Universität Oldenburg
Institut für Physik

Oldenburg, den 2. April 2019

Übungen zur Vorlesung *Quantenmechanik*

(SoSe 2019, Übungsblatt 1)

`https://uol.de/condmat/teaching/qm/`

Abgabe: Dienstag, 9. April bis 10:15 Uhr (*vor* der Vorlesung)

1) Thermische Energie klassischer und quantenmechanischer Oszillatoren

a) Die Hamiltonfunktion eines (eindimensionalen) klassischen harmonischen Oszillators mit der Kreisfrequenz ω lautet

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \; ;$$

nach dem Boltzmannschen Prinzip ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, den Oszillator im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T im Phasenraumpunkt (p,q) anzutreffen, proportional zu $\exp(-\beta H(p,q))$. Dabei ist $\beta = 1/(k_{\rm B}T)$ mit der Boltzmann-Konstanten $k_{\rm B}$. Zeigen Sie, dass der Erwartungswert $\langle E\rangle_{\rm cl}$ der Energie eines solchen klassischen Oszillators durch

$$\langle E\rangle_{\rm cl} = k_{\rm B}T$$

gegeben wird und daher von seiner Frequenz ω unabhängig ist.

b) Angenommen, der Oszillator kann nicht (wie in der klassischen Physik) jede beliebige Energie aufnehmen, sondern nur ganzzahlige Vielfache E_n von $\hbar\omega$, wobei die Konstante $\hbar$ die Dimension einer Wirkung besitzt: $E_n = n\cdot\hbar\omega$ mit $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Zeigen Sie, dass dann der thermische Erwartungswert $\langle E\rangle_{\rm qm}$ der Anregungsenergie des Oszillators der Beziehung

$$\langle E\rangle_{\rm qm} = \frac{\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1}$$

gehorcht. In welchem Grenzfall erhält man aus diesem „quantenmechanischen“ Resultat das klassische zurück? **(3P)**

2) Fraunhofer-Beugung am Gitter

Bei Fraunhofer-Beugung von Wellen der Wellenlänge λ an einem Spalt der Breite s berechnet sich die in den Winkel ϑ (bzgl. der Strahlrichtung) gebeugte Intensität $I(\vartheta)$ nach einer aus der Optik bekannten Formel (siehe z.B. Bergmann, Schaefer: Lehrbuch der Experimentalphysik, Band III: Optik) zu

$$I(\vartheta) = I_0 \, \frac{\sin^2\left(\frac{\pi s}{\lambda}\sin\vartheta\right)}{\left(\frac{\pi s}{\lambda}\sin\vartheta\right)^2} \; ,$$

wobei I_0 die Intensität in Vorwärtsrichtung ($\vartheta = 0$) bezeichnet.

a) Für ein Strichgitter, das aus M identischen Spalten der Breite s besteht, die den Abstand d voneinander haben, wird die Fraunhofer-Beugung durch

$$I(\vartheta) = I_0 \frac{\sin^2\left(\frac{\pi s}{\lambda}\sin\vartheta\right)}{\left(\frac{\pi s}{\lambda}\sin\vartheta\right)^2} \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{M\pi d}{\lambda}\sin\vartheta\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi d}{\lambda}\sin\vartheta\right)}$$

beschrieben. Erklären Sie diese Gleichung und beschreiben Sie das Beugungsbild. Unter welchen Winkeln treten die Hauptmaxima auf?

b) Ein Strahl von C_{60}-Molekülen („buckeyballs") wird auf ein Beugungsgitter mit einem Spaltabstand von $d = 100$ nm geschossen. Die Moleküle haben eine Geschwindigkeit von 220 m/s; aufgrund ihres Wellencharakters werden sie gebeugt. Die Beugungsfigur wird in einer Ebene betrachtet, die sich 1.25 m hinter dem Gitter befindet. Wie groß ist der Abstand zwischen den Hauptmaxima nullter und erster Ordnung in dieser Ebene? **(2P)**

3) **Eigenschaften der Fourier-Transformation**

Sei $\psi(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, eine integrable Funktion. Die Fourier-Transformation bildet ψ ab auf eine Funktion $\widehat{\psi}$, definiert durch

$$\widehat{\psi}(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}^n x \; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) \; .$$

Die Fourier-Transformation wird in der Quantenmechanik häufig benötigt, da sie den Zusammenhang zwischen der Wellenfunktion im Ortsraum und der Wellenfunktion im Impulsraum herstellt.

a) Beweisen Sie für $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^n$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ folgende Eigenschaften dieser Abbildung:

(i) $\psi(\vec{x} - \vec{a})$ wird abgebildet auf $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{a}}\, \widehat{\psi}(\vec{k})$;

(ii) $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{b}\cdot\vec{x}}\, \psi(\vec{x})$ wird abgebildet auf $\widehat{\psi}(\vec{k} - \vec{b})$;

(iii) $\lambda^{-n/2}\, \psi(\vec{x}/\lambda)$ wird abgebildet auf $\lambda^{n/2}\, \widehat{\psi}(\lambda\vec{k})$.

b) Geben Sie (für $n = 1$) die Fourier-Transformierte von

$$\psi(x) = N\mathrm{e}^{\mathrm{i}px} \left(\mathrm{e}^{-(x-x_1)^2/(2a^2)} + \mathrm{e}^{-(x-x_2)^2/(2a^2)} \right)$$

an, wobei N, p, x_1, x_2 and a reelle Konstanten sind. Wie lautet $|\widehat{\psi}(k)|$? **(2P)**

4) **Die Hermite-Polynome**

Die in dieser Aufgabe eingeführten Polynome werden später bei der quantenmechanischen Behandlung des harmonischen Oszillators eine wichtige Rolle spielen.

Die Hermite-Polynome $H_n(x)$ werden definiert durch die „Rodriguez-Formel"

$$H_n(x) = (-1)^n\, \mathrm{e}^{x^2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right)^n \mathrm{e}^{-x^2} \; .$$

Berechnen und skizzieren Sie diese Polynome für $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Was fällt Ihnen auf, wenn Sie die Nullstellen zählen? Machen Sie sich klar, dass $H_n(x)$ ein Polynom n-ten Grades ist. Wie lautet der Koeffizient von x^n? **(3P)**