1. **Warm-Up** (10 Punkte)

(a) [2 Punkte] **Translation**

Zeigen Sie, dass der Zustand $|\phi\rangle = e^{iPa/\hbar}|\psi\rangle$ *dem um die Distanz* a *verschobenen Zustand* $|\psi\rangle$ *entspricht, d.h.* $\phi(x) = \psi(x+a)$, *wobei* P *der Impulsoperator ist.*

Dazu müssen wir wissen, dass die Ortsdartstellung vom $\boldsymbol{P}$ gegeben ist durch $\langle \boldsymbol{x}| \boldsymbol{P} = \frac{\hbar\nabla}{i}\langle \boldsymbol{x}|$ und damit

$$
\begin{aligned}
\phi(x) = \langle x|\phi\rangle &= \langle \boldsymbol{x}|e^{iPa/\hbar}|\psi\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{i}{\hbar}a\overbrace{\tfrac{\hbar}{i}\partial_x}^{P})^n}{n!}\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\partial_x^n \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} a^n \qquad \text{(1 Punkt)}
\end{aligned}
$$

Wir identifizieren die Taylorentwicklung $\psi(x+a) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\partial_x^n\psi(x)a^n$ (1 Punkt) und damit $\phi(x) = \psi(x+a)$.

(b) [3 Punkte] **Harmonischer Oszillator**

Zeigen Sie, dass

$$
e^{-i\alpha N}a^\dagger e^{i\alpha N} = e^{-i\alpha}a^\dagger, \tag{1}
$$

wobei $a^\dagger$ *und* a *die Auf- und Absteiger des harmonischen Oszillators sind mit* $[a, a^\dagger] = 1$ *und* $N = a^\dagger a$.

[Hinweis: Wenden Sie die linke und rechte Seite von (1) auf einen allgemeinen Zustand $|\phi\rangle = \sum_n b_n|n\rangle$ *an, wobei* $N|n\rangle = n|n\rangle$ *und* $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$*.]*

Zunächst sehen wir, dass

$$
\begin{aligned}
e^{-i\alpha N}a^\dagger e^{i\alpha N}|n\rangle &= e^{-i\alpha N}a^\dagger|n\rangle e^{i\alpha n} \\
&= e^{-i\alpha N}|n+1\rangle\sqrt{n+1}e^{i\alpha n} \\
&= |n+1\rangle e^{-i\alpha(n+1)}\sqrt{n+1}e^{i\alpha n} \\
&= e^{-i\alpha}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \\
&= e^{-i\alpha}a^\dagger|n\rangle \qquad \text{(2 Punkte)}
\end{aligned}
$$

Für einen beliebigen Zustand gilt

$$
e^{-i\alpha N}a^\dagger e^{i\alpha N}|\phi\rangle = \sum_n b_n e^{-i\alpha}a^\dagger|n\rangle = e^{-i\alpha}a^\dagger|\phi\rangle\,, \qquad \text{(1 Punkt)}
$$

womit die Identitität gezeigt wäre. Alternativ könnten wir auf Operator-Basis schreiben

$$e^{-i\alpha N}a^\dagger = \sum_k \frac{(-i\alpha)^k}{k!} \underbrace{(a^\dagger a)^k a^\dagger}_{(a^\dagger a a^\dagger a\cdots)a^\dagger = a^\dagger(aa^\dagger\cdots aa^\dagger)=a^\dagger(aa^\dagger)^k} = a^\dagger \sum_k \frac{(-i\alpha)^k}{k!}(aa^\dagger)^k$$
$$= a^\dagger e^{-i\alpha(aa^\dagger)} = a^\dagger e^{-i\alpha(N+1)}$$

Und damit

$$e^{-i\alpha N}a^\dagger e^{i\alpha N} = a^\dagger e^{-i\alpha(N+1)}e^{i\alpha N} = e^{-i\alpha}a^\dagger.$$

(c) [3 Punkte] **Bloch-Gleichungen**

Wir betrachten ein Teilchen mit magnetischem Moment $\boldsymbol{M} = \gamma \boldsymbol{L}$ *im Magnetfeld* $\boldsymbol{B}$,

$$H = -\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B}.$$

Zeigen Sie mit Hilfe der Kommutatorrelationen für den Drehimpuls, dass der Erwartungswert $\langle \boldsymbol{M}\rangle$ *die Bewegungsgleichung*

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{M}\rangle = \gamma \langle \boldsymbol{M}\rangle \times \boldsymbol{B}$$

erfüllt.

Nach dem Ehrenfest-Theorem gilt für einen quantenmechanischen Operator O

$$\frac{d}{dt}\langle O\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H,O]\rangle + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle. \qquad \text{(1 Punkt)}$$

In unserem Fall ist $O = \boldsymbol{M}$, also

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle M_i\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle [H, M_i]\rangle \\ &= -\sum_j \frac{i}{\hbar}\gamma^2 B_j \langle [L_j, L_i]\rangle \\ &= -\sum_j \frac{i^2}{\hbar}\gamma^2 B_j \varepsilon_{jik}\hbar\langle L_k\rangle \qquad \text{(1 Punkt)} \\ &= \gamma[\langle \boldsymbol{M}\rangle \times \boldsymbol{B}]_i \qquad \text{(1 Punkt)}\end{aligned}$$

(d) [2 Punkte] **Stark-Effekt**

Ein Zwei-Zustands-System mit Basiszuständen $|\psi_+\rangle$ *und* $|\psi_-\rangle$ *koppelt an ein klassisches elektromagnetischens Feld* $\mathcal{E}$. *Der Hamilton-Operator ist gegeben durch*

$$\begin{pmatrix} \langle\psi_+|H|\psi_+\rangle & \langle\psi_+|H|\psi_-\rangle \\ \langle\psi_-|H|\psi_+\rangle & \langle\psi_-|H|\psi_-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_+ & \alpha\mathcal{E} \\ (\alpha\mathcal{E})^* & E_- \end{pmatrix}.$$

Bestimmen Sie dessen Eigenenergien und diskutieren Sie den Limes $|\alpha\mathcal{E}| \gg |E_- - E_+|$ *und* $|\alpha\mathcal{E}| \ll |E_- - E_+|$.

[Hinweis: $\sqrt{1+x^2} = 1 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{8}x^4 + \cdots\,, \qquad (x \ll 1)$*.]*

Wir gehen aus von den Hamilton-Operator

$$H = \begin{pmatrix} E_+ & \alpha\mathcal{E} \\ \alpha^*\mathcal{E}^* & E_- \end{pmatrix}$$

Die Eigenenergien ergeben sich aus dem charakteristischen Polynom

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} -\lambda + E_+ & \alpha\mathcal{E} \\ \alpha^*\mathcal{E}^* & -\lambda + E_- \end{vmatrix} &= (-\lambda + E_+)(-\lambda + E_-) - |\alpha\mathcal{E}|^2 \\ &= \lambda^2 - (E_+ + E_-)\lambda + E_+E_- - |\alpha\mathcal{E}|^2 = 0 \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die Eigenenergien

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_+ + E_-)^2}{4} - E_+E_- + |\alpha\mathcal{E}|^2} \\ &= \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_+ - E_-)^2}{4} + |\alpha\mathcal{E}|^2}. \qquad (1\,\text{Punkt}) \end{aligned}$$

Im Limes $\alpha\mathcal{E} \gg E_- - E_+$ erhalten wir $E_{1,2} \approx \frac{E_+ + E_-}{2} \pm |\alpha\mathcal{E}|$ (0.5 Punkte) (linearer Stark-Effekt) und im anderen Grenzfall $\alpha\mathcal{E} \ll E_- - E_+$ ergibt sich

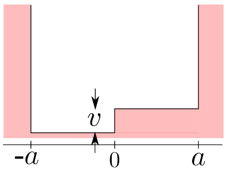
$$\begin{aligned} E_{1,2} &= \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_+ - E_-)^2}{4} + |\alpha\mathcal{E}|^2} \\ &= \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{|E_+ - E_-|}{2}\sqrt{1 + \frac{4|\alpha\mathcal{E}|^2}{(E_+ - E_-)^2}} \\ &\approx \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{|E_+ - E_-|}{2}\left(1 + \frac{2|\alpha\mathcal{E}|^2}{(E_+ - E_-)^2}\right) \\ &= \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{|E_+ - E_-|}{2} \pm \frac{|\alpha\mathcal{E}|^2}{|E_+ - E_-|} \qquad (0.5\,\text{Punkte}) \\ &\text{(quadratischer Stark} - \text{Effekt)} \end{aligned}$$

Angenommen, dass $E_- > E_+$, so ergibt sich

$$E_{1,2} \approx \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{E_- - E_+}{2} \pm \frac{|\alpha\mathcal{E}|^2}{E_- - E_+} = E_\mp \pm \frac{|\alpha\mathcal{E}|^2}{E_- - E_+}.$$

2. Potenzial-Topf (5 Punkte)

Wir betrachten ein Teilchen in einem eindimensionalen Potenzialtopf



$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq -a \\ v\,\theta(x) & -a < x \leq a \\ \infty & a < x \end{cases} ,$$

wobei $\theta(x)$ die Heaviside-Theta-Funktion ist.

(a) *[2 Punkte] Machen Sie einen geeigneten Ansatz für die Wellenfunktion in den Teilbereichen $-a < x \leq 0$ und $0 < x \leq a$, der gleichzeitig die Anschlussbedingung bei $x = \pm a$ erfüllt.*

Ein geeigneter Ansatz, der die Stetigkeitsbedingung bei $x = \pm a$ erfüllt, ist gegeben durch

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(k(x+a)) & -a < x \leq 0 \\ B \sin(q(x-a)) & 0 < x \leq a \end{cases} ,$$

weil $\psi(\pm a) = 0$. Hierbei sind $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und $q = \sqrt{2m(E-v)/\hbar^2}$.

(b) *[3 Punkte] Zeigen Sie mit den Stetigkeitsbedingung bei $x = 0$, dass die Eigenenergien bestimmt werden durch die tranzendente Gleichung*

$$q \tan(ka) = -k \tan(qa),$$

wobei $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und $q = \sqrt{2m(E-v)/\hbar^2}$.

Wir lösen zunächst die Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion und deren Ableitung bei $x = 0$,

$$\psi(0+) - \psi(0-) = A \sin(ka) + B \sin(qa) = 0, \qquad \text{(1 Punkt)}$$
$$\partial_x \psi(0+) - \partial_x \psi(0-) = Ak \cos(ka) - Bq \cos(qa) = 0. \qquad \text{(1 Punkt)}$$

Daraus erhalten wir

$$\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{q} \tan(qa). \qquad \text{(1 Punkt)}$$

3. Harmonischer Oszillator (7 Punkte)

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad \text{mit} \quad [X,P] = i\hbar.$$

Wir definieren die Auf- und Absteiger entsprechend, $a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P$ *und* $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P$*. Zur Zeit* $t = 0$ *sei das System initialisiert im Zustand*

$$|\phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle + |n+2\rangle),$$

wobei $|n\rangle$ *die Eigenzustände des Hamilton-Operators sind, d.h.* $H|n\rangle = \hbar\omega(n+1/2)|n\rangle$*.*

(a) *[2 Punkte] Bestimmen Sie* $|\phi(t)\rangle$ *für beliebige Zeiten* t *und berechnen Sie damit den Erwartungswert* $\langle H\rangle$*, wobei* $\langle\cdot\rangle = \langle\phi(t)|\cdot|\phi(t)\rangle$*.*

Für beliebige Zeiten ist der Zustand gegeben durch

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t/2}\Big(e^{-in\omega t}|n\rangle + e^{-i(n+2)\omega t}|n+2\rangle\Big). \qquad \text{(1 Punkt)}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle\phi(t)|H|\phi(t)\rangle &= \frac{1}{2}\Big((\hbar\omega(n+1/2)) + (\hbar\omega(n+1/2+2))\Big)\\ &= \hbar\omega\big(n+3/2\big). \qquad \text{(1 Punkt)}\end{aligned}$$

(b) *[5 Punkte] Bestimmen Sie die Zeitabhängigkeit von* ΔX^2*, wobei* $\Delta X^2 = \langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2$*.*

Zuallererst drücken wir X durch a und $a^\dagger$ aus,

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a). \qquad \text{(1 Punkt)}$$

Wir sehen sofort, dass

$$\langle\phi(t)|X|\phi(t)\rangle = 0. \qquad \text{(1 Punkt)}$$

Desweiteren ist

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^\dagger a^\dagger + aa + 2a^\dagger a + 1) \qquad \text{(1 Punkt)}$$

und

$$\begin{aligned}\sqrt{2}e^{i\omega t/2}X^2|\phi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,|n+2\rangle + \sqrt{n}\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle + (2n+1)\,|n\rangle\Big)e^{-in\omega t}\\ &+ \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\sqrt{n+3}\sqrt{n+4}\,|n+4\rangle + \sqrt{n}\sqrt{n+2}\,|n\rangle + (2[n+2]+1)\,|n+2\rangle\Big)e^{-i(n+2)\omega t}.\end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{aligned}\langle\phi(t)|X^2|\phi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{4m\omega}e^{in\omega t}\Big((2n+1)e^{-in\omega t} + \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}e^{-i(n+2)\omega t}\Big)\\ &+ \frac{\hbar}{4m\omega}e^{i(n+2)\omega t}\Big((2(n+2)+1)e^{-i(n+2)\omega t} + \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}e^{-in\omega t}\Big)\\ &= \frac{\hbar}{m\omega}[n+3/2] + \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\cos(2\omega t) \qquad \text{(2 Punkte)}\end{aligned}$$

4. Spin-$\frac{1}{2}$ *(7 Punkte)*

Gegeben sei der Hamilton-Operator eines Spin-$\frac{1}{2}$ Systems,

$$H = -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_y) = -\frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\pi/4} \\ e^{i\pi/4} & 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

in der Eigen-Basis von σ_z, d.h. $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Zur Zeit $t = 0$ präparieren wir den Zustand

$$|\phi(0)\rangle = |\uparrow\rangle\,. \tag{3}$$

(a) *[3 Punkte] Zur Zeit $t = 0$ wird H gemessen. Welche Werte E werden mit welcher Wahrscheinlichkeit $P(E)$ gemessen.*

Der Hamilton-Operator kann geschrieben werden als

$$H = -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\pi/4} \\ e^{i\pi/4} & 0 \end{pmatrix}$$

Dieser hat die Eigenwerte $E_{1,2} = \mp\frac{\hbar\omega}{2}$ (1 Punkt) und die Eigenvektoren

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi/4} \end{pmatrix}, \qquad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\pi/4} \end{pmatrix}. \qquad \text{(1 Punkt)}$$

Für den anfangs initialisierten Zustand gilt also

$$|\phi(0)\rangle = |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_1\rangle + |v_2\rangle)$$

Wir messen den Wert $E_1 = -\hbar\omega/2$ also mit der Wahrscheinlichkeit $P(-\hbar\omega/2) = |\langle v_1|\uparrow\rangle|^2 = 1/2$ (0.5 Punkte) und den Wert $E_2 = \hbar\omega/2$ also mit der Wahrscheinlichkeit $P(\hbar\omega/2) = |\langle v_2|\uparrow\rangle|^2 = 1/2$ (0.5 Punkte).

(b) *[4 Punkte] Wieder wird der Zustand (3) zum Zeitpunkt $t = 0$ initialisiert und zu einem späteren Zeitpunkt τ die Observable $A = \sigma_z$ gemessen. Welche Werte a werden mit welcher Wahrscheinlichkeiten $P(a)$ gemessen.*

Zu einem späteren Zeitpunkt τ ist der anfangs initialisierte Zustand gegeben durch

$$\begin{aligned} |\phi(\tau)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|v_1\rangle e^{i\omega\tau/2} + |v_2\rangle e^{-i\omega\tau/2}\big) \\ &= \frac{1}{2}\big([|\uparrow\rangle + e^{i\pi/4}|\downarrow\rangle]e^{i\omega\tau/2} + [|\uparrow\rangle - e^{i\pi/4}|\downarrow\rangle]e^{-i\omega\tau/2}\big) \qquad \text{(2 Punkte)} \end{aligned}$$

Wir messen die Werte $a = \pm 1$ also mit den Wahrscheinlichkeiten

$$P(\pm 1) = |\langle\uparrow,\downarrow|\phi(\tau)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left|e^{i\omega\tau/2} \pm e^{-i\omega\tau/2}\right|^2 = \left\{\begin{array}{l} \cos^2(\omega\tau/2) \\ \sin^2(\omega\tau/2) \end{array}\right. . \qquad \text{(2 Punkte)}$$

5. Dreiatomiges Molekül (6 Punkte)

Wir betrachten ein Elektron in einem Molekül, das aus drei Atomen A, B, C gebildet wird. Die um die drei Kerne lokalisierten Wellenfunktionen bezeichnen wir entsprechend mit $|\varphi_a\rangle$, $|\varphi_b\rangle$ und $|\varphi_c\rangle$. Vernachlässigt man zunächst die Möglichkeit, dass das Elektron von einem Atom zum anderen hüpfen kann, so wird das System durch einen Hamilton-Operator H_0 beschrieben, für den gilt $H_0 |\varphi_i\rangle = E_0 |\varphi_i\rangle$ $(i = a, b, c)$. Nun werden die Atome durch einen zusätzlichen Operator V gekoppelt,

$$\begin{aligned} V |\varphi_a\rangle &= t |\varphi_b\rangle + t |\varphi_c\rangle \\ V |\varphi_b\rangle &= t |\varphi_a\rangle + t |\varphi_c\rangle \\ V |\varphi_c\rangle &= t |\varphi_a\rangle + t |\varphi_b\rangle \end{aligned}$$

(a) *[1 Punkt] Schreiben Sie $H = H_0 + V$ als 3×3-Matrix in der Basis $\{|\varphi_a\rangle , |\varphi_b\rangle , |\varphi_c\rangle\}$.*

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & t & t \\ t & E_0 & t \\ t & t & E_0 \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = E_0 \mathbb{1} + t\lambda \qquad \text{(1 Punkt)}$$

(b) *[2 Punkte] Wir definieren den Operator*

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie T^2 und T^3 und drücken Sie H durch die Einheitsmatrix $\mathbb{1}$, T und T^2 aus.

$$T^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(0.5 Punkte)}$$
$$T^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{(0.5 Punkte)}$$

Wir identifizieren T mit dem Translation-Operator, denn $T |\varphi_a\rangle = |\varphi_c\rangle$, $T |\varphi_b\rangle = |\varphi_a\rangle$, usw. Für das dreiatomige Molekül muss entsprechend die periodische Randbedingung $T^3 |\varphi_i\rangle = |\varphi_i\rangle$ gelten. Desweiteren sehen wir, dass

$$\lambda = T + T^2$$

und damit $H = E_0 \mathbb{1} + t(T + T^2)$ (1 Punkt).

(c) *[1 Punkt] Zeigen Sie, dass die Eigenvektoren von T gleichzeitig Eigenvektoren von H sind.*

Es sei $T |t_j\rangle = t_j |t_j\rangle$, dann ist

$$H |t_j\rangle = [E_0 + t(t_j + t_j^2)] |t_j\rangle . \qquad \text{(1 Punkt)}$$

(d) *[2 Punkte] Zeigen Sie mit Hilfe von (b) und (c), dass die Eigenwerte von H gegeben sind durch $E_0 + 2t\cos(2\pi n/3)$ mit $n = 0,\ 1,\ 2$.*

Die Eigenwerte von T ergeben sich aus dem charakteristischen Polynom

$$\begin{vmatrix} -t_n & 0 & 1 \\ 1 & -t_n & 0 \\ 0 & 1 & -t_n \end{vmatrix} = -t_n^3 + 1 = 0 \Rightarrow t_n = e^{i\frac{2\pi}{3}n} \quad \text{mit}\, n = 0, 1, 2 \qquad (1\,\text{Punkt})$$

Für die Eigenenergien erhalten wir also

$$\begin{aligned} E_n &= E_0 + t\left(e^{i2\pi n/3} + e^{i4\pi n/3}\right) = E_0 + t\left(e^{i2\pi n/3} + e^{-i2\pi n/3}\right) \\ &= E_0 + 2t\cos(2\pi n/3). \qquad (1\,\text{Punkt}) \end{aligned}$$