Übungen zur Vorlesung Quantenmechanik II

Blatt 7 - Hausaufgaben

Wintersemester 2011/12, Universität Erlangen, Prof. Florian Marquardt

Aufgabe 3: Wechselwirkungsmatrixelemente

$$\begin{aligned}\langle j_1, j_2|V|i_1, i_2\rangle &= g\int dx_1 dx_2 \Phi^*_{j_1}(x_1)\Phi^*_{j_2}(x_2)\delta(x_1-x_2)\Phi_{i_1}(x_1)\Phi_{i_2}(x_2)\\ &= g\int dx_1 \Phi^*_{j_1}(x_1)\Phi^*_{j_2}(x_1)\Phi_{i_1}(x_1)\Phi_{i_2}(x_1)\end{aligned}$$

und $j_1 = j_2 = i_1 = i_2 = j$ gilt $\langle j,j|V|j,j\rangle = g\int dx_1|\Phi_j(x_1)|^4$. Eine sehr weit ausgedehnte Wellenfunktion führt zu einem sehr kleinen Wechselwirkungselement (denn es gilt ja$\int_V dx_1|\Phi_j(x_1)|^2 = 1$, d.h. $|\Phi_j(x_1)|^2 \sim 1/V$), für eine sehr stark lokalisierte Wellenfunktion wird das Matrixelement sehr groß (Grenzfall $|\Phi_j(x_1)|^2 \to \delta(x_1) \Rightarrow \langle j,j|V|j,j\rangle \to \infty$).

Aufgabe 4: Lokalisierte Orbitale

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*_{j,m}(x)\Phi_{l,n}(x)\,dx = \frac{1}{\mathcal{N}^2}\int_{m\delta k}^{(m+1)\delta k} dk_1 e^{ik_1 j\delta x}\int_{n\delta k}^{(n+1)\delta k} dk_2 e^{-ik_2 l\delta x}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k_2-k_1)x}dx$$
$$\frac{2\pi\delta_{m,n}}{\mathcal{N}^2}\int_{m\delta k}^{(m+1)\delta k} dk\, e^{ik(j-l)\delta x}$$

Für $j \neq l$ und die Wahl von $\delta x = 2\pi/\delta k$ berechnet sich das Integral

$$\frac{2\pi\delta_{m,n}}{\mathcal{N}^2}\int_{m\delta k}^{(m+1)\delta k} dk\, e^{ik(j-l)\delta x} = \frac{2\pi\delta_{m,n}}{\mathcal{N}^2}\Big[\frac{e^{ik(j-l)\delta x}}{i(j-l)\delta x}\Big]_{m\delta k}^{(m+1)\delta k} = 0$$

Für $j = l$ wiederum

$$\frac{2\pi\delta_{m,n}}{\mathcal{N}^2}\int_{m\delta k}^{(m+1)\delta k} dk = \frac{2\pi\delta_{m,n}}{\mathcal{N}^2}\delta k$$

Die Wellenfunktion bilden also eine Orthonormalbasis für $\mathcal{N} = \sqrt{2\pi\delta k}$ und $\delta x = 2\pi/\delta k$.

$$\Phi_{l,n}(x) = \frac{1}{\mathcal{N}}\int_{n\delta k}^{(n+1)\delta k} e^{ik(x-l\delta x)}dk = \frac{1}{\mathcal{N}}\frac{e^{in\delta kx}(e^{i\delta kx}-1)}{x-l\delta x} = \frac{1}{2\pi\sqrt{\delta x}}\frac{e^{i2\pi(n+\frac{1}{2})x/\delta x}\sin(2\pi x/\delta x)}{x/\delta x - l}.$$

Aus $\Phi_{l,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\Phi_{l,n}(k)e^{ikx}$ folgt $\Phi_{l,n}(k) = \frac{1}{\delta k}e^{-ikl\delta x}\theta(k-n\delta k)\theta((n+1)\delta k - k)$. Die Zeitentwicklung ist daher gegeben durch

$$\Phi_{l,n}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\Phi_{l,n}(k,t)\,e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\Phi_{l,n}(k)e^{-i\hbar k^2 t/2m}e^{ikx} = \frac{1}{\mathcal{N}}\int_{n\delta k}^{(n+1)\delta k} dk\, e^{-i\hbar k^2 t/2m}e^{ik(x-l\delta x)}$$

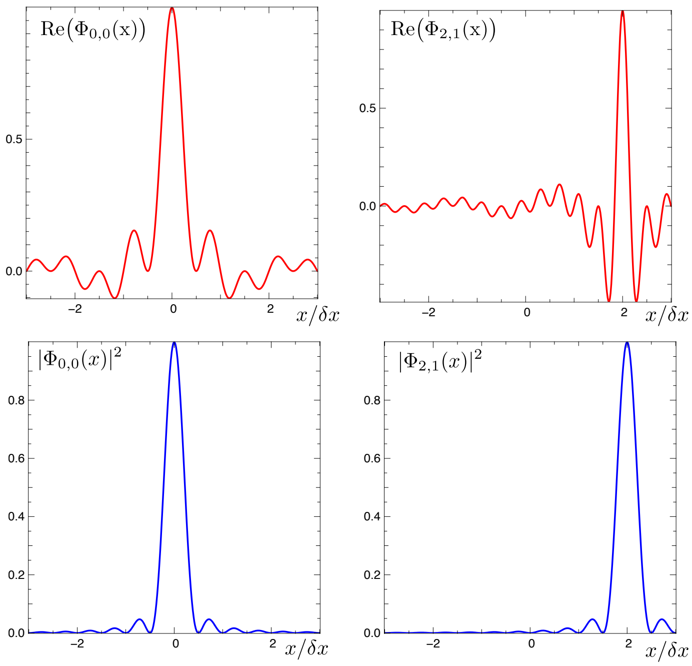

Figure 1: Zu Aufgabe 4: Realteil (rot) und Dichte (blau) der Wellenfunktionen $\Phi_{0,0}(x)$ und $\Phi_{2,1}(x)$.

*-Aufgabe: Weder Fermion noch Boson

Fordert man lediglich, dass die Dichte der Teilchen invariant unter einer Vertauschung $\Psi_0 \to \Psi_1 = U^\dagger \Psi_0$ ist, $|\Psi_0|^2 = |\Psi_1|^2$, so ist

$$\Psi_1 = e^{\pm i\varphi} \Psi_0$$

der allgemeine Ansatz. Die Einschränkung auf den Fall von Bosonen ($\varphi = 0$) und Fermionen ($\varphi = \pi$) erhält man, indem man fordert, dass ein zweites Tauschen ($\Psi_1 \to \Psi_2 = U^\dagger \Psi_1$) wieder zur Ausgangssituation mit der exakt gleichen Phase zurückführen soll, d.h. dass $\Psi_2 = \Psi_0$ gelten soll. Erlaubt man hingegen einen beliebigen Wert von φ, so hängt die Phase der Wellenfunktion von den vorausgegangenen Vertauschungen des Teilchens ab