

**Aufgabe 7.1 Zeeman-Effekt**

In dieser Aufgabe setzen wir  $\hbar = 1$ .

- (a) Verwenden der Vektoridentität

$$\vec{\nabla} \times (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{a}(\vec{\nabla} \cdot \vec{b}) - \vec{b}(\vec{\nabla} \cdot \vec{a}) + (\vec{\nabla} \cdot \vec{b})\vec{a} - (\vec{\nabla} \cdot \vec{a})\vec{b} \quad (1)$$

liefert für ein homogenes Magnetfeld direkt

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{B} \times \vec{r}) = \vec{B}. \quad (2)$$

Mit Hilfe der Identität

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{b} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{a}) - \vec{a} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{b}) \quad (3)$$

sehen wir überdies, dass wir in der Coulomb-Eichung arbeiten.

- (b) Einfaches Ausmultiplizieren liefert für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} + \frac{e}{2mc} \vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) \quad (4)$$

wobei wir benutzt haben, dass das Vektorpotenzial in der Coulomb-Eichung gegeben ist und wir bereits Terme quadratisch in  $B$  vernachlässigt haben.

Für ein Magnetfeld in  $z$ -Richtung können wir unter Verwendung der zyklischen Vertauschungsrelation für das Spatprodukt diesen Ausdruck nun vereinfachen zu

$$H = H_0 + \mu_B L_z B_z. \quad (5)$$

In (5) ist  $H_0$  der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms,  $L_z$  die  $z$ -Komponente des Drehimpulses und  $\mu_B = e\hbar/2mc$  ist das Bohrmagneton. Wir wissen nun aber, dass die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms  $\Psi_{nlm}$  mit Hauptquantenzahl  $n$  und Nebenquantenzahl  $l$  gerade Eigenfunktionen des Drehimpulses mit Eigenwert  $L_z \Psi_{nlm} = m \Psi_{nlm}$  ist. Somit sind die  $\Psi_{nlm}$ 's auch Eigenfunktionen der stationären Schrödingergleichung mit (5) zu den Eigenwerten

$$E \Psi_{nlm} = H \Psi_{nlm} = H_0 \Psi_{nlm} + \mu_B L_z B_z \Psi_{nlm} = (E_n + \mu_B m B_z) \Psi_{nlm}, \quad (6)$$

wobei  $E_n$  die Eigenenergien des Wasserstoffatoms sind.

Wir sehen also, dass das Anlegen eines Magnetfeldes die Entartung in den magnetischen Quantenzahlen  $m$  gerade aufhebt. Die Aufspaltung der Energielevel ist gerade  $\mu_B B$ . Für ein Feld der Stärke  $B \approx 45\text{T}$  finden wir mit  $\mu_B \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{eV/T}$  ein Levelsplitting von

$$\Delta E \approx 2.5 \cdot 10^{-3} \text{eV}. \quad (7)$$

Dies ist viel weniger als die charakteristische Energie im Wasserstoffatom,  $\Delta E \ll 1 \text{ Ry} \approx 13.6 \text{eV}$ . Damit scheint es gerechtfertigt, das Magnetfeld als kleine Störung zur Gesamtenergie zu betrachten und nur lineare Terme zu berücksichtigen.

## Aufgabe 7.2 Transfermatrix Formalismus

Wie in der letzten Serie gezeigt, müssen die Wellenfunktionen, die der Schrödingergleichung genügen, sowie ihre erste Ableitung stetig sein. Damit haben wir bei  $x = 0$

$$a + b = \alpha + \beta \quad (8)$$

$$ik(a - b) = -\kappa(\alpha - \beta). \quad (9)$$

Wir können dies nun auch schreiben als

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \\ 1 - \frac{i\kappa}{k} & 1 + \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Für die Stetigkeitsbedingungen in  $x = w$  finden wir

$$\alpha e^{-\kappa w} + \beta e^{\kappa w} = A + B \quad (11)$$

$$-\kappa(\alpha e^{-\kappa w} - \beta e^{\kappa w}) = ik(A - B), \quad (12)$$

womit wir jetzt schreiben können

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa w} & 0 \\ 0 & e^{\kappa w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\kappa}{k} & 1 + \frac{i\kappa}{k} \\ 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Zusammengefasst können wir nun  $M$  berechnen als

$$M = M_1 M_t M_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \\ 1 - \frac{i\kappa}{k} & 1 + \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\kappa w} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\kappa}{k} & 1 + \frac{i\kappa}{k} \\ 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$= \begin{pmatrix} \cosh \kappa w + i \sinh y \sinh \kappa w & i \cosh y \sinh \kappa w \\ -i \cosh y \sinh \kappa w & \cosh \kappa w - i \sinh y \sinh \kappa w \end{pmatrix} \quad (15)$$

mit  $\sinh y = \frac{1}{2}(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa})$  und  $\cosh y = \frac{1}{2}(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa})$ .

## Aufgabe 7.3 Streumatrix

- (a) Aus der Teilchenzahlerhaltung, beziehungsweise der Wahrscheinlichkeitserhaltung folgt, dass der Wahrscheinlichkeitsstrom der eingehenden Welle gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom der ausgehenden Welle sein muss (Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeit). Der Wahrscheinlichkeitsstrom der eingehenden Welle ist dabei

$$j_{in} \propto (\bar{\Psi}_{in} \nabla \Psi_{in} - \Psi_{in} \nabla \bar{\Psi}_{in}) \propto |\Psi_{in}(x)|^2. \quad (16)$$

Im letzten Schritt haben wir verwendet, dass wir für den gesamten eingehenden Strom sowohl einen Teil für  $x < 0$  nach rechts als auch für  $x > 0$  nach links berücksichtigen müssen, was zu einem Term proportional zu  $|a|^2 + |B|^2$  führt.

Analoges für die ausgehende Welle liefert damit, dass

$$|\Psi_{in}(x)|^2 = |\Psi_{out}(x)|^2 = |S\Psi_{in}|^2. \quad (17)$$

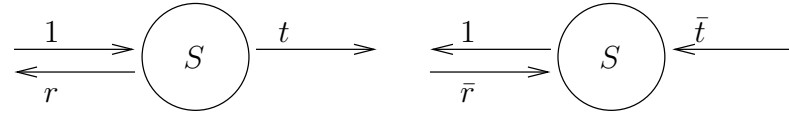
Somit muss  $S^*S = 1$  sein und  $S$  ist unitär. Direktes Ausrechnen der einzelnen Matricelemente von  $S^*S$  liefert

$$1 = |t|^2 + |r|^2 = |t'|^2 + |r'|^2 \quad (18)$$

$$0 = \bar{t}r' + \bar{r}t' = \bar{t}'r + \bar{r}'t \quad (19)$$

( $\bar{a}$  bezeichnet die komplexe Konjugation). Wir sehen mit Gleichung (18), dass eine einkommende Welle mit Wahrscheinlichkeit 1 entweder transmittiert oder reflektiert wird.

- (b) Die Zeitumkehrinvarianz des Problems verlangt, dass für  $\Psi$  eine Lösung des Problems auch  $\bar{\Psi}$  eine Lösung ist:



Damit folgt

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \bar{t} \\ \bar{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t\bar{r} + r'\bar{t} \\ |r|^2 + \bar{t}\bar{t}' \end{pmatrix} \quad (20)$$

und damit  $t = t'$ .

#### Aufgabe 7.4 Tunnelprozess

Eine einfache Rechnung zeigt, dass wir  $M$  ausdrücken können mit  $t$  und  $r$  (benutze Definition von  $M$  und  $S$  sowie Gleichungen (18), (19)):

$$M = \begin{pmatrix} 1/t & \bar{r}/\bar{t} \\ r/t & 1/\bar{t} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

(Wir haben hier bereits verwendet, dass wir ein symmetrisches Streupotenzial haben.) Die Wahrscheinlichkeit ist damit

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \cosh^2(y) \sinh^2(\kappa w)} \quad (22)$$

wobei wir das Resultat aus Aufgabe 7.2 sowie  $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$  verwendet haben. Wenn wir nun noch die Definition aus 7.2 für  $\cosh y$  verwenden, finden wir

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\kappa w)}{4E(V_0 - E)}}. \quad (23)$$

Für  $E \ll V_0$  dominiert der zweite Teil des Nenners und wir können  $T$  abschätzen als

$$T \approx 16 \frac{E}{V} e^{-\frac{2w}{\hbar} \sqrt{2mV}}, \quad (24)$$

die Transmissionswahrscheinlichkeit ist exponentiell klein.

*NB:* Klassisch würde ein Teilchen mit Wahrscheinlichkeit 1 reflektiert. Dieses Resultat ist also rein quantenmechanischer Natur.

#### Aufgabe 7.5 Resonanzen

- (a) Die Wellengleichung für  $0 \leq x \leq w$  lautet nun

$$\Psi^{(m)} = \alpha e^{ik_W x} + \beta e^{-ik_W x} \quad (25)$$

und die Stetigkeitsbedingungen können von 7.2 übernommen werden, wenn wir  $i\kappa$  durch  $k_W$  ersetzen (mit  $k_W = \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar$ ). Damit finden wir für die Transfermatrix

$$M = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_W}{k} & 1 - \frac{k_W}{k} \\ 1 - \frac{k_W}{k} & 1 + \frac{k_W}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_W w} & 0 \\ 0 & e^{ik_W w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k}{k_W} & 1 - \frac{k}{k_W} \\ 1 - \frac{k}{k_W} & 1 + \frac{k}{k_W} \end{pmatrix} \quad (26)$$

oder direkt in (15)

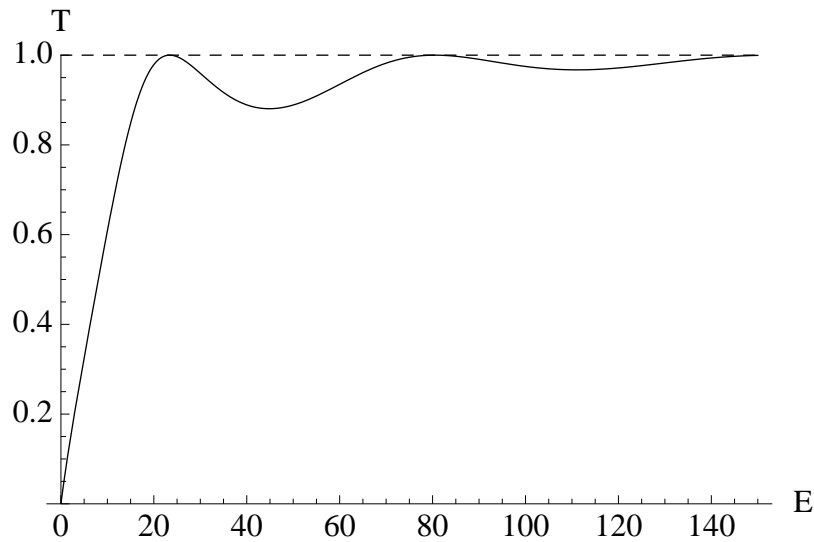
$$M = \begin{pmatrix} \cos wk_W - i \cosh y \sin wk_W & i \sinh y \sin wk_W \\ -i \sinh y \sin wk_W & \cos wk_W + i \cosh y \sin wk_W \end{pmatrix}. \quad (27)$$

(b) Aus (27) können wir direkt die Transmissionswahrscheinlichkeit ablesen,

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \sinh^2(y) \sin^2(k_W w)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_W w)}{4E(V_0 - E)}}. \quad (28)$$

Wir sehen also, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit im Allgemeinen nicht 1 ist. Dies ist wiederum ein rein quantenmechanisches Phänomen.

Wir sehen allerdings auch, dass es Energien gibt mit  $\sin(k_W w) = 0$ , bei denen die Transmissionswahrscheinlichkeit 1 ist. Diese nennt man Resonanzen. Wir können nun  $t(E)$  aufzeichnen und sehen, dass wir i.A. relativ breite Resonanzen finden, d.h. eine nur leicht modulierte Funktion, die gegen 1 strebt. Im folgenden Bild ist  $V_0 = 50$  und  $w = 1.1$  (in Einheiten mit  $2m/\hbar^2 = 1$ ).



(c) Die Nullstellen von  $t^{-1}$  sind bei

$$\cos wk_W + \left( \frac{k_W}{ik} - \frac{ik}{k_W} \right) \sin wk_W = 0. \quad (29)$$

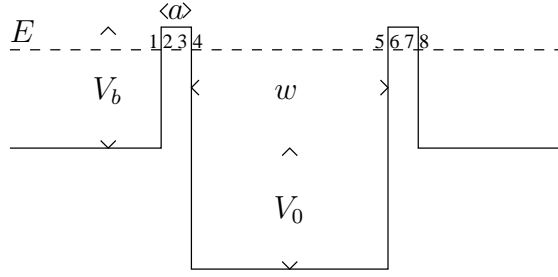
Damit finden wir also

$$2 \cot wk_W = \cot \frac{wk_W}{2} - \tan \frac{wk_W}{2} = \frac{ik}{k_W} - \frac{k_W}{ik} \quad (30)$$

$$\Rightarrow \cot \frac{wk_W}{2} = \frac{ik}{k_W} \quad \text{oder} \quad \tan \frac{wk_W}{2} = -\frac{ik}{k_W}. \quad (31)$$

Mit  $k_1 = ik$  folgt das Resultat aus Serie 6. Die Gebundenen Zustände entsprechen damit den Polen der Transmissionsamplitude.

(d) Wir wollen folgendes Potenzial betrachten:



Der Transfermatrix Formalismus erlaubt uns nun, auf einfache Weise die Stationären Lösungen dieses relativ komplizierten Potentials zu berechnen. Alles, was wir machen müssen, ist die richtigen Matrizen miteinander zu multiplizieren. Alle Matrizen, die wir brauchen, haben wir prinzipiell schon in den obigen Aufgaben gefunden:

$$M_{12} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \\ 1 - \frac{i\kappa}{k} & 1 + \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \quad M_{23} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \quad M_{34} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \frac{ik_D}{\kappa} & 1 + \frac{ik_D}{\kappa} \\ 1 + \frac{ik_D}{\kappa} & 1 - \frac{ik_D}{\kappa} \end{pmatrix} \quad (32)$$

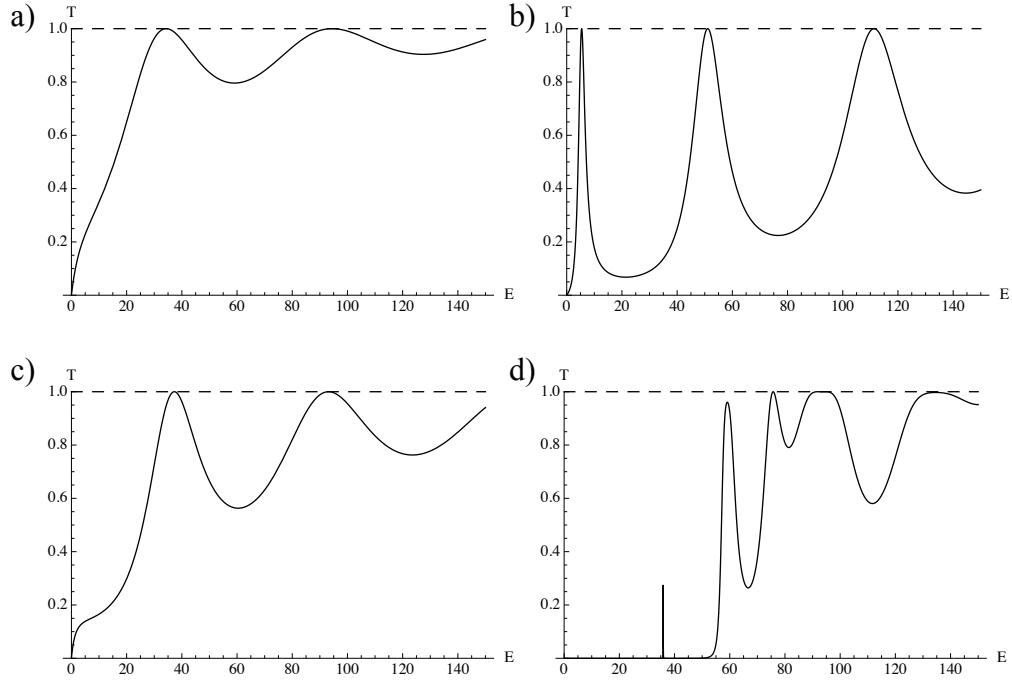
$$M_{45} = \begin{pmatrix} e^{-ik_D w} & 0 \\ 0 & e^{ik_D w} \end{pmatrix} \quad M_{56} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\kappa}{k_D} & 1 - \frac{i\kappa}{k_D} \\ 1 - \frac{i\kappa}{k_D} & 1 + \frac{i\kappa}{k_D} \end{pmatrix} \quad M_{78} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \frac{ik}{\kappa} & 1 + \frac{ik}{\kappa} \\ 1 + \frac{ik}{\kappa} & 1 - \frac{ik}{\kappa} \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Für die Stetigkeitsbedingung müssen wir dann nur noch

$$M = M_{12}M_{23}M_{34}M_{45}M_{56}M_{67}M_{78}, \quad (34)$$

wobei  $M_{67} = M_{23}$ . Diese Rechnung ist etwas aufwändig und wir lösen die Matrizenmultiplikation z.B. in Mathematica (siehe separates File).

Für nicht zu breite Barrieren ( $a \ll w$ ) finden wir ein ähnliches Bild wie in (b), allerdings sind die Resonanzen jetzt viel schärfer. Dies hängt damit zusammen, dass die Resonanzen quasi-gebundenen Zuständen entsprechen (Zustände mit endlicher Lebenszeit). Indem wir nun Barrieren um den Potentialtopf plazieren verlängern wir die Lebenszeit dieser Zustände, was schärferen Resonanzen entspricht. Machen wir die Barrieren allerdings zu dick, so spielen wieder Resonanzeffekte der Barrieren mit hinein und wir kriegen kompliziertere Strukturen (siehe Bilder und separates File).



Für alle Plots ist  $w = 1.1$ ,  $V_0 = 50$ . Für  $V_b = 50$  und  $a = 0.05$  (Figur a) finden wir ein sehr ähnliches Bild wie ohne Barrieren, nur leicht schärfere Resonanzen. In Figur b) ist die Breite wieder  $a = 0.05$ , allerdings sind die Barrieren jetzt viel höher,  $V_b = 250$ . Wählen wir eine nicht zu hohe,  $V_b = 50$ , aber dafür breitere Barriere,  $a = 0.1$  sieht das Bild (Figur c) immer noch ähnlich aus wie vorher, allerdings ändert sich die Form schon gewaltig, wenn die Breite der Barriere in die Region der Breite des Topfes kommt (Figur d,  $a = 1$ ).

### Aufgabe 7.6 Streuung eines Wellenpaketes

Wir wollen zunächst ein Wellenpaket bestehend aus ebenen Wellen,  $\Psi_k(t) = e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}$ , betrachten:

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f(k) e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}. \quad (35)$$

Zur Zeit  $t$  oszilliert der Integrand für die meisten Orte  $x$  so schnell in der Region, wo  $f(k)$  gross ist, dass er sich rausmittelt und wir 0 erhalten. Nur für Punkte  $x$ , wo die Phase der Exponentialfunktion ungefähr konstant bleibt in der Umgebung von  $k_0$ , ist auch  $\Psi(x, t)$  verschieden von Null. Das heisst, dass das Wellenpaket zentriert ist um  $x_t$ , wobei  $x_t$  die Phase gerade stationär macht. Die Bedingung für  $x_t$  lautet also

$$\left. \frac{d}{dk} (kx_t - \hbar k^2 t/2m) \right|_{k=k_0} = 0 \quad (36)$$

Damit finden wir für den Ort des Wellenpaketes  $x_t = (\hbar k_0/2m)t$ . Da dies mit der Zeit wächst, nennen wir eine ebene Welle mit  $\Psi_k = e^{ikx}$  rechtslaufend. Ebene Wellen mit  $\Psi_k = e^{-ikx}$  werden entsprechend linkslaufende Wellen genannt.

Wir betrachten nun das Wellenpaket wie in der Aufgabe bestehend aus Streuzuständen,

$$\Psi_k = \begin{cases} e^{ikx} + \tilde{r}e^{-ikx} & x < 0 \\ \tilde{t}e^{ikx} & x > 0. \end{cases} \quad (37)$$

Offensichtlich ist die einlaufende sowie die transmittierte Welle rechtslaufend und die reflektierte Welle linkslaufend. Für  $t \ll 0$  befindet sich das Wellenpaket nach obiger Analyse im Bereich  $x_t < 0$  mit einem relativen Gewicht von 1. Für  $t \gg 0$ , wir finden zwei Punkte, an denen sich ein Wellenpaket befindet: In  $x < 0$  befindet sich eine Welle um  $x_t = -(\hbar k_0/2m)t$  herum mit relativem Gewicht  $|\tilde{r}|^2$ , die nach links geht, sowie ein weiteres Wellenpaket mit  $x_t = (\hbar k_0/2m)t$ , die nach rechts geht. Das relative Gewicht dieses zweiten Paketes ist  $|\tilde{t}|^2$ . Das Gesamtgewicht ist also  $|\tilde{t}|^2 + |\tilde{r}|^2 = 1$  und ist damit konstant.

*NB:* In dieser Aufgabe haben wir angenommen, dass  $\tilde{t}$  und  $\tilde{r}$  konstant sind als Funktionen von  $E$ . Dies ist aber wie wir gesehen haben in den obigen Aufgaben nicht der Fall. Dies hat aber im Allgemeinen nur eine Auswirkung auf die Form der transmittierten und reflektierten Welle, nicht aber auf deren Ort.