

NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

24. Juni 2010

Andreas Windisch



Dies ist eine NOTFALLKARTE. Sie dient als Schnellreferenz für den Kurzurlaub im Hilbertraum. Die wichtigsten Sehenswürdigkeiten, Monumente und Wahrzeichen sind hier zusammengefasst. Das Blatt soll den verirrtten Kurzzeittourist wieder auf den rechten Pfad führen, nicht ohne sie/ihn auf ihrem/seinem Weg die sie/ihn umgebende Quantennatur zu erläutern. Diese Karte ist NICHT zur Klausur zugelassen!

Verhalten bei Orientierungsverlust

1. Ruhe bewahren!
2. Orientierung: Wo ist die nächste U-Bahnstation?
3. Transportmittel: Welche Linie bringt mich ans Ziel?
4. Reise antreten. (Mind the gap!)

*

A Rechnen mit Kommutatoren

$$\begin{aligned}[A, A] &= 0 \\ [A, B] &= -[B, A] \\ [A, c] &= 0 \\ [A + B, C] &= [A, C] + [B, C] \\ [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C]\end{aligned}$$

mit A, B, C Operatoren und $c \in \mathbb{R}(\mathbb{C})$.

*

B Nützliche Gauss-Integrale

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} ae^{-\frac{(x+b)^2}{c^2}} dx &= ac\sqrt{\pi} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} ae^{-bx^2+cx+f} dx &= a\sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{\frac{c^2}{4b}+f} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-ax^2} dx &= 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}\end{aligned}$$

*

C Normierung der Wellenfunktion

Ist eine Wellenfunktion $\tilde{\psi}$ nicht normiert, so findet man die Normierung wie folgt (Beispiel im Ortsraum):

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(x)\tilde{\psi}(x)dx \stackrel{!}{=} 1.$$

Aus dieser Gleichung erhält man C . Es folgt für die Normierung der Wellenfunktion:

$$\psi(x) = \frac{1}{C}\tilde{\psi}(x)$$

*

D Erwartungswerte

Grundsätzlich können Erwartungswerte in jeder Basis berechnet werden. Besitzt man Kenntnis einer Wellenfunktion $\psi(x)$ im Ort so kann die Wellenfunktion im Impulsraum mittels der Fouriertransformierten von $\psi(x)$ aufgefunden werden:

$$\tilde{\psi}(p) = \mathcal{F}\mathcal{T}(\psi(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)e^{-ipx/\hbar} dx.$$

Analog ist die Rücktransformation gegeben durch:

$$\psi(x) = \mathcal{F}\mathcal{T}^{-1}(\tilde{\psi}(p)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)e^{ipx/\hbar} dp.$$

Die Erwartungswerte für $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ sind dann etwa:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)x\psi(x)dx, \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)x^2\psi(x)dx, \\ \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p)p\tilde{\psi}(p)dp, \\ \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p)p^2\tilde{\psi}(p)dp.\end{aligned}$$

Die Varianz eines Operators ist dann ebenfalls leicht anzugeben:

$$\begin{aligned}\langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle &= \langle Q^2 - 2Q\langle Q \rangle + \langle Q \rangle^2 \rangle \\ &= \langle Q^2 \rangle - 2\langle Q \rangle^2 + \langle Q \rangle^2 \\ &= \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2.\end{aligned}$$

*

E Zeitentwicklung eines Zustandes

Die Dynamik des Zustandes, also die Entwicklung in der Zeit, wird durch den Hamiltonoperator generiert. Um einen beliebigen Zustand zeitlich entwickeln zu können brauchen wir:

1. den Zustand in einer beliebigen Basis
2. den Hamiltonoperator

Falls nicht bekannt müssen wir zunächst die Eigenzustände des Hamiltonoperators auffinden (Eigenwertproblem lösen). Da es sich bei dem Hamiltonoperator um einen hermiteschen Operator handelt, bildet das Eigensystem nach Normierung der Eigenvektoren eine Orthonormalbasis. Nun muss der gegebene Zustand in der Hamilton-Eigenbasis ausgedrückt werden. Ist dies geschehen, so folgt die Zeitentwicklung unmittelbar mit dem zum jeweiligen Eigenzustand gehörenden Eigenwert.

Bsp.:

Wir haben einen Hamiltonoperator H , dessen Eigenzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ sind. Der Zeitentwicklungsoperator U ist dann:

$$U = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Ht\right\}.$$

Nehmen wir weiters an wir hätten einen Zustand $|\alpha\rangle$ in Termen der Hamilton-Eigenbasis ausgedrückt:

$$|\alpha\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle.$$

Die Zeitentwicklung von $|\alpha\rangle$ ist dann:

$$|\alpha(t)\rangle = ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}|+\rangle + be^{-\frac{i}{\hbar}Et}|-\rangle.$$

*

NOTFALLBLATT QUANTENMECHANIK

Tutorium aus Quantenmechanik

24. Juni 2010

Andreas Windisch



Dies ist eine NOTFALLKARTE. Sie dient als Schnellreferenz für den Kurzurlaub im Hilbertraum. Die wichtigsten Sehenswürdigkeiten, Monumente und Wahrzeichen sind hier zusammengefasst. Das Blatt soll den verirrtten Kurzzeittourist wieder auf den rechten Pfad führen, nicht ohne sie/ihn auf ihrem/seinem Weg die sie/ihn umgebende Quantennatur zu erläutern. Diese Karte ist NICHT zur Klausur zugelassen!

F Allgemein: Potentialprobleme

Sieht man sich mit einem wie auch immer gearteten Potentialproblem konfrontiert, so kann man nach folgendem Muster vorgehen.

1. **Potentialverlauf aufzeichnen.** Zunächst sollte man stets den Potentialverlauf aufzeichnen, um das Problem auf diese Weise zu Visualisieren
2. **Bereiche festlegen.** Welche Bereiche unterschiedlichen Verhaltens treten auf? Etwa für eine Potentialstufe gäbe es zwei Bereiche, den vor und jenen nach der Stufe
3. **Bindungszustand und/oder Streulösung.** Bin ich an Bindungszuständen oder an Streulösungen interessiert?
4. **Ansätze finden.** In jedem Bereich der in Punkt 2 gefunden wurde muss nun eine Lösung der Schrödingergleichung angesetzt werden. Zwei Bereiche hätten also zwei Schrödingergleichungen zur Folge
5. **Randbedingungen verarbeiten.** Durch Abarbeiten der Randbedingungen erhält man Informationen über die Konstanten in den allgemeinen Ansätzen. (z.B. eliminieren unphysikalischer Lösungen, also etwa solchen die im ∞ beliebig anwachsen, oder für Streulösungen durch Entscheidung für Inzidenz von links)
6. **Bereiche matchen.** Nun müssen die Lösungen aus den unterschiedlichen Bereichen aneinandergesetzt werden. Sofern es sich **nicht** um ein δ -Potential handelt gilt hierbei:

$$\begin{aligned}\psi_i(x) &\stackrel{!}{=} \psi_j(x), \\ \psi_i'(x) &\stackrel{!}{=} \psi_j'(x), \quad i, j \dots \text{benachbarte Bereiche.}\end{aligned}$$

Handelt es sich jedoch um ein δ -Potential, so lauten die Bedingungen:

$$\begin{aligned}\psi_i(x) &\stackrel{!}{=} \psi_j(x), \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi''(x) dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi(x) dx \right) &= 0,\end{aligned}$$

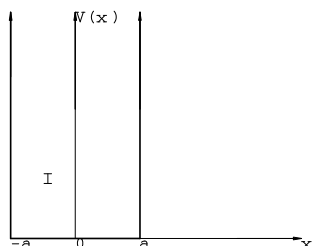
für ein $\delta(x)$, also um Null lokalisiert.

*

G Potentialansätze

Im Folgenden zwei Beispiele für Ansätze für Potentiale. Betrachten wir zunächst den unendlich tiefen Potentialtopf. Dies ist das einfachste Potential welchem wir begegnen.

Beispiel 1: Unendlich tiefer Potentialtopf



Hier ist das Potential gegeben durch:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < -a, \\ 0, & -a \leq x \leq a, \\ +\infty, & x > a. \end{cases}$$

Da das Potential symmetrisch ist, dh. es gilt $V(x) = V(-x)$, zerfällt die Lösung in solche von antisymmetrischer und solche von symmetrischer Natur. Nachdem kein Eindringen in die unendlich hohen Wände

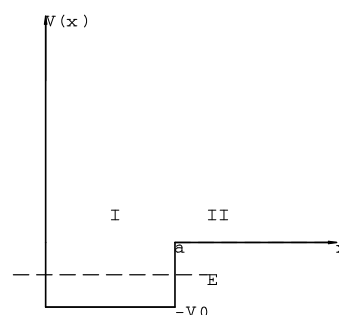
des Potentialtopfes erlaubt ist, verbleibt nur ein Bereich in dem wir eine Schrödingergleichung ohne Potential zu lösen haben. Die Lösungen sind dann:

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

wobei $L = 2a$ ist. Betrachten wir nun noch ein weiteres Potential.

Beispiel 2: Zusammengesetztes Potential

Das hier zu behandelnde Potential ist von folgender Gestalt:



$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ -V_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x \geq a, \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$. Wir interessieren uns für gebundene Lösungen, dh. für den Fall $-V_0 < E < 0$. Wir müssen zwei Schrödingergleichungen lösen, jeweils eine im Bereich I und II. Diese sind:

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_1^2\right)\psi_1(x) &= 0, \quad (0 < x < a), \\ \left(\frac{d^2}{dx^2} - k_2^2\right)\psi_2(x) &= 0, \quad (x > a).\end{aligned}$$

Hierbei ist $k_1^2 = 2m(V_0 + E)/\hbar^2$ und $k_2^2 = -2mE/\hbar^2$. Die Lösungen lauten:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A \sin(k_1 x), & 0 < x < a, \\ C e^{-k_2 x}, & x > a. \end{cases}$$

*

H Drehimpuls in der Quantenmechanik

Nun ein kurzer Blick auf den Drehimpuls in der Quantenmechanik. Wir betrachten einen Operator \vec{J} mit Komponenten \hat{J}_x , \hat{J}_y und \hat{J}_z , die den folgenden Kommutatorbeziehungen genügen:

$$\begin{aligned}[\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar \hat{J}_z, \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hbar \hat{J}_x, \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hbar \hat{J}_y.\end{aligned}$$

Eine gleichzeitige Diagonalisierung kann also nicht vorgenommen werden. Wir betrachten ferner:

$$\vec{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2,$$

wobei nun gilt:

$$[\vec{J}^2, \hat{J}_k] = 0.$$

*