

Experimentalphysik IV (PEP4)

Dozent. Prof. S. Jochim

Übung 2

Abgabe am Montag, den 28.4.2014 vor der Vorlesung

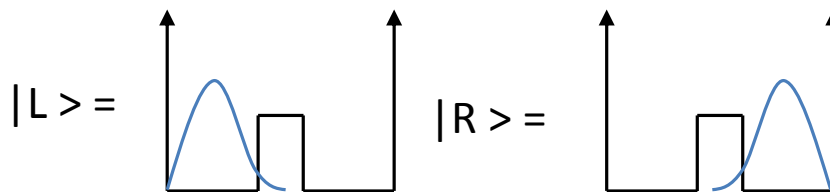
Aufgabe 1: Bewegung im Zwei-Niveau-System (4P)

(Fortsetzung der Aufgabe 3 des 1. Übungsblattes).

Wir haben gesehen, dass für das Doppelmuldenpotential folgende Eigenzustände existieren:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle + |L\rangle) \quad \text{und} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle)$$

Wobei:



- Wie entwickeln sich die Eigenzustände in der Zeit?
- Nun sei das Teilchen zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\Psi(0)\rangle = |R\rangle$ präpariert. Welche Form hat der Zustand $|\Psi(t)\rangle$ in der Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ als Funktion der Zeit?
Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen nach der Zeit t im Zustand $|R\rangle$ zu finden?
- Die Bewegung in diesem Zweiniveausystem folgt aus der Kopplung der Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$, die durch die Nichtdiagonalelemente J in der Hamiltonmatrix (siehe Aufgabe 3, 1. Übung) beschrieben wird. Wie muss das Doppelmuldenpotential aussehen, damit die Kopplung verschwindet ($J \rightarrow 0$)? Zeigen Sie, dass dann $|L\rangle$ und $|R\rangle$ entartete Eigenzustände sind und dass jede beliebige Linearkombination dieser Zustände wieder ein Eigenzustand ist.

Lösung

a)

In Aufgabe 3, 1. Übung waren die Eigenwerte $E_{|+\rangle, |-\rangle} = E_0 \pm J$ zu den Eigenzuständen $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle)$ und $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle)$

Zeitentwicklung für die Eigenzustände:

$$\Psi_{|+\rangle}(t) = c_{|+\rangle}(t)|+\rangle \quad \text{und} \quad \Psi_{|-\rangle}(t) = c_{|-\rangle}(t)|-\rangle$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$, also

$$i\hbar \dot{c}_{|+\rangle}(t) = (E_0 + J)c_{|+\rangle}(t) \quad \rightarrow \quad c_{|+\rangle}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+J)t}$$

$$i\hbar \dot{c}_{|-\rangle}(t) = (E_0 - J)c_{|-\rangle}(t) \quad \rightarrow \quad c_{|-\rangle}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-J)t}$$

D.h.

$$\Psi_{|+\rangle}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+J)t} |+\rangle \quad \text{und} \quad \Psi_{|-\rangle}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-J)t} |-\rangle$$

b)

$$\begin{aligned} \Psi(t=0) &= |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ \Psi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+J)t} |+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-J)t} |-\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} |+\rangle + e^{+\frac{i}{\hbar}Jt} |-\rangle \right) \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Zustand $|R\rangle$ zu finden:

$$\begin{aligned} P_{|R\rangle}(t) &= |\langle R | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + | + \langle - |) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} |+\rangle + e^{+\frac{i}{\hbar}Jt} |-\rangle \right) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{4} \left| e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} + e^{+\frac{i}{\hbar}Jt} \right|^2 = \frac{1}{4} \left| 2 \cos\left(\frac{Jt}{\hbar}\right) \right|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{2Jt}{\hbar}\right) \right) \end{aligned}$$

c)

Die Kopplung wird vom Tunneln durch die Barriere verursacht. Wenn die Höhe oder Breite der Barriere gegen ∞ geht, verschwindet die Kopplung.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & J \\ J & E_0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}$$

$$|\Psi\rangle = a|L\rangle + b|R\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Dann ist $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ Eigenvektor mit dem Eigenwert E_0

$$|L\rangle : \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|R\rangle : \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Damit sind $|L\rangle$ und $|R\rangle$ entartet.

Aufgabe 2: Der Wasserstoffgrundzustand (4P)

Man kann die Größenordnung der Energie des Wasserstoffgrundzustands abschätzen.

- a) Addieren Sie dazu die Coulomb-Energie E_C eines Elektrons, das sich im Abstand r vom Kern aufhält und seine kinetische Energie E_k . Nehmen Sie an, dass die Größenordnung der Ortsunschärfe $\Delta r = r$ ist und daher die Impulsunschärfe von der Größenordnung $p \approx \hbar/\Delta r$. Bestimmen Sie dann den Wert von r_0 bei dem die Gesamtenergie minimal ist.
- b) Vergleichen Sie r_0 und die resultierende Bindungsenergie mit dem Bohr'schen Radius und der Energie des Grundzustands des Wasserstoffatoms.

Lösung:

a)

potentielle Energie: $E_C = -\frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (Z = 1)$

kinetische Energie: $\Delta p \geq \hbar/\Delta r$ und $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$, daher $E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m r^2}$

Addition: $E(r) = \frac{\hbar^2}{2m r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{m r^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = 0$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m e^2} = 0.53 \text{ \AA}$$

Bindungsenergie: $E_{C,r_0} = \frac{\hbar^2}{2m r_0^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0} = -13.6 \text{ eV}$

b)

mit 'Bohr' ist $m v_n r_n = n \hbar$ die kinetische Energie

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(mv_n)^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2}{2m r_n^2}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m r_n^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \rightarrow r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m e^2} \text{ und } n=1: r_1 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m e^2} = 0.53 \text{ \AA}$$

$$v_n = \frac{n \hbar}{m r_n}$$

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \text{ und } n=1: E_1 = \frac{\hbar^2}{2m r_1^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_1} = -13.6 \text{ eV}$$

Ausführliche Lösung: Wir wollen die Energie

für den tiefsten gebundenen Zustand abschätzen. Da der Zentrifugalterm im Hamiltonoperator (4.52) für $l > 0$ einen repulsiven Beitrag zur Energie liefert, ist es klar, dass wir den energetisch tiefsten Zustand für $l = 0$ erwarten. In diesem Fall besteht der Hamiltonoperator nur aus einem Beitrag der radialen kinetischen Energie, der positiv sein wird, und dem attraktiven Energiebeitrag des Coulomb Potentials.

Je näher das Elektron am Atomkern ist, um so attraktiver ist der Beitrag des Coulomb Potentials. Im Abstand r_0 beträgt ja der Wert dieses Coulomb Potentials

$$V_0 = -\frac{e^2}{r_0}.$$

Schränkt man aber den Aufenthaltsort des Elektrons auf einen Bereich $r \leq r_0$ ein, um einen möglichst attraktiven Erwartungswert für Coulomb Potential zu erzielen, so muss man die Heisenbergsche Unschärferelation für die Orts - Impulsunschärfe beachten. Eine Einschränkung auf das Intervall $-r_0 \leq r \leq r_0$, also $\Delta^2(r) = 4r_0^2$ hat wegen der Unschärferelation

$$\Delta^2(p)\Delta^2(r) \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

zur Folge, dass

$$\Delta^2(p) = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{r_0^2},$$

sein muss. Dabei haben wir benutzt, dass der Erwartungswert für den Impuls $\langle p \rangle = 0$ sein wird. Je kleiner r_0 um so größer wird also der Erwartungswert des Impulsquadrates, $\langle p^2 \rangle$, sein und entsprechend positiver die kinetische Energie

$$T_0 = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}.$$

Zur Abschätzung der minimalen Energie fassen wir die Summe aus dieser kinetischen Energie und der potenziellen Energie zusammen

$$E(r_0) = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} - \frac{e^2}{r_0}, \quad (4.53)$$

und bestimmen den Wert von r_0 an dem diese Funktion minimal ist

$$\frac{dE}{dr_0} = -\frac{\hbar^2}{\mu r_0^3} + \frac{e^2}{r_0^2} = 0$$

was zu einem Wert für

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (4.54)$$

führt. Der numerisch Wert von 0.53 Angstrom ergibt sich, wenn man die reduzierte Masse μ für das Elektron, also für das gewöhnliche Wasserstoffatom einsetzt. Diesen Ausdruck für r_0 bezeichnet man auch als den **Bohr'schen Radius** für das Wasserstoffatom.

Berechnet man die Energie für diesen Wert von r_0 nach (4.53), so ergibt sich

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} - \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \\ &= -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \\ &= -13.5 \text{ eV} \end{aligned} \tag{4.55}$$

Der numerische Wert für die Energie von -13.5 eV ergibt sich wieder für den Fall des normalen Wasserstoffatoms. Bemerkenswert am Ausdruck in der ersten Zeile ist, dass der Wert für die potenzielle Energie mit dem Wert der kinetischen Energie verknüpft ist durch

$$T_0 = -\frac{1}{2}V_0.$$

Dies entspricht der Vorhersage des Virialsatzes für ein Potenzial der Form $1/r$ in der klassischen Mechanik. (siehe Abschnitt 3.4 aus der Vorlesung Physik I).

Den Ausdruck (4.55) kann man einfach umschreiben in

$$E_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \mu c^2, \tag{4.56}$$

wobei der Quotient

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{\tilde{e}^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \tag{4.57}$$

die sogenannte **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante**, ein dimensionslose Zahl bestehend aus Naturkonstanten, bezeichnet.

Betrachtet man jetzt ein exotisches Atom, wie z.B. ein myonisches Atom, mit einem schweren Lepton, also einem größerem Wert für die reduzierte Masse μ , so wird aus diesen Überlegungen deutlich, dass die kinetische Energie bei gleichem Wert für p^2 kleiner sein wird als im Fall des Elektrons. Das Minimum der Funktion $E(r_0)$ wird also bei einem kleineren Radius auftreten (siehe (4.54)) was gleichzeitig zu mehr Bindungsenergie, also einem negativeren Wert für $E(r_0)$ führt (siehe (4.56)).

Aufgabe 3: Kugelflächenfunktionen (4P)

- a) Stellen Sie die Kugelflächenfunktionen für $\ell = 2$, ($Y_{lm} = 2, m = 0, 1, 2$) grafisch dar (z.B. durch Auftragen von $|Y_{lm}(\vartheta)|^2$ in Polarkoordinaten mit einem Plotprogramm).
- b) Zeigen Sie, dass die Addition der Wahrscheinlichkeitsdichten für die erlaubten Werte der Quantenzahl m ($\ell = 1$) zu einer kugelsymmetrischen Dichteverteilung führt.

Lösung:

Die ersten Kugelflächenfunktionen				
Y_{lm}	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m = -3$				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{-3i\varphi}$
$m = -2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{-2i\varphi}$
$m = -1$		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{-i\varphi}$
$m = 0$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$
$m = 1$		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{i\varphi}$
$m = 2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{2i\varphi}$
$m = 3$				$-\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{3i\varphi}$

b)

Kugelfunktionen für $\ell = 1$:

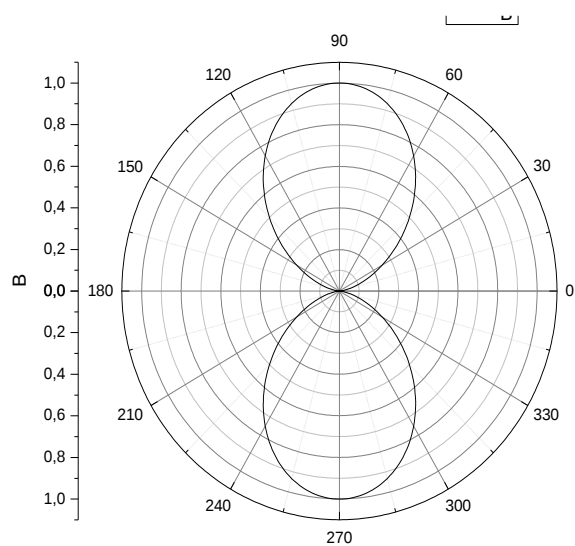
$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

$$Y_{1,\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

$$\sum_{\substack{\ell=1 \\ m}} |Y_{\ell,m}|^2 = \frac{3}{4\pi} (\sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta) = \frac{3}{4\pi}$$

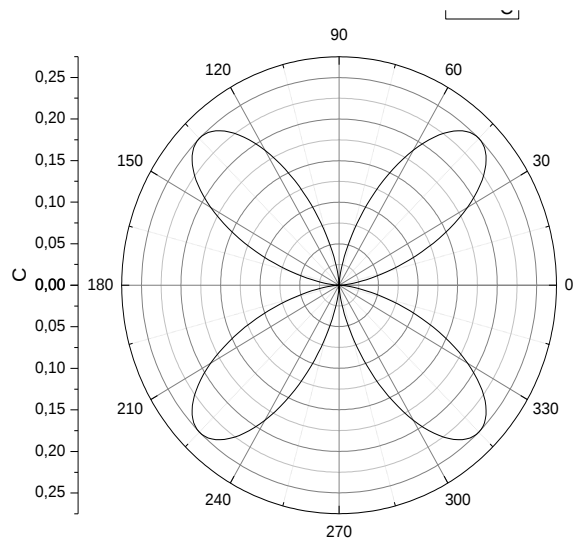
unabhängig von ϑ u. φ !

a)

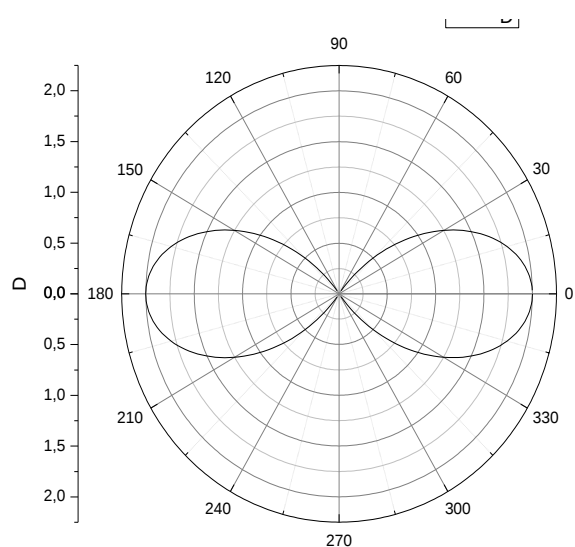


$$|Y_{lm}|^2$$

$$l = 2, m = 2$$



$$l = 2, m = 1$$



$$l = 2, m = 0$$

Her beispielhaft die Lösung für $l=2$:

1.) Kugelfunktionen für $l=2$:

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{l=2 \\ m}} |Y_{l,m}|^2 &= \frac{5}{16\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)^2 + \frac{30}{8\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{30}{32\pi} \sin^4 \theta \\ &= \frac{5}{16\pi} [9 \cos^4 \theta - 6 \cos^2 \theta + 1 + 12 \sin^2 \theta \cos^2 \theta + 3 \sin^4 \theta] \end{aligned}$$

$$= \frac{5}{16\pi} [9 \cos^2 - \cancel{9 \cos^2 \sin^2} - 6 \cos^2 + 1 + 12 \cancel{\sin^2 \cos^2} + 3 \sin^2 - \cancel{3 \sin^2 \cos^2}]$$

$$= \frac{5}{16\pi} (3 \cos^2 + 3 \sin^2 + 1) = \frac{20}{16\pi} = \frac{5}{4\pi}$$

unabhängig von θ & φ !