NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

05. Juni 2010

Andreas Windisch

Dies ist eine NOTFALLKARTE. Sollte ein kranker oder verletzter Term im Hilbertraum angetroffen werden, so sind hier diverse Techniken und Therapien zusammengefasst mit deren Hilfe der Term verarztet werden kann.

Erste Hilfe

1. Ruhe bewahren!
2. Bewustseinskontrolle: Kann ich das Problem erkennen?
3. Verbandsmaterial: Was brauche ich für die Verarztung?
4. Ersthilfe leisten.

*

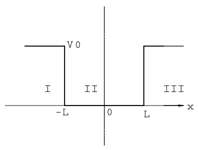
A Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$$

*

B Exemplarisch: Endlicher Potentialtopf: Ansätze

Die folgende Abbildung zeigt eine Skizze des Potentials.



Hier kommutieren $[H,P]=0$, dh. wir können die Lösungen nach symmetrischen und antisymmetrischen Anteilen klassifizieren. Das Potential ist:

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

Nun wird eine Gesamtwellenfunktion angesetzt, indem man alle unterschiedlichen Bereiche betrachtet. Gebundene Lösungen: $(0 < E < V_0)$

$$\begin{aligned} (\frac{d^2}{dx^2} - k_1^2)\psi_I(x) &= 0 \quad (x < -L) \\ (\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2)\psi_{II}(x) &= 0 \quad (-L \leq x \leq L) \\ (\frac{d^2}{dx^2} - k_1^2)\psi_{III}(x) &= 0 \quad (x > L) \end{aligned}$$

mit $k_1^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ und $k_2^2 = 2mE/\hbar^2$. Die antisymmetrischen und symmetrischen Wellenfunktionen sind dann:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x}, & x < -L \\ C\sin(k_2 x), & -L \leq x \leq L \\ De^{-k_1 x}, & x > L \end{cases}$$

bzw.

$$\psi_s(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x}, & x < -L \\ B\cos(k_2 x), & -L \leq x \leq L \\ De^{-k_1 x}, & x > L \end{cases}$$

Die **Kontinuitätsbedingung** der Wellenfunktion und ihrer Ableitung ist nun noch zu lösen (hier nicht durchgeführt). Ansatz für Streulösungen $(E > V_0)$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}, & x < -L \\ Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}, & -L \leq x \leq L \\ Ee^{ik_1 x}, & x > L \end{cases}$$

Ist der Potentialtopf **unendlich tief**, so muss die Wellenfunktion am Rand verschwinden. Die Quantisierungsbedingung eingesetzt in die entsprechende Wellenfunktion ist dann: $(V_0 \to \infty)$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{L}}\cos(\frac{n\pi}{2L}x), & n = 1,3,5,7,\ldots \\ \sqrt{\frac{1}{L}}\sin(\frac{n\pi}{2L}x), & n = 2,4,6,8,\ldots \end{cases}$$

*

C Schrödingerbild

Im Schrödingerbild hängen die **Zustände von der Zeit ab, die Operatoren sind zeitunabhängig**. Die Dynamik wird durch die Schrödingergleichung beschrieben:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle,$$

mit $|\psi(t)\rangle$ dem Zustand des Systemes im **Schrödingerbild**. Der Zustand entwickelt sich mit dem **unitären Zeitentwicklungsoperator**:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle,$$

mit

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}.$$

*

D Heisenbergbild

In diesem Bild ist die **Zeitabhängigkeit der Zustände eingefroren**. Die dynamische Gleichung ist die Heisenberg'sche Bewegungsgleichung.

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H, \hat{H}].$$

Der zeitunabhängige Zustand entspricht dem Anfangszustand im Schrödingerbild:

$$|\psi(t)\rangle_H = U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle,$$

dh.

$$|\psi(t)\rangle_H = e^{it\hat{H}/\hbar}|\psi(t)\rangle.$$

(**Beachte**: $d|\psi\rangle_H/dt = 0$). Für den Erwartungswert eines Operators $\hat{A}$ finden wir:

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(0)|e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{A}e^{-it\hat{H}/\hbar}|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{A}_H(t)|\psi(0)\rangle \\ &= {}_H\langle\psi|\hat{A}_H(t)|\psi\rangle_H \end{aligned}$$

*

E Wechselwirkungsbild (Diracbild)

Dieses Bild eignet sich für Probleme mit explizit zeitabhängigem Hamiltonian. Hier entwickeln sich **der Zustandsvektor und der Operator** in der Zeit. Die Dynamik der **Zustände** genügt der folgenden Gleichung:

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t)|\psi(t)\rangle_I,$$

wobei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ mit $\hat{H}_0$ zeitunabhängig und $\hat{V}$ (zeitabhängiges) Potential ist. $\hat{V}_I$ ist dann gegeben durch

$$\hat{V}_I(t) = e^{it\hat{H}_0/\hbar}\hat{V}e^{-it\hat{H}_0/\hbar}.$$

Die Bewegungsgleichung der Operatoren wird durch $\hat{H}_0$ bestimmt:

$$\frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_I(t), \hat{H}_0].$$

*

- BITTE WENDEN! -

NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

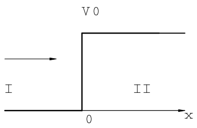
05. Juni 2010

Andreas Windisch

Dies ist eine NOTFALLKARTE. Sollte ein kranker oder verletzter Term im Hilbertraum angetroffen werden, so sind hier diverse Techniken und Therapien zusammengefasst mit deren Hilfe der Term verarztet werden kann.

F Exemplarisch: Potentialstufe: Ansätze

Die folgende Abbildung zeigt den Potentialverlauf, Inzidenz erfolgt von links.



Der Potentialsprung erfolgt bei $x = 0$:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$$

$E > V_0$:
Wir haben zwei Fälle zu unterscheiden. Sei zunächst $E > V_0$, dh. der Einfall erfolgt über der Potentialschwelle. Für $x < 0$ sind die Teilchen frei, bei $x = 0$ erfahren sie ein repulsives Potential welches konstant anhält. Wir setzen in den beiden Bereichen an:

$$\begin{aligned} (\frac{d^2}{dx^2} + k_1^2)\psi_I(x) &= 0 \\ (\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2)\psi_{II}(x) &= 0, \end{aligned}$$

mit $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ und $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. In diese Gleichungen geht man mit einem Ebene-Wellen-Ansatz:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad (x < 0) \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \quad (x > 0). \end{aligned}$$

Das Vorzeichen im Exponenten gibt Aufschluss über die Propagationsrichtung der Welle (pos/neg x). Bei $x = 0$ kann nun Transmission bzw. Reflexion erfolgen. Mit der Annahme der Inzidenz ausschließlich von links entfällt der Term der mit der Konstante D kommt, ferner betrachten wir nun die **vollständigen Wellenfunktionen** für Einfall (Konstante A), Reflexion (Konstante B) sowie Transmission (Konstante C).

$$\psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)}, & (x < 0) \\ Ce^{i(k_2x - \omega t)}. & (x \geq 0) \end{cases}$$

Wir interessieren uns für den **Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten**. Diese sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} R &= \left|\frac{\text{reflektierte Stromdichte}}{\text{einfallende Stromdichte}}\right| = \left|\frac{J_{ref}}{J_{ein}}\right|, \\ T &= \left|\frac{J_{trans}}{J_{ein}}\right|. \end{aligned}$$

Die entsprechenden Stromdichten erhalten wir aus dem Strom-Term aus der Kontinuitätsgleichung:

$$J_{ein} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi_{ein}(x)\frac{d\psi^*_{ein}(x)}{dx} - \psi^*_{ein}(x)\frac{d\psi_{ein}(x)}{dx}),$$

analog erhalten wir die Stromdichten für die transmittierte und reflektierte Welle. Werfen wir nun einen kurzen Blick auf den zweiten Fall.
$E < V_0$:
Hier ändert sich die Wellenfunktion im Bereich I nicht, allerdings bekommen wir im Bereich II:

$$(\frac{d^2}{dx^2} - {k'_2}^2)\psi_{II}(x) = 0 \quad (x \geq 0),$$

mit ${k'_2}^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Die Lösung für diese Gleichung ist:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k'_2x} + De^{k'_2x} \quad (x \geq 0).$$

Der Term mit der Konstante D divergiert für $x \to \infty$, D ist also 0. Die vollständige Wellenfunktion ist daher:

$$\psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)}, & x < 0 \\ Ce^{-k'_2x}e^{-i\omega t}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Nun wollen wir, wie vorhin, die reflektierten und transmittierten Anteile erfassen. Nachdem die transmittierte Wellenfunktion $\psi_{trans}(x) = Ce^{-k'_2x}$ rein reell ist, folgt aus der Gleichung für die Stromdichte, dass dieselbe Null sein muss. Der Reflexionskoeffizient R muss daher 1 sein. Diese Ergebnisse werden in der Tat erhalten, wenn man die Koeffizienten explizit berechnet.

*

G Kontinuitätsgleichung

Kurze Motivation zur Kontinuitätsgleichung. Man findet, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $\langle\psi|\psi\rangle$ sich nicht mit der Zeit verändert, dh. ihre Ableitung nach t verschwindet. Anders ausgedrückt, ist $|\psi(t)\rangle$ einmal normiert, so bleibt es normiert. Wir haben eine Erhaltung der Wahrscheinlichkeit. Mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung kann man folgendes finden:

$$\frac{i\hbar}{2m}(\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi) = j(\vec{r},t), \quad \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte,}$$

sowie

$$\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t), \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

und

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0, \quad \text{Kontinuitätsgleichung.}$$

Mit diesen Definitionen kann man nun etwa den reflektierten Strom für ein Streuproblem an einer Potentialschwelle berechnen.

*

H Linearer Operator

Ist die Linearität eines Operators zu prüfen muss der Operator auf folgende Eigenschaft untersucht werden: Wenn

$$\hat{A}(a\psi + b\phi) = a\hat{A}\psi + b\hat{A}\phi, \quad a, b \in \mathbb{C},$$

gilt, so ist der Operator linear.

*

I Hermite'scher Operator

Ist zu prüfen ob ein Operator hermite'sch ist, so betrachtet man:

$$\int f^*(x)[\hat{A}g(x)]d^3x = \int [\hat{A}^\dagger f(x)]^* g(x)d^3x,$$

mit f, g quadratintegrablen, skalaren Funktionen. Gilt nun für den Operator $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, so ist der Operator **hermite'sch** und es gilt:

$$\int f^*(x)[\hat{A}g(x)]d^3x = \int [\hat{A}f(x)]^* g(x)d^3x.$$

Wir müssen also prüfen, ob diese letzte Relation für einen gegebenen Operator hält oder nicht.

*

- BITTE WENDEN! -