i\phi} \psi_1(x) \right] \left[c\psi_0(x) + s e^{i\phi} \psi_1(x) \right] \\ &= \int dx \left[c^2 \psi_0(x)^2 + cs \psi_0(x) \psi_1(x) (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) + s^2 \psi_1(x)^2 \right] \\ &= \underbrace{c^2 \int dx \psi_0(x)^2}_1 + 2cs \cos \phi \underbrace{\int dx \psi_0(x) \psi_1(x)}_0 + s^2 \underbrace{\int dx \psi_1(x)^2}_1 = 1, \end{aligned}$$

wobei das mittlere Integral verschwindet, da sein Integrand ungerade ist.

- (c) In der Notation von Teil (b) ergibt sich jetzt

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_\psi &= \int dx x |\psi(x)|^2 \\ &= c^2 \underbrace{\int dx x \psi_0(x)^2}_0 + 2cs \cos \phi \int dx x \psi_0(x) \psi_1(x) + s^2 \underbrace{\int dx x \psi_1(x)^2}_0 \\ &= 2cs \cos \phi \mathcal{N}_0 \mathcal{N}_1 \int dx x \frac{x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) \\ &= 2cs \cos \phi \mathcal{N}_0 \mathcal{N}_1 \int (x_0 du) (x_0 u) u e^{-u^2} \\ &= \underbrace{2cs}_{\sin \alpha} \cos \phi \underbrace{\mathcal{N}_0 \mathcal{N}_1 x_0^2}_{\sqrt{\frac{2}{\pi}} x_0} \underbrace{\int du u^2 e^{-u^2}}_{\frac{1}{2} \sqrt{\pi}} = \sin \alpha \cos \phi \frac{x_0}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Je nach Wahl von $\alpha, \phi \in [0, 2\pi]$ kann also $\langle x \rangle_\psi$ maximal den Wert $\frac{x_0}{\sqrt{2}}$ (und minimal den Wert $-\frac{x_0}{\sqrt{2}}$) annehmen.

(d) **Vorbemerkung:** Für Systeme mit zeitunabhängigem Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

gilt allgemein: Ist die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ zur Zeit $t = 0$ gegeben in der Form,

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x),$$

als Linearkombination der Eigenfunktionen³ $\psi_n(x)$ von \hat{H} , so ist ihre Entwicklung für Zeiten $t > 0$ gegeben durch

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i\omega_n t}.$$

Die verschiedenen Frequenzen ω_n sind dabei festgelegt durch die Eigenwerte E_n ,

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}.$$

• Im Fall der Wellenfunktion (3) der Angabe gilt also

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_1 = \frac{i}{\sqrt{2}}, \quad c_n = 0 \quad (n = 2, 3, 4, \dots)$$

(mit $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$). Mit $E_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$ gilt weiter $\omega_0 = \frac{1}{2}\omega$, $\omega_1 = \frac{3}{2}\omega$, sodaß

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) e^{-i\omega t/2} + \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_1(x) e^{-3i\omega t/2} \\ &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) e^{i(\frac{\pi}{2} - \omega t)} \right] e^{-i\omega t/2}. \end{aligned}$$

Wegen $|e^{-i\omega t/2}|^2 = 1$ ergibt sich hiermit der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_{\Psi(x,t)} &= \int dx x |\Psi(x, t)|^2 \\ &= \int dx x \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) e^{i(\frac{\pi}{2} - \omega t)} \right|^2. \end{aligned}$$

Dies ist genau das gleiche Integral wie in Teil (c), mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ statt $\Psi(x, t)$, sofern wir dort $\frac{\alpha}{2} = \frac{\pi}{4}$ und $\phi = \frac{\pi}{2} - \omega t$ setzen,

$$\langle x \rangle_{\Psi(x,t)} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cos\left(\frac{\pi}{2} - \omega t\right) \equiv \frac{x_0}{\sqrt{2}} \sin(\omega t).$$

³Dabei sind die Betragsquadrate $|c_n|^2$ der Koeffizienten gleich den W'keiten, bei einer Energiemessung im Zustand $\Psi(x, 0)$ die entsprechenden Eigenwerte E_n zu beobachten. So gilt also insbesondere

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1.$$

Q.68 Asymmetrischer Kasten (F2020.Q.2)

Zu beliebigem $E < 0$ existiert (bei gegebener Breite a) eine passende Tiefe $-V_0 < 0$ dieses Potentialtopfs, sodaß E seine Grundzustandsenergie ist. In dieser Aufgabe wird zu vorgegebenem $|E| > 0$ die zugehörige Höhe $\Delta E = E - (-V_0) > 0$ von E über dem Potentialboden $-V_0$ bestimmt, vgl. Fig. 5.

(Beachte: Statt $-V_0 < E$ und $E < 0$ werden die positiven Werte ΔE und $|E|$ betrachtet.)

(a) In beiden Bereichen $0 < x < a$ und $x > a$ hat die SGI jeweils die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = \mathcal{E} \psi(x), \quad \begin{cases} \mathcal{E} = \Delta E > 0 & (x < a), \\ \mathcal{E} = -|E| < 0 & (x > a). \end{cases}$$

Damit sind die allgemeinen Lösungen jeweils gegeben durch

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx) + B \cos(kx) & (x < a), \\ C e^{\lambda x} + D e^{-\lambda x} & (x > a), \end{cases}$$

wobei $k > 0$ und $\lambda > 0$ gegeben sind durch

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \Delta E, \quad \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} = |E|.$$

Die Randbedingungen $\psi(0) = 0$ und $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$ verlangen $B = C = 0$,

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx) & (x < a), \\ D e^{-\lambda x} & (x > a). \end{cases} \quad (39)$$

(b) Sowohl $\psi(x)$ als auch $\psi'(x)$ müssen bei $x = a$ stetig sein,

$$\begin{aligned} A \sin(ka) &= D e^{-\lambda a}, \\ A k \cos(ka) &= -D \lambda e^{-\lambda a}. \end{aligned} \quad (40)$$

Hieraus ergibt sich die (in Fig. 4 illustrierte) Bestimmungsgleichung für ΔE ,

$$\tan(ka) = -\frac{ka}{\lambda a}. \quad (41)$$

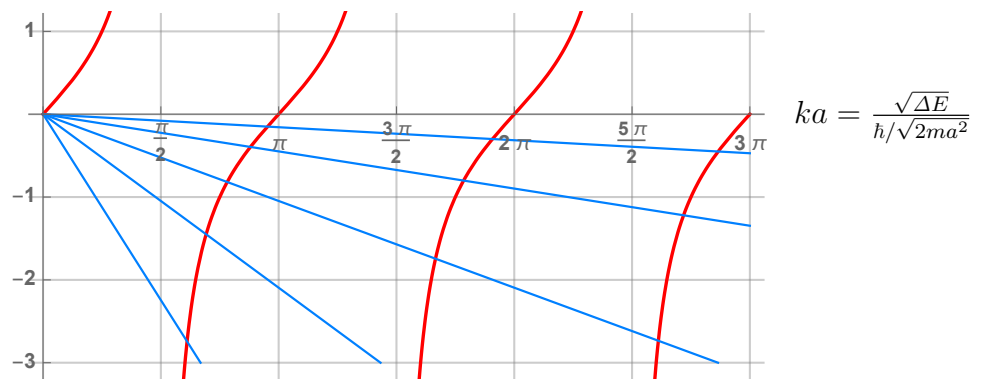


Figure 4: Beide Seiten von Gl. (41) als Funktionen von $ka \sim \sqrt{\Delta E}$ (dimensionslos): **Rot:** Linke Seite. **Blau:** Rechte Seite, für verschiedene Werte von $\lambda a \sim \sqrt{|E|}$.

Mit $ka = \frac{\sqrt{\Delta E}}{h/\sqrt{2ma^2}}$ und $\lambda a = \frac{\sqrt{|E|}}{h/\sqrt{2ma^2}}$ wird daraus die angegebene Gleichung,

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2m \Delta E}}{\hbar} \cdot a\right) = -\frac{\sqrt{\Delta E}}{\sqrt{|E|}}.$$

- (c) **Vorbem.:** Die Angabe ”... für feste Energiedifferenz ΔE ...” ist etwas irreführend: Man soll ja zu vorgegebenem $|E|$ jeweils das zugehörige (*gesuchte*) ΔE bestimmen! Daher sollte es in der Angabe wohl zutreffender (?) heißen:

”Betrachten Sie diese Gleichung für festes $|E|$ als Funktion von (*variablem*) ΔE .”

Je kleiner $|E| \sim (\lambda a)^2$, desto steiler fällt die entsprechende blaue Gerade in Fig. 4. Die Abszisse ka ihres ersten Schnittpunkts mit der roten Tangenskurve ($\frac{\pi}{2} < ka < \pi$) liefert jeweils den zum vorgegebenen Wert $|E|$ gehörenden Wert von $\Delta E \sim (ka)^2$.

1. Mit $|E| \rightarrow 0$ geht die Steigung der blauen Gerade gegen $-\infty$, und ihr erster Schnittpunkt mit der roten Tangenskurve wandert nach links gegen den Grenzwert $ka = \frac{\pi}{2}$. Dies ergibt den minimal möglichen Wert von $\Delta E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$,

$$\Delta E_{\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (|E| \rightarrow 0).$$

Wegen $|E| \rightarrow 0$ muß dies dann zugleich der entsprechende Wert von $V_0 \equiv \Delta E + |E|$ sein. (Dies ist der minimale Wert von V_0 mit einem gebundenen Zustand !)

2. Im Limes $V_0 \rightarrow \infty$ gilt dagegen $E \rightarrow -\infty$, also $|E| \rightarrow \infty$. Dann geht die Steigung der blauen Gerade gegen 0 und ihr erster Schnittpunkt mit der roten Kurve wandert nach rechts gegen $ka = \pi$. Dies ergibt den maximal möglichen Wert (vgl. Teil d),

$$\Delta E_{\max} = 4 \cdot \Delta E_{\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \equiv E_{n=1}^{\infty} \quad (|E| \rightarrow \infty).$$

Nicht verlangt: Hat man auf diese Weise (numerisch) zu gegebenem λa das zugehörige ka bestimmt, so liefert das homogene Gleichungssystem Eq. (40) das Verhältnis $\frac{A}{D}$. Damit können wir die Wellenfunktion skizzieren:

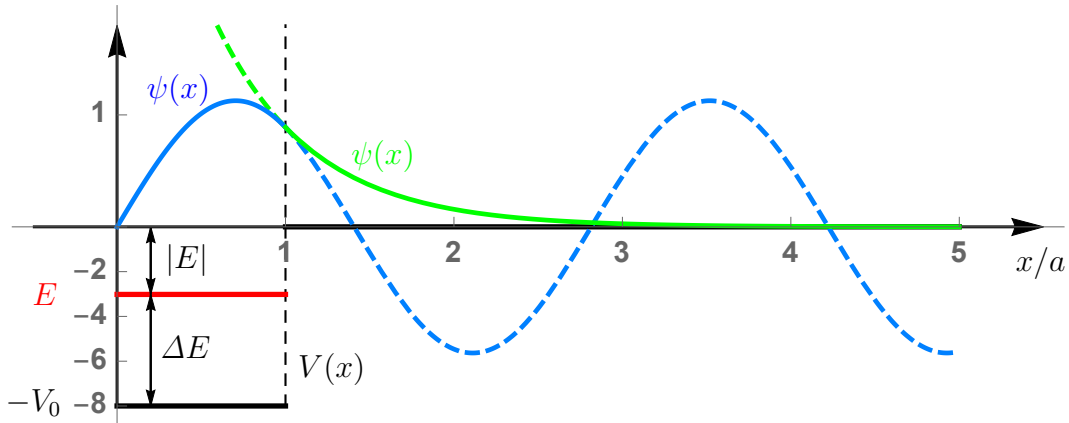


Figure 5: Die Wellenfunktion $\psi(x)$ von Gl. (39) in Einheiten von $a^{-1/2}$ (blau bzw. grün) und das Potential $V(x)$ in Einheiten von $\frac{\hbar^2}{2ma^2}$ (schwarz), beides für den Fall $V_0 = 8 \cdot \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. (Man beachte die zwei verschiedenen Skalen auf der Ordinate.) In diesem Fall gibt es genau einen gebundenen Zustand, mit Eigenwert $E = -3.01761 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ (rot).

- (d) Im Limes $V_0 \rightarrow \infty$ ergibt sich der unendlich tiefe 1D Potentialkasten im Intervall $x \in [0, a]$, mit den bekannten Eigenwerten (Energienullpunkt $E^\infty = 0$ bei $E = -V_0$)

$$\begin{aligned} E_n^\infty &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(n \cdot \frac{\pi}{a} \right)^2 \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \end{aligned}$$