Q.59 Teilchen im konstanten magnetischen Feld (F 2018.1)

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

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

(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 2018.2)

(a) Anwendung von H auf die gegebene Wellenfunktion (2) ergibt

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

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

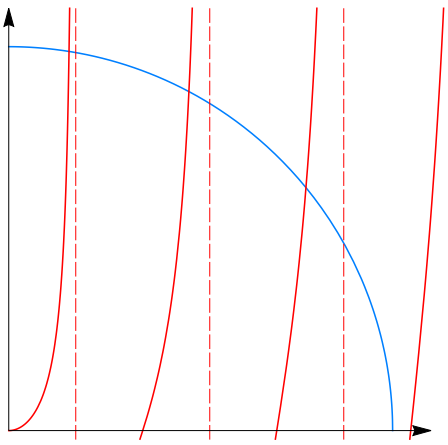
$$\begin{aligned} \mathrm{i}k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \mp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right) &= -\kappa\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right), \\ \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \mp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}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

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: $k_n = k_0x_n$, mit den x-Koordinaten x_n der Schnittpunkte von G_f (rot) mit G_g (blau).



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

Q. 65 Unschärferelation (H 2019.1)

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

$$[A, B] \;=\; [x, p^2] \;=\; p[x, p] + [x, p]p \;=\; 2\mathrm{i}\hbar p \qquad \Rightarrow \qquad \Delta x \cdot \Delta p^2 \;\geq\; \hbar\big|\langle p\rangle\big|.$$

(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.

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

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

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

wobei wir im letzten Schritt $[A_0, B_0] = [A, B]$ benutzt haben.[1]
Bem.: Der Kommutator hermitescher Operatoren A, B ist **anti-hermitesch**,

$$[A, B] \;=\; \mathrm{i}C,$$

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

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

(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 $f'(\gamma_0) = 0$,

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

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

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

Zieht man hier auf beiden Seiten die Wurzel, so erhält man genau die angegebene Unschärfereolation.

[1] In 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 2019.2)

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

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

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

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

Wegen $\frac{1}{a_\mathrm{B}} = \frac{mc\alpha}{\hbar}$ impliziert dies

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

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

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

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

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

sodaß $N_0 = \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi}} = \frac{4}{\sqrt{2\pi}\, a_\mathrm{B}}$.

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

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

Mit der SGl folgt also die Bedingung

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

Wegen $\frac{1}{a_\mathrm{B}} = \frac{mc\alpha}{\hbar}$ impliziert dies

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

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

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

sodaß $N_1 = \frac{\lambda^2}{2\sqrt{3\pi}} = \frac{8}{9\sqrt{3\pi}\, a_\mathrm{B}^2}$.

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

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

Im Einzelnen findet man

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

Damit ergibt sich

$$\Big|\langle\psi_0|\mathbf{r}|\psi_1\rangle\Big|^2 \;=\; 2\left(\frac{27}{64\sqrt{6}}\,a_\mathrm{B}\right)^2 \;=\; \frac{3^5}{2^{12}}\,a_\mathrm{B}^2.$$