Physikalisches Institut
Universität Bonn
Theoretische Physik

Blatt 6
16 Mai 2014
SS 2014

Übungen zur Quantenmechanik und statistischen Physik

Priv.-Doz. Dr. Stefan Förste

http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/forste/exercises/la_tp2/

–Anwesenheitsaufgaben–

A 4.1 Periodisches Potential

Von großer Bedeutung z.B. in der Festkörperphysik sind periodische Potentiale. Sie sind eine gute Nährung für Atomgitter und man kann das Verhalten der Elektronen auf solchen Gittern studieren. Das Potential eines eindimensionalen Gitters soll

$$\hat{V}(x+d) = \hat{V}(x), \tag{1}$$

mit $-\infty < x < \infty$ und dem Gitterabstand $d \in \mathbb{R}$, erfüllen. Wir führen einen Operator $\hat{F}(d)$ ein, welcher wie eine diskrete Translation auf eine Wellenfunktion $\psi(x)$ wirkt:

$$\hat{F}(d)\psi(x) = \psi(x+d). \tag{2}$$

Des Weiteren soll $\hat{F}(d)$ die Norm von $\psi(x)$ invariant lassen.

(a) Zeige, dass $\hat{F}(d)$ unitär ist.

(b) Wie wirkt der Operator $\hat{F}^\dagger(x)\hat{X}\hat{F}(d)$ auf $\psi(x)$?

(c) Zeige, dass $[\hat{F}(d), \hat{V}(\hat{X})] = 0$ und somit $[\hat{F}(d), \hat{H}] = 0$. Was gilt damit für die Eigenzustände von $\hat{H}$?

(d) Bestimme die Eigenwerte von $\hat{F}(d)$ und zeige, dass aus Eigenfunktionen $\phi(x)$ von $\hat{F}(x)$ Funktionen $u(x)$ gebildet werden können, für die gilt

$$u(x-d) = u(x). \tag{3}$$

Man nennt $u(x)$ *Bloch-Wellenfunktionen.*

Sei als konkretes Beispiel das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ V_0, & a < x < d \end{cases}, \tag{4}$$

mit $V(x+d) = V(x)$, $V_0 > 0$ und a, $d \in \mathbb{R}$, gegeben. Wir betrachten in den folgenden Aufgabenteilen nur gebundene Zustände, d.h. $E < V_0$.

(f) Benutze die Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktionen um zu zeigen, dass

$$\cos(Kd) = \cosh(\beta b)\cos(\alpha a) + \left(\frac{2\beta}{\alpha}\right) 2\sinh(\beta b)\sin(\alpha a), \tag{5}$$

mit $\alpha = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ und $b = d - a$ gilt. Was folgt aus (5) für die Energien von gebunden Zuständen?

–Hausaufgaben–Abgabe: 23.05.2014

H 6.1 Beispiel für Symmetrien in der Quantenmechanik *(6 points)*

Es sei der zweidimensionale Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \hat{V}(x,y) \quad \text{mit} \quad \hat{V}(x,y) = \begin{cases} 0, & |x|,|y| < \pi \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \tag{6}$$

gegeben. Die Eigenwerte von $\hat{H}$ sei die Energie E.

(a) Zeige, dass die zweidimensionale Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator aus (6) auf zwei eindimensionale Schrödingergleichungen führt. Benutze dazu den Seperationsansatz $\Psi(x,y) = \psi_1(x)\psi_2(y)$ für die Wellenfunktion. *Hinweis: Teile die Energie E in zwei Teile $E = E_1 + E_2$ auf. E_1 und E_2 sind dann jeweils die Eigenwerte der eindimensionalen Hamiltonoperatoren.* (*1 point*)

(b) Zeige, dass die Eigenfunktionen $\Psi^{mn}(x,y)$ des Hamiltonoperators in (6) sich aus den Funktionen

$$\psi_i^m(z) = \begin{cases} \cos(k_i z/2), & \text{für } m > 0 \ \ k_i = \text{ungerade} \\ \sin(k_i z/2), & \text{für } m < 0 \ \ k_i = \text{gerade} \end{cases}, \tag{7}$$

für $|z| > \pi$ mit $|m|, k_i \in \mathbb{N}$ und $\psi_i^m(z) = 0$, für $|z| \geq \pi$ zusammensetzen, d.h. $\Psi^{mn}(x,y) = \psi_1^m(x)\psi_2^n(y)$. (*1 point*)

(c) Bestimme die Energieeigenwerte zu den Eigenfunktionen $\Psi^{mn}(x,y)$ in Abhängigkeit von k_1 und k_2. Beobachte, dass in manchen Fällen ein Energiewert E durch verschiedene Kombinationen von k_1 und k_2 erreicht werden kann. Man nennt dieses Phänomen "Entartung“ und es ist ein Hinweis auf eine Symmetrie der Theorie. (*1 point*)

(d) Führen wir zwei Matrizen

$$D = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

ein, welche auf auf den Vektorraum der Koordinaten $(x,y) \in \mathbb{R}^2$ wirken. Was haben die Matrizen für einen geometrischen Effekt auf einen Ortsvektor in $\mathbb{R}^2$? Man sagt, dass die Matrizen R, D die *Symmetrietransormationen* eines Quadrats generieren, d.h. alle Symmetrietransformationen des Quadrats lassen sich als Produkt von D und R schreiben. Es lässt sich zu den Matrizen Operatoren $\hat{D}$, $\hat{R}$ assoziieren, welche auf den Raum der Wellenfunktionen wie folgt wirken (*1 point*)

$$D : x,y \to x',y' \quad \Rightarrow \hat{D}\psi(x,y) = \psi(x',y') \tag{9}$$

$$R : x,y \to \tilde{x},\tilde{y} \quad \Rightarrow \hat{R}\psi(x,y) = \psi(\tilde{x},\tilde{y}). \tag{10}$$

(e) Zeige, dass $\left[\hat{H}, \hat{D}\right] = 0$ und $\left[\hat{H}, \hat{R}\right] = 0$ gilt. Was bedeutet das Verschwinden der Kommutatoren für die Eigenräume von $\hat{D}$ und $\hat{R}$? *(1 point)*

(f) Finde die Eigenfunktionen zu $\hat{R}$ und $\hat{D}$ und deren Eigenwerte. *(1 point)*

H 6.2 Resonanzen *(10 points)*

Sei ein Potential

$$\hat{V}(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{für } -L/2 < x < L/2 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{11}$$

gegeben. Das Potential lässt sich in drei Bereiche aufteilen:

$$\begin{aligned} \text{I}: &\quad x < -L/2, \\ \text{II}: &\quad -L/2 < x < L/2, \\ \text{III}: &\quad L/2 < x. \end{aligned}$$

Wir wollen in der folgenden Aufgabe eine von links (also aus dem Bereich I) einfallende Welle betrachten, welches am Potential gestreut wird.

(a) Zeige, dass die Lösungen für die zeitunabhängige Schrödingergleichung durch

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= \alpha_+ \mathrm{e}^{ik_0 x} + \alpha_- \mathrm{e}^{-ik_0 x}, \\ \psi_{\text{II}}(x) &= \beta_+ \mathrm{e}^{ikx} + \beta_- \mathrm{e}^{-ikx}, \\ \psi_{\text{III}}(x) &= \gamma_+ \mathrm{e}^{ik_0 x}, \end{aligned}$$

mit $k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ und $k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$ gegeben sind. Was lässt sich über die Normierbarkeit der dieser Lösungen sagen? *(1 point)*

(b) Welche Beziehungen lassen sich aus den Stetigkeitsbedingungen zwischen den Koeffizienten α_+, α_-, γ_+ der Lösungen in den Gebieten I und III ableiten? *(1,5 points)*

(c) Zeige, dass für den Strom $j := \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi \frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$ in den Gebieten I und III folgendes gilt: *(2 points)*

$$\begin{aligned} I: &\quad \text{einlaufende Welle:} \quad j_{ein} = \frac{\hbar k_0}{m}|\alpha_+|^2, \\ I: &\quad \text{reflektierte Welle:} \quad j_R = -\frac{\hbar k_0}{m}|\alpha_-|^2, \\ III: &\quad \text{transmittierte Welle:} \quad j_T = \frac{\hbar k_0}{m}|\gamma_+|^2. \end{aligned}$$

(d) Zeige, dass für den Transmissionskoeffizienten $T := |j_T/j_{ein}|$ und den Reflexionskoeffizienten $R := |j_R/j_{ein}|$

$$R + T = 1 \tag{12}$$

gilt. *(1 point)*

(e) Welchen Maximalwert kann T annehmen? Zeige, dass dies bei den Energien

$$E_R = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 - V_0, \quad n \in \mathbb{N},\, n > \frac{2mL^2V_0}{\hbar^2\pi^2} \tag{13}$$

geschieht. (*1,5 points*)

Die Streuzustände mit diesen Energien (E_R) werden als *Resonanzen* bezeichnet. Ihr Auftreten kann damit erklärt werden, dass die bei $x = L/2$ und $x = -L/2$ reflektierten Wellen sich destruktiv überlagern ($R = 0$. Somit wird die einlaufende Welle vollständig transmittiert.

(f)* Entwickle nun den Koeffizienten α_+/γ_+ in einer Taylorreihe bis zur ersten Ordnung um $E = E_R$ um zu zeigen, dass

$$\frac{\alpha_+}{\gamma_+}\mathrm{e}^{-ik_0L} = (-1)^n\{1 - i\frac{2}{\Gamma}(E - E_R) + ...\}, \tag{14}$$

wobei $\Gamma =:= \frac{L}{4}\left[\left(\frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k}\right)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\right]_{E=E_R}$ die Breite der Resonanz bezeichnet. (*1,5 points*)

(g)* Folgere schliesslich daraus, dass der Transmissionskoeffizient in der Nähe der Resonanz die Breit-Wigner Form hat: (*1,5 points*)

$$T \approx \frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E - E_R)^2 + \frac{\Gamma}{2}}. \tag{15}$$

H 6.3 Hermitesche Operatoren (*4 points*)

Ein Operator $\hat{A}$ heißt hermitesch, genau dann wenn für das Skalarprodukt zweier Vektoren ϕ, φ

$$(\phi, \hat{A}\varphi) = (\hat{A}\phi, \varphi) \tag{16}$$

gilt.

(a) Zeige, dass die Eigenwerte von hermiteschen Operatoren reell sind. (*1 point*)

(b) Zeige, dass Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschieden Eigenwerten orthogonal sind. (*1,5 points*)

(c) Zeige mithilfe der *Vollständigkeitsrelation* für die Eigenfunktionen

$$\sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x) = \delta(x - x'), \tag{17}$$

dass ein allgemeiner Zustand $\psi(x)$ durch orthonormale Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ aufgespannt werden kann

$$\psi(x) = \sum_n c_n\psi_n(x), \tag{18}$$

wobei $c_n \in \mathbb{C}$. (*1,5 points*)