Theoretische Physik IV
Lösungen der Übungsblätter

KIT - Karlsruher Institut für Technologie
Sommersemester 2012

Mitschriebe ausgearbeitet von
Philipp Basler, Nils Braun, Larissa Bauer

18. Juli 2012

Inhaltsverzeichnis

1. Übung	4
1. Aufgabe (Skalarprodukte)	7
2. Aufgabe (Delta-Distribution)	10
3. Aufgabe (Fouriertransformation)	11
2. Übung	13
4. Aufgabe (Wellenpakete)	16
5. Aufgabe (Potentialtöpfe)	21
3. Übung	25
6. Aufgabe (Potentialbarrieren)	28
7. Aufgabe (δ -Potential)	30
8. Aufgabe (Hermitesche Operatoren)	32
4. Übung	32
9. Aufgabe (Reflexion eines Wellenpakets)	35
10. Aufgabe (Fourier-Entwicklung)	37
11. Aufgabe (Orthonormalsysteme)	40
12. Aufgabe (Eigenwerte,-funktionen und Projektoren)	43
5. Übung	45
13. Aufgabe (Kommutierende Operatoren)	48
14. Aufgabe (Störwelle)	50
6. Übung	54
15. Aufgabe (Virialsatz)	56
16. Aufgabe (Harmonischer Oszillator I)	57
17. Aufgabe (Harmonischer Oszillator II)	59
7. Übung	63
18. Aufgabe (Wellenpaket im harmonischen Oszillator)	66
19. Aufgabe (Pauli-Matrizen)	68
20. Aufgabe (Operatoridentitäten (freiwillig))	69
8. Übung	71
21. Aufgabe ()	74
22. Aufgabe ()	75
23. Aufgabe ()	78

9. Übung	79
24. Aufgabe (Drehimpuls I)	81
25. Aufgabe (Drehimpuls II)	82
26. Aufgabe (Drehungen und Drehimpuls)	84
10. Übung	86
27. Aufgabe (Zweidimensionaler harmonischer Operator)	89
28. Aufgabe (Der starre Rotator)	92
29. Aufgabe (Bessel- und Neumannfunktionen)	94
11. Übung	97
30. Aufgabe (Wasserstoffradialwellenfunktion)	99
31. Aufgabe (Korrespondenzprinzip)	100
32. Aufgabe (Potentialtopf)	101
12. Übung	102
33. Aufgabe (Addition von Drehimpulsen)	104
34. Aufgabe (Streuung an einer harten Kugel)	107
35. Aufgabe (Streuung an einem kugelsymmetrischen Potentialtopf)	108
13. Übung	110
36. Aufgabe (Bornsche Näherung für Yukawa-Potential)	113
37. Aufgabe (Gestörter harmonischer Oszillator)	114
38. Aufgabe (Gestörter harmonischer Oszillator: Advanced)	118

1. Übung

Aufgabe 1: Skalarprodukte

7 Punkte

Sei $\mathcal{V}$ ein Vektorraum über $\mathbb{C}$. Dann ist das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ (auch mit $\langle \cdot | \cdot \rangle$ bezeichnet) eine Abbildung

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$$

mit den Eigenschaften

$$\langle x_1, x_2 \rangle = \langle x_2, x_1 \rangle^*, \quad x_1, x_2 \in \mathcal{V}, \quad (1)$$

$$\langle x, a_1 x_1 + a_2 x_2 \rangle = a_1 \langle x, x_1 \rangle + a_2 \langle x, x_2 \rangle, \quad x, x_1, x_2 \in \mathcal{V}, a_1, a_2 \in \mathbb{C}, \quad (2)$$

$$\langle x, x \rangle \geq 0 \quad \forall x \in \mathcal{V}, \quad (3)$$

$$\langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0. \quad (4)$$

a) Sei L^2 der Raum der quadratintegrablen Funktionen, d.h.

$$L = \left\{ f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \right\}.$$

Betrachten wir des weiteren nur stetige Funktionen. Zeigen Sie, dass

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx$$

ein Skalarprodukt definiert, d.h. die Bedingungen (1)-(4) erfüllt. Zeigen Sie insbesondere, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx < \infty \quad \forall f, g \in L^2.$$

Die Existenz eines Skalarproduktes macht L^2 zu einem Prä-Hilbert-Raum. Man kann weiterhin zeigen, dass L^2 vollständig und somit ein Hilbert-Raum ist.

b) Betrachten Sie die Funktionen $f_n(x)$ mit $n \in \mathbb{N}, n \geq 0$ definiert durch

$$f_n(x) = \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad [n/2] = \begin{cases} n/2 & n \text{ gerade} \\ (n-1)/2 & n \text{ ungerade} \end{cases}.$$

- Geben Sie $f_i(x)$ explizit für $0 \leq i \leq 3$ an.
- Berechnen Sie die Skalarprodukte $\langle f_i, f_j \rangle$ für $i, j \leq 3$. Können Sie das allgemeine Ergebnis raten?

Hinweis: Berechnen Sie zunächst

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} dx$$

unter Verwendung von

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \left(\left(-\frac{d}{d\alpha} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \right) \Big|_{\alpha=1}$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.$$

(bitte wenden)

Aufgabe 2: Delta-Distribution

6 Punkte

Die Delta-Distribution $\delta(x)$ ist definiert durch die Vorschrift

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0) \quad \text{für alle Funktionen } f \text{ mit } \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

a) Zeigen Sie, dass die Funktionenfolge

$$f_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}, \quad a > 0; a \in \mathbb{R}$$

für $a \rightarrow 0$ gegen die Delta-Funktion konvergiert.

b) Beweisen Sie die folgenden Rechenregeln:

(i) $\delta'(x)f(x) = -\delta(x)f'(x)$

(ii) $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$, mit $f(x_i) = 0$ und $f'(x_i) \neq 0$

Aufgabe 3: Fouriertransformation

7 Punkte

Die Fouriertransformierte $\tilde{f} = \mathcal{F}(f)$ einer Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist definiert durch

$$\tilde{f}(k) = \mathcal{F}(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx.$$

Die Rücktransformation ist entsprechend gegeben durch

$$f(x) = \mathcal{F}^\dagger(\tilde{f}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \tilde{f}(k) dk.$$

a) Berechnen Sie die Fouriertransformierte der folgenden Funktionen:

(i) $f(x) = e^{-ax^2/c^2}$, $a > 0; a, c \in \mathbb{R}$

Welche Form hat die Fouriertransformierte?

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

(ii) $f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$, $a > 0; a \in \mathbb{R}$

Was findet man im Limes $a \rightarrow 0$ für die Funktion und ihre Fouriertransformierte?

b) Beweisen Sie die folgenden Eigenschaften der Fouriertransformation:

(i) Sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ n -mal stetig differenzierbar und die n -te Ableitung $f^{(n)}$ integrierbar, dann gilt

$$\mathcal{F}(f^{(n)}) = (it)^n \tilde{f}(k).$$

Ist $x^n f(x)$ integrierbar, gilt

$$\mathcal{F}((-ix)^n f(x)) = \tilde{f}^{(n)}(k).$$

(ii) Bezeichne $f \circ g$ die Faltung zweier Funktionen $(f \circ g)(x) = \int f(x-y)g(y) dy$, so gilt

$$\mathcal{F}(f \circ g) = \sqrt{2\pi} \tilde{f}(k) \tilde{g}(k),$$

falls die Fouriertransformierte existiert.

1. Aufgabe: Skalarprodukte

Sei L^2 der Raum der quadratintegriblen Funktionen auf $\mathbb{C}$. Sei

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) \, dx$$

(a) Wir prüfen zuerst die Skalarprodukteigenschaften nach. Seien dazu $f, g, h \in L^2$ und $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle f, g \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (g^*(x)f(x))^* \, dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} g^*(x)f(x) \, dx \right)^* \\ &= \langle g, f \rangle^* \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \langle f, a_1g + a_2h \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)(a_1g(x) + a_2h(x)) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} a_1f^*(x)g(x) + a_2f^*(x)h(x) \, dx \\ &= a_1 \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) \, dx + a_2 \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)h(x) \, dx \\ &= a_1 \langle f, g \rangle + a_2 \langle f, h \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

$$\langle f, f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{|f(x)|^2}_{\geq 0} \, dx \geq \int_{-\infty}^{\infty} 0 \, dx = 0 \quad (3)$$

$$\langle f, f \rangle = 0 \implies \int_{-\infty}^{\infty} |f|^2 \, dx = 0 \implies f(x) = 0 \text{ für alle } x \in \mathbb{R} \implies f = 0$$

$$f = 0 \implies |f| = 0 \implies \int_{-\infty}^{\infty} |f|^2 \, dx = \langle f, f \rangle = 0 \quad (4)$$

Zum Beweis von (1) und (2) wurde die Linearität des Integrals ausgenutzt, zum Beweis von (3) die Monotonie. (4) folgt aus einem Satz der Analysis, dass eine positive Funktion mit Integral Null schon die Nullfunktion sein muss.

Desweiteren benutzen wir die Höldersche Ungleichung für $p = q = 2$. Sei dazu $f, g \in L^2$. Dann muss auch f^* in L^2 liegen (wieder aufgrund der Linearität des Integrals). Nach der Hölderschen Ungleichung liegt jetzt f^*g in L^1 , da $\mathbb{R}$ ein Maßraum ist und

$$\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$$

erfüllt ist. Vor allem ist also

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f^*(x)g(x)| \, dx < \infty$$

und daraus folgt die Behauptung aufgrund der Monotonie.

(b) Dies sind die ersten vier Terme explizit berechnet:

$$\begin{aligned} f_0(x) &= e^{-\frac{x^2}{2}} \\ f_1(x) &= 2e^{-\frac{x^2}{2}} x \\ f_2(x) &= -2e^{-\frac{x^2}{2}} + 4e^{-\frac{x^2}{2}} x^2 \\ f_3(x) &= -12e^{-\frac{x^2}{2}} x + 8e^{-\frac{x^2}{2}} x^3 \end{aligned}$$

(c) Wir setzen

$$X(n) = \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} \, dx$$

Das Integral lässt sich durch partielle Integration lösen:

$$X(n) = \underbrace{\frac{1}{n+1} x^{n+1} e^{-x^2}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{n+1} \int x^{n+1} (-2x) e^{-x^2} \, dx = \frac{2}{n+1} X(n+2)$$

Umgeschrieben wird daraus für n gerade:

$$X(n) = \frac{n-1}{2} X(n-2) = \frac{n-1}{2} \frac{n-3}{2} X(n-4) = \dots = \frac{(n-1)!!}{2^{n/2}} X(0)$$

Darin lässt sich die Formel in den Erläuterungen einsetzen:

$$X(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \, dx = \sqrt{\pi}$$

also

$$X(n) = \frac{(n-1)!!}{2^{n/2}} \sqrt{\pi}$$

Die ersten 4 Terme sind hier aufgeführt (sie werden später noch benötigt):

$$X(0) = \sqrt{\pi} \quad X(2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad X(4) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \quad X(6) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}$$

Für ein ungerades n erhält man analog

$$X(n) = \frac{(n-1)!!}{2^{[n/2]}} X(1) = 0$$

was sich durch einfaches Ausrechnen des Integrals $X(1) = \int x e^{-x^2} dx$ zeigen lässt.

Nutzt man jetzt die oben erhaltenen Ergebnisse für die f_i , so kommt man auf:

	f_0	f_1	f_2	f_3
f_0	e^{-x^2}	$2e^{-x^2}x$	$-2e^{-x^2} + 4e^{-x^2}x^2$	$-12e^{-x^2}x + 8e^{-x^2}x^3$
f_1	$2e^{-x^2}x$	$4e^{-x^2}x^2$	$-4e^{-x^2}x + 8e^{-x^2}x^3$	$-24e^{-x^2}x^2 + 16e^{-x^2}x^4$
f_2	$-2e^{-x^2} + 4e^{-x^2}x^2$	$-4e^{-x^2}x + 8e^{-x^2}x^3$	$4e^{-x^2} - 16e^{-x^2}x^2 + 16e^{-x^2}x^4$	$24e^{-x^2}x - 64e^{-x^2}x^3 + 32e^{-x^2}x^5$
f_3	$-12e^{-x^2}x + 8e^{-x^2}x^3$	$-24e^{-x^2}x^2 + 16e^{-x^2}x^4$	$24e^{-x^2}x - 64e^{-x^2}x^3 + 32e^{-x^2}x^5$	$144e^{-x^2}x^2 - 192e^{-x^2}x^4 + 64e^{-x^2}x^6$

Man sieht, dass sich unsere Definition für $X(n)$ beim Integrieren in die einzelnen Terme einfügen lässt und nur noch "Polynome" über den $X(n)$ stehen bleiben. Man erhält zum Beispiel

$$\int f_0 f_0 = \int e^{-x^2} = X(0) = \sqrt{\pi} \quad \int f_2 f_1 = 8X(3) - 4X(1) = 0$$

Insgesamt erhält man jetzt

$X[0]$	$2X[1]$	$-2X[0] + 4X[2]$	$-12X[1] + 8X[3]$
$2X[1]$	$4X[2]$	$-4X[1] + 8X[3]$	$-24X[2] + 16X[4]$
$-2X[0] + 4X[2]$	$-4X[1] + 8X[3]$	$4X[0] - 16X[2] + 16X[4]$	$24X[1] - 64X[3] + 32X[5]$
$-12X[1] + 8X[3]$	$-24X[2] + 16X[4]$	$24X[1] - 64X[3] + 32X[5]$	$144X[2] - 192X[4] + 64X[6]$

Da viele Terme aufgrund der der Tatsache, dass $x(n)$ für n ungerade Null ist, wegfallen, bleiben nur noch wenige Terme zu berechnen. Man erhält nach der Berechnung eine Matrix M mit

$$M_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} f_i f_j dx$$

und

$$M = \begin{pmatrix} \sqrt{\pi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{\pi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8\sqrt{\pi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 48\sqrt{\pi} \end{pmatrix}$$

Allgemein wäre die Vermutung, dass nur die $M_{ii} = \int f_i^2$ überhaupt einen Wert ungleich Null ergeben. Empirisch sieht man die Formel

$$M_{ii} = (2i)!! \sqrt{\pi}$$

2. Aufgabe: Delta-Distribution

- (a) Um zu zeigen, dass f_a gegen eine Delta-Distribution konvergiert, berechnen wir für eine beliebige quadratintegrale Funktion f :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_a(x) f(x) \, dx = \int_{-a}^a \frac{1}{2a} f(x) \, dx$$

Sei jetzt F die Stammfunktion dieser Funktion f (die auch existiert - siehe Analysis). Dann können wir schreiben

$$= \frac{1}{2a} (F(a) - F(-a))$$

Dies entspricht gerade dem beidseitigen Differenzenquotienten um 0. Geht also jetzt $a \rightarrow 0$, so wird daraus die Ableitung von F an der Stelle 0, was gerade die Funktion f an der Stelle 0 ist. Damit ist die Behauptung bewiesen.

- (b) (i) Es ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(x) + \delta(x) f'(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\delta f)'(x) \, dx = \delta f|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

aufgrund der Produktregel und damit die Behauptung.

- (ii) Wähle x_n mit $f(x_n) = 0$, $f'(x_n) \neq 0$ und $\varepsilon \in \mathbb{R}$ mit $x \in [x_n - \varepsilon, x_n + \varepsilon] \setminus \{x_n\}$: $f(x) \neq 0$.

- Fall 1: $f'(x) > 0$

$$\int_{x_n - \varepsilon}^{x_n + \varepsilon} \delta(f(x)) \, dx = \int_{f(x_n - \varepsilon)}^{f(x_n + \varepsilon)} \frac{1}{f'} \delta(f) \, df = \frac{1}{f'(x_n)} = \frac{1}{|f'(x_n)|}$$

- Fall 2: $f'(x) < 0$

$$\int_{x_n - \varepsilon}^{x_n + \varepsilon} \delta(f(x)) \, dx = \int_{f(x_n + \varepsilon)}^{f(x_n - \varepsilon)} \frac{1}{f'} \delta(f) \, df = -\frac{1}{f'(x_n)} = \frac{1}{|f'(x_n)|}$$

Betrachten wir jetzt noch die andere Seite

$$\int_{x_n-\varepsilon}^{x_n+\varepsilon} \frac{\delta(x-x_n)}{|f'(x_n)|} = \frac{1}{|f'(x_n)|}$$

Durch die Linearität des Integrals folgt die Aufteilung von $\mathbb{R}$ in endlich viele solcher Intervalle und damit gilt die Formel auf ganz $\mathbb{R}$.

3. Aufgabe: Fouriertransformation

(a) (i) Setze

$$f(x) = e^{-ax^2/c^2}$$

Dann gilt

$$\mathcal{F}(f(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{-ax^2/c^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx-ax^2/c^2} dx$$

Wir benutzen quadratische Ergänzung, um den Exponenten zu vereinfachen

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\sqrt{a}\frac{x}{c} + \frac{ikc}{2\sqrt{a}}\right)^2 - \frac{k^2c^2}{4a}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2c^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\sqrt{a}\frac{x}{c} + \frac{ikc}{2\sqrt{a}}\right)^2} dx$$

Nun müssen wir nur noch

$$u = \sqrt{a}\frac{x}{c} + \frac{ikc}{2\sqrt{a}} \quad \frac{du}{dx} = \frac{\sqrt{a}}{c}$$

substituieren, um die Formel auf dem Aufgabenblatt anwenden zu können. Man erhält

$$= \frac{c}{\sqrt{2a\pi}} e^{-\frac{k^2c^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} dx = \frac{c}{\sqrt{2a}} e^{-\frac{k^2c^2}{4a}}$$

Damit hat die Fouriertransformierte (bis auf Vorfaktoren) die selbe Form wie die Funktion selbst. Dies ist auch eine Eigenschaft, welche die Gaussche Glockenkurve interessant macht.

(ii) Setze

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & \text{für } |x| \leq a \\ 0 & \text{für } |x| > a \end{cases}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(f) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) \, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^a \frac{e^{-ikx}}{2a} \, dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-ikx}}{-2ika} \Big|_{-a}^a = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2iak} (e^{ika} - e^{-ika}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ak} \sin(ak)\end{aligned}$$

Dies geht für $a \rightarrow 0$ gegen $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Oben wurde schon berechnet, dass für die Funktion f selbst gilt:

$$f \rightarrow \delta \quad \text{für } a \rightarrow 0$$

(b) Wir beweisen die Aussagen:

(i) Sei $f^{(n)}$ integrabel. Es ist

$$\mathcal{F}(f^{(n)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f^{(n)}(x) \, dx$$

Darauf wird jetzt partielle Integration angewandt:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(f^{(n-1)}(x) e^{-ikx} \Big|_{-\infty}^{\infty} + (ik) \int_{-\infty}^{\infty} f^{(n-1)}(x) e^{-ikx} \, dx \right)$$

Damit der erste Summand verschwindet, müssen wir nun noch fordern, dass

$$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

liegt und somit schnell fallend ist. Der hintere Teil ist gerade die Fouriertransformierte von $f^{(n-1)}$. Also

$$\mathcal{F}(f^{(n)}) = ik\mathcal{F}(f^{(n-1)})$$

Da dies für alle n gilt, können wir dies iterativ weiterführen und kommen auf

$$\mathcal{F}(f^{(n)}) = ik\mathcal{F}(f^{(n-1)}) = \dots = (ik)^n \mathcal{F}(f)$$

Analog können wir die Aussage auch für die Fourierreücktransformation beweisen. Dafür Tauschen wir einfach die Rollen von k und $-x$ und von $\tilde{f}$ und f . Wir erhalten

$$\mathcal{F}^\dagger(\tilde{f}^{(n)}(k)) = (-ix)^n f(x)$$

Wenden wir darauf $\mathcal{F}$ an, so erhalten wir

$$\mathcal{F}(\mathcal{F}^\dagger(\tilde{f}^{(n)}(k))) = \tilde{f}^{(n)}(k) = \mathcal{F}((-ix)^n f(x))$$

(ii) Es ist

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(f \circ g) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx} (f(x-y)g(y) \, dy) \, dx \\ &= \sqrt{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \int e^{-ik(x-y)} e^{-iky} f(x-y)g(y) \, dx \, dy\end{aligned}$$

Wir substituieren $x-y = u$, was aufgrund der Translationsinvarianz des Integrals nichts ändert. Man erhält dann

$$= \sqrt{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-iku} f(u) \, du \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-iky} g(y) \, dy = \sqrt{2\pi} \tilde{f}(k) \tilde{g}(k)$$

2. Übung

Aufgabe 1: Wellenpakete

13 Punkte

a) Betrachten Sie ein Wellenpaket der Form

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

mit

$$g(k) = C \exp \left[-\frac{1}{2a^2} (k - k_0)^2 \right], \quad a, C > 0.$$

(i) Bestimmen Sie die Konstante C aus der Normierungsbedingung $\int |g(k)|^2 dk = 1$.

(ii) Berechnen Sie $\Psi(x, t)$.

b) Zeigen Sie, dass sich das Ergebnis aus a) in die Form

$$\Psi(x, t) = \frac{Ca}{\sqrt{1 + i \frac{a^2 \hbar t}{m}}} \exp \left[-\frac{a^2 (x - v_0 t)^2}{2 \left(1 + i \frac{a^2 \hbar t}{m}\right)} \right] \exp [i (k_0 x - \omega_0 t)]$$

mit $v_0 = \hbar k_0 / m$ und $\omega_0 = \hbar k_0^2 / (2m)$ bringen lässt.

c) Berechnen Sie die Erwartungswerte von Ort und Impuls:

$$\langle x \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) \quad \langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t).$$

Notation:

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A \Psi \rangle = \int \Psi^*(x) A \Psi(x) dx, \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

d) Als Maß für die Breite des Gaußschen Wellenpakets definiert man Δx durch

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

und entsprechend Δp . Berechnen Sie Δx und Δp als Funktion der Zeit. Wie verhalten sich $\langle p \rangle$ und Δp als Funktion der Zeit? (Begründung.)

e) Kommentieren Sie das raum-zeitliche Verhalten von $|\Psi(x, t)|^2$.

f) Innerhalb welcher Zeitspanne T verdoppelt sich die bei $t = 0$ vorhandene Breite $(\Delta x)_{t=0}$ in den folgenden Fällen ($\hbar = 10^{-34}$ Js):

(i) Elektron, $(\Delta x)_{t=0} \approx 10^{-8}$ cm, d.h. anfängliche Lokalisierung innerhalb einer dem Atomdurchmesser entsprechenden Strecke ($m_e = 0,9 \times 10^{-27}$ g).

(ii) Elektron, $(\Delta x)_{t=0} \approx 10^{-1}$ cm, vielleicht typisch für die Blendenöffnungen bei Versuchen im Labor.

(iii) Makroskopische Masse $m = 1$ g, $(\Delta x)_{t=0} \approx 1$ cm.

Aufgabe 2: Potentialtöpfe

7 Punkte

Betrachten Sie ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \geq a \\ 0, & |x| \leq a \end{cases} .$$

- a) Betrachten Sie zunächst den Fall $V_0 = \infty$ und bestimmen Sie alle Lösungen der stationären Schrödingergleichung

$$H\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x) = E\Psi(x)$$

mit der Energie $E > 0$. In diesem Fall ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den Bereichen mit $|x| \geq a$ gleich Null.

- b) Betrachten Sie nun den Fall $V_0 < \infty$ und bestimmen Sie die Lösungen der stationären Schrödingergleichung für $0 < E < V_0$.

(i) Stellen Sie die Anschlussbedingungen für $x = \pm a$ auf.

(ii) Lösen Sie die Schrödingergleichung für die Bereiche $(-\infty, -a)$, $(-a, a)$ und (a, ∞) und nutzen Sie die Anschlussbedingungen aus, um die Lösungen geeignet zu verbinden.

Hinweis: Die Anschlussbedingungen führen auf eine Quantisierungsbedingung für die Energie, die sich nicht analytisch auflösen lässt.

4. Aufgabe: Wellenpakete

(a) (i) Es ist

$$\int |g(k)|^2 dk = C^2 \int \exp\left(-\frac{1}{a^2}(k - k_0)^2\right) dk$$

Substituiere

$$\frac{k - k_0}{a} = u \quad \frac{du}{dk} = \frac{1}{a}$$

und wir erhalten

$$= C^2 a \int e^{-u^2} du = C^2 a \sqrt{\pi}$$

Damit dies Eins ergibt muss die Konstante C also

$$C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

betragen.

(ii) Es ist

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int \exp\left(\underbrace{i\left(kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) - \frac{(k - k_0)^2}{2a^2}}_{=-B}\right) dk$$

Betrachten wir zuert B :

$$B = -ikx + i\frac{\hbar k^2 t}{2m} + \frac{k^2}{2a^2} - \frac{kk_0}{a^2} + \frac{k_0^2}{2a^2}$$

Um jetzt quadratische Ergänzung zu machen, wählen wir

$$\alpha = \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m} + \frac{1}{2a^2}} = \frac{1}{a\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{i\hbar t a^2}{m}} =: \frac{1}{a\sqrt{2}} \sqrt{\gamma}$$

und

$$\beta = \frac{aix + \frac{k_0}{a}}{\sqrt{\gamma}} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Dann lässt sich B darstellen mit

$$\begin{aligned} B &= (k\alpha)^2 - 2\alpha\beta k + \beta^2 - \beta^2 + \frac{k_0^2}{2a^2} = (k\alpha - \beta)^2 - \frac{a^2}{2\gamma} \left(ix + \frac{k_0}{a}\right)^2 + \frac{k_0^2}{2a^2} \\ &= (k\alpha - \beta)^2 - \frac{a^2}{2\gamma} \left(-x^2 + 2\frac{ixk_0}{a^2} + \frac{k_0^2}{a^4} - \frac{k_0^2}{a^4} - \frac{k_0^2 i\hbar t}{ma^2}\right) = (k\alpha - \beta)^2 + \frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - 2\frac{ixk_0}{a^2} + \frac{k_0^2 i\hbar t}{ma^2}\right) \end{aligned}$$

Es ist also

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - 2\frac{ixk_0}{a^2} + \frac{k_0^2 i\hbar t}{ma^2}\right)\right) \int \exp(-(k\alpha - \beta)^2) dk \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - 2\frac{ixk_0}{a^2} + \frac{k_0^2 i\hbar t}{ma^2}\right)\right) \sqrt{\pi} = \frac{Ca}{\sqrt{\gamma}} \exp\left(-\frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - 2\frac{ixk_0}{a^2} + \frac{k_0^2 i\hbar t}{ma^2}\right)\right)\end{aligned}$$

(b) Der Vorfaktor ist schon gleich. Betrachten wir also den Exponenten der e -Funktionen:

$$\begin{aligned}&-\frac{a^2(x - v_0 t)^2}{2\gamma} + ik_0 x - i\omega_0 t \\ &= -\frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - \frac{2x\hbar k_0 t}{m} + \frac{\hbar^2 k_0^2 t}{m^2} - \frac{2ik_0 x}{a^2} + \frac{i\hbar k_0^2 t}{ma^2} + \frac{2k_0 x a^2 \hbar t}{a^2 m} - \frac{\hbar k_0^2 t a^2 \hbar t}{m^2 a^2}\right) \\ &= -\frac{a^2}{2\gamma} \left(x^2 - \frac{2ik_0 x}{a^2} + \frac{i\hbar k_0^2 t}{ma^2}\right)\end{aligned}$$

was genau das obige Ergebnis ist.

(c) Zuerst den Erwartungswert von x :

$$\int \psi\psi^* x dx = \frac{C^2 a^2}{\sqrt{1 + \frac{a^4 \hbar^2 t^2}{m^2}}} \int x \exp\left(-\frac{a^2(x - v_0 t)^2}{1 + \frac{a^4 \hbar^2 t^2}{m^2}}\right) dx$$

Der letzte e -Term verschwindet, da er den Betrag Eins hat

$$e^{-i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} = 1$$

und die ersten beiden e -Terme lassen sich zusammenziehen mit

$$\exp\left(-\frac{a^2(x - v_0 t)^2}{2(1 + i\frac{a^2 \hbar t}{m})}\right) \exp\left(-\frac{a^2(x - v_0 t)^2}{2(1 - i\frac{a^2 \hbar t}{m})}\right) = \exp\left(-\frac{a^2(x - v_0 t)^2}{2} \left(\frac{1}{(1 + i\frac{a^2 \hbar t}{m})} + \frac{1}{(1 - i\frac{a^2 \hbar t}{m})}\right)\right)$$

und der Anwendung der dritten binomischen Formel. Setzen wir jetzt noch die Lösung für C von oben ein und setzen

$$\frac{C^2 a^2}{\sqrt{1 + \frac{a^4 \hbar^2 t^2}{m^2}}} = \frac{a}{\sqrt{1 + \frac{a^4 \hbar^2 t^2}{m^2}} \sqrt{\pi}} =: \frac{A}{\sqrt{\pi}}$$

so sehen wir, dass diese Konstante auch im Exponenten wieder auftaucht. Es ist also

$$\int \psi\psi^* x dx = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \int x \exp(-(A(x - v_0 t))^2)$$

Wir substituieren $x - v_0 t = u$ und erhalten

$$= \frac{A}{\sqrt{\pi}} \int (u + v_0 t) \exp(-(Au)^2) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \left[\int u \exp(-(Au)^2) + v_0 t \int e^{-(Au)^2} \right]$$

Aus dem ersten ÜB wissen wir, dass das erste Integral verschwindet (die Formel auf dem Übungsblatt für ein ungerades n - hier $n = 1$ - ergibt Null), während das zweite gerade $\frac{\sqrt{\pi}}{A}$ ergibt. Wir erhalten also

$$\langle x \rangle = v_0 t$$

Für den Erwartungswert von p setzen wir zuerst einmal

$$f(x) = \exp\left(\frac{-a^2 x^2}{2\left(1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}\right)}\right) \quad h(x) = \exp(i(k_0 x - \omega_0 t))$$

Es ist dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) &= h(x) \frac{\partial}{\partial x} f(x - v_0 t) + f(x - v_0 t) \frac{\partial}{\partial x} h(x) = h(x) \frac{\partial}{\partial x} f(x) + f(x - v_0 t) \frac{\partial}{\partial x} h(x) \\ &= f(x - v_0 t) h(x) \left(\underbrace{ik_0}_{=h'} - \underbrace{\frac{a^2(x - v_0 t)}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}}}_{=f'} \right) \end{aligned}$$

Setzen wir dies jetzt zusammen:

$$\langle p \rangle = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{i} \int \exp\left(\frac{-a^2(x - v_0 t)^2}{2\left(1 - \frac{ia^2 \hbar t}{m}\right)}\right) \exp\left(\frac{-a^2(x - v_0 t)^2}{2\left(1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}\right)}\right) \left(ik_0 - \frac{a^2(x - v_0 t)}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}} \right)$$

da

$$\exp(-i(k_0 x - \omega_0 t)) \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) = 1$$

Wir vereinfachen wieder wie vorhin und erhalten

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{A\hbar}{i\sqrt{\pi}} \int \exp(-A^2(x - v_0 t)^2) \left(ik_0 - \frac{a^2(x - v_0 t)}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}} \right) \\ &= \frac{A\hbar}{i\sqrt{\pi}} \underbrace{\int \exp(-A^2(x - v_0 t)^2) ik_0}_{=\frac{\sqrt{\pi}}{A} \text{ (nach ÜB 1)}} - \frac{A\hbar}{i\sqrt{\pi}} \underbrace{\int \exp(-A^2(x - v_0 t)^2) \frac{a^2(x - v_0 t)}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}}}_{=0 \text{ (wie vorhin, setze einfach } x - v_0 t = u)} \\ &= \hbar k_0 = mv_0 \end{aligned}$$

Wir erhalten also die aus der klassischen Mechanik erwarteten Werte für die Erwartungswerte.

(d) Es ist

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \int \exp(-A^2(x - v_0 t)^2) (x - v_0 t)^2$$

mit den analogen Rechnungen zur c. Nun substituieren wir wieder

$$u = A(x - v_0 t) \quad \frac{du}{dx} = A$$

und erhalten

$$= \frac{A}{A^3 \sqrt{\pi}} \int \exp(-u^2) u^2 = \frac{1}{2A^2}$$

wenn wir die Formel auf dem ersten ÜB für $n = 2$ anwenden. Darin setzen wir die Definition von A ein und erhalten:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{2a^2} + \frac{a^2 \hbar^2 t^2}{2m^2} \implies \Delta x = \sqrt{\frac{1}{2a^2} + \frac{a^2 \hbar^2 t^2}{2m^2}}$$

Für den Impuls berechnen wir zuerst einmal $\psi''(x)$. Dazu benutzen wir das Ergebnis für die erste Ableitung von oben. Dann ist

$$\psi''(x) = \left(f(x - v_0 t) h(x) \left(ik_0 - \frac{a^2(x - v_0 t)}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}} \right) \right)'$$

Zur Vereinfachung setze

$$\frac{a^2}{1 + \frac{ia^2 \hbar t}{m}} =: D$$

und dann

$$\begin{aligned} \psi''(x) &= -D(x - v_0 t) f(x - v_0 t) h(x) (ik_0 - D(x - v_0 t)) \\ &+ f(x - v_0 t) ik_0 h(x) (ik_0 - D(x - v_0 t)) + f(x - v_0 t) h(x) D \end{aligned}$$

Durch zweimaliges Anwenden der Produktregel. Dies lässt sich Vereinfachen und Ordnen zu

$$= f(x - v_0 t) h(x) (-2ik_0 D(x - v_0 t) + D^2(x - v_0 t)^2 - k_0^2)$$

und dann ist dies insgesamt

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi^* \psi'' dx = -\hbar^2 \frac{A}{\sqrt{\pi}} \int \exp(-A^2(x - v_0 t)^2) (-2ik_0 D(x - v_0 t) + D^2(x - v_0 t)^2 - k_0^2)$$

Wir substituieren einmal wieder $A(x - v_0t) = u$ und erhalten Terme der Art

$$\int e^{-u^2} u^n$$

Für ungerade n verschwinden diese (nach ÜB 1). Für gerade n wenden wir wieder die gleichen Formeln an, wie oben schon beschrieben und erhalten

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \frac{A}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{D^2}{2A^3} \sqrt{\pi} - \frac{k_0^2}{A} \sqrt{\pi} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{D^2}{2A^2} - \left(\frac{mv_0}{\hbar} \right)^2 \right) = -\frac{\hbar^2 D^2}{2A^2} + (mv_0)^2$$

Vor allem ist also

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = - \left(\frac{\hbar D}{A\sqrt{2}} \right)^2 \implies \Delta p = i \frac{\hbar D}{A\sqrt{2}}$$

Setzen wir jetzt noch die Definitionen von A und D ein, so erhalten wir

$$\Delta p = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \left(\frac{a^2}{1 + \frac{ia^2\hbar t}{m}} \frac{\sqrt{(1 + \frac{ia^2\hbar t}{m})(1 - \frac{ia^2\hbar t}{m})}}{a} \right) = \frac{i\hbar a}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1 - \frac{ia^2\hbar t}{m}}{1 + \frac{ia^2\hbar t}{m}}}$$

Das bedeutet, dass der Erwartungswert von p zwar gleich bleibt (im Verlauf der Zeit) die Varianz aber immer weiter steigt und sich ihrem Maximum nähert. Vor allem ist

$$\Delta x \Delta p = \frac{i\hbar}{2} + \frac{a^2 \hbar^2}{2m} t$$

eine steigende Funktion mit der Zeit und ihr Minimum wird bei $t = 0$ erreicht. Das bedeutet, die Unschärfe steigt immer weiter - das Wellenpaket verwischt.

(e) Wie schon des öfteren in den oberen Aufgaben berechnet, ist

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi(x)\psi^*(x) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \exp(-A^2(x - v_0t)^2)$$

Durch die oben gemachten Beobachtungen können wir sagen: Wenn wir uns ψ^2 als Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Wellenpaketes vorstellen, so wird diese immer undefinierter. Der Mittelpunkt von Geschwindigkeit p und Ort x ist zwar immer klar definiert (also der Erwartungswert) aber es gibt eine immer größer werdende Varianz im Ort. Bei großen Zeiten sind die Grenzen des Wellenpaketes weder im Orts- noch im Impulsraum noch klar zu ziehen.

(f) Aus der Formel in der d erhalten wir zuerst einmal

$$a^2 = \frac{1}{2\Delta x(0)^2}$$

und dann aus

$$4\Delta x(0)^2 = \Delta x(t)^2$$

eine Formel für t mit

$$t = \sqrt{12}\Delta x(0)^2 \frac{m}{\hbar}$$

Mit den gegebenen Zahlenwerten erhält man

(i) $t \approx 3.118 \cdot 10^{-16}$ s

(ii) $t \approx 3.118 \cdot 10^{-2}$ s

(iii) $t \approx 3.46 \cdot 10^{27}$ s

was klar macht, weshalb wir diesen Effekt im makroskopischen Leben nicht vorfinden.

5. Aufgabe: Potentialtöpfe

In der ganzen Aufgabe legen wir das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \geq a \\ 0 & |x| \leq a \end{cases}$$

zu Grunde.

(a) Wir betrachten zuerst einen unendlich tiefen Potentialtopf, also

$$V_0 = \infty$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich $|x| \geq a$ muss deshalb konstant 0 sein.

Vor allem muss also

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0$$

gelten. Wir machen (im Bereich $|x| \leq a$) den Ansatz

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

mit noch zu bestimmenden Konstanten k und A . Wir erhalten zuerst einmal

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

und damit

$$k^2 = \frac{2Em}{\hbar^2} \implies k_{1/2} = \pm \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} =: \pm k$$

Wir haben also jetzt den Ansatz

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

Nun müssen wir noch die Randbedingungen beachten. Diese führen auf

$$\psi(-a) = Ae^{-ika} + A'e^{ika} = 0 \quad \psi(a) = Ae^{ika} + A'e^{-ika} = 0$$

Wir addieren diese beiden Gleichungen zuerst und erhalten:

$$A(e^{ika} + e^{-ika}) + A'(e^{ika} + e^{-ika}) = 2A \cos(ka) + 2A' \cos(ka) = 0$$

Dies führt auf $A = -A'$ und damit auf den Wellenansatz

$$\psi(x) = Ae^{ikx} - Ae^{-ikx} = 2Ai \sin(kx)$$

Damit jetzt $\psi(a) = \psi(-a) = 0$ gilt, muss also

$$ka = n\pi \quad n = 0, 1, \dots$$

gelten. Dies führt auf die Quantisierungsbedingung für die Energie

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Was wir die ganze Zeit nicht beachtet haben, ist die Tatsache, dass die Gleichung

$$2A \cos(ka) + 2A' \cos(ka) = 0$$

auch mit $\cos(ka) = 0$ eine Lösung hätte. Wir machen also einen anderen Ansatz und subtrahieren diesmal die Gleichungen

$$\psi(-a) = Ae^{-ika} + A'e^{ika} = 0 \quad \psi(a) = Ae^{ika} + A'e^{-ika} = 0$$

Dies führt uns auf

$$A(e^{ika} - e^{-ika}) + A'(e^{-ika} - e^{ika}) = 2iA \sin(ka) - 2iA' \sin(ka) = 0$$

Diesmal ist sicher $\sin(ka) \neq 0$, weil wir sonst wieder Fall 1 erhalten würden. Wir folgern also

$$A = A'$$

und dann analog wie oben

$$ka = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \quad n = 0, 1, \dots$$

um die Randbedingungen zu erfüllen. Dies führt dann auf die quantisierte Energie von

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

Wir haben also zwei Typen von Lösungen. Einmal für die Energien

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

die Lösung

$$\psi(x) = 2Ai \sin(kx) = 2Ai \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

und für die andere Energie

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

die Lösung

$$\psi(x) = 2A \cos(kx) = 2A \cos\left(\frac{\pi}{a} \left(n + \frac{1}{2} \right) x\right)$$

Nun müssen wir noch die Konstanten A durch Normierung bestimmen. Es muss gelten

$$\int \psi(x)\psi^*(x) dx = 1$$

Dies ist im ersten Fall

$$\psi(x) = 2Ai \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

erhalten wir hier

$$\int_{-a}^a \psi(x)\psi^*(x) dx = 4A^2 a \implies A = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

(aufgrund der Periodizität). Analog erhält man auch im anderen Fall

$$B = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

- (b) (i) Die Anschlussbedingung ergibt sich aus der Stetigkeit von ψ und von $\partial_x \psi$ an den Bruchstellen. Also

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \quad \psi_2(a) = \psi_3(a) \quad \psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

- (ii) Wir setzen drei verschiedene Wellenfunktionen für die drei Bereiche an:

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 & \text{für } x < -a \\ \psi_2 & \text{für } -a < x < a \\ \psi_3 & \text{für } x > a \end{cases}$$

Für den mittleren Bereich wurde der Ansatz schon in der (a) ausgeführt. Deshalb setzen wir gleich an

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$

mit

$$k_2 = \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}$$

Für die beiden Randbereiche können wir zum Glück den selben Ansatz benutzen, wenn wir einfach E durch $E - V_0$ ersetzen. Dann erhalten wir

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

mit

$$k_1 = \frac{\sqrt{2(E - V_0)m}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2(V_0 - E)m}}{\hbar}$$

und

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}$$

mit

$$k_3 = i \frac{\sqrt{2(V_0 - E)m}}{\hbar}$$

Wir haben also im Moment

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \exp \left[-\sqrt{2(V_0 - E)m} \frac{x}{\hbar} \right] + A_1' \exp \left[\sqrt{2(V_0 - E)m} \frac{x}{\hbar} \right] & \text{für } x < -a \\ A_2 \exp \left[i\sqrt{2Em} \frac{x}{\hbar} \right] + A_2' \exp \left[-i\sqrt{2Em} \frac{x}{\hbar} \right] & \text{für } -a < x < a \\ A_3 \exp \left[-\sqrt{2(V_0 - E)m} \frac{x}{\hbar} \right] + A_3' \exp \left[\sqrt{2(V_0 - E)m} \frac{x}{\hbar} \right] & \text{für } x > a \end{cases}$$

Um die Koeffizienten A_i, A_i' zu bestimmen, betrachten wir die Randbedingungen.

Zum einen muss ψ für $x \rightarrow \pm\infty$ verschwinden, also folgt

$$A_1 = A_3 = 0$$

Die restlichen Gleichungen ergeben sich aus den Randbedingungen aus der (i).

Wir setzen

$$k = \sqrt{2(V_0 - E)m} \frac{1}{\hbar} \quad \tilde{k} = \sqrt{2Em} \frac{1}{\hbar}$$

also

$$\begin{aligned} A_1' e^{-ka} &= A_2 e^{-i\tilde{k}a} + A_2' e^{i\tilde{k}a} \\ A_3 e^{-ka} &= A_2 e^{i\tilde{k}a} + A_2' e^{-i\tilde{k}a} \\ k A_1' e^{-ka} &= i\tilde{k} A_2 e^{-i\tilde{k}a} - i\tilde{k} A_2' e^{i\tilde{k}a} \\ -k A_3' e^{-ka} &= i\tilde{k} A_2 e^{i\tilde{k}a} - i\tilde{k} A_2' e^{-i\tilde{k}a} \end{aligned}$$

Man kann hier noch die zum System gehörende Matrix

$$M = \begin{pmatrix} e^{-ak} & -e^{-ia\tilde{k}} & -e^{ia\tilde{k}} & 0 \\ 0 & -e^{ia\tilde{k}} & -e^{-ia\tilde{k}} & e^{-ak} \\ e^{-ak}k & -ie^{-ia\tilde{k}}\tilde{k} & ie^{ia\tilde{k}}\tilde{k} & 0 \\ 0 & -ie^{ia\tilde{k}}\tilde{k} & ie^{-ia\tilde{k}}\tilde{k} & -e^{-ak}k \end{pmatrix}$$

aufstellen und die Determinante

$$\det M = e^{-2a(k+i\tilde{k})} \left((-1 + e^{4ia\tilde{k}}) k^2 + 2i (1 + e^{4ia\tilde{k}}) k\tilde{k} - (-1 + e^{4ia\tilde{k}}) \tilde{k}^2 \right)$$

berechnen, aber dies führt (siehe auch Aufgabenblatt) auf ein transzendentes Gleichungssystem.

3. Übung

Aufgabe 1: Potentialbarrieren

10 Punkte

Betrachten Sie ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} .$$

Betrachten Sie den Fall $V_0 > 0$ und bestimmen Sie die Lösungen der stationären Schrödingergleichung mit der Energie $0 < E < V_0$. Nehmen Sie an, dass die Welle von links einläuft.

- Lösen Sie die stationäre Schrödingergleichung für die verschiedenen Bereiche.
- Stellen Sie die Anschlussbedingungen auf.
- Lösen Sie die Anschlussbedingungen auf und berechnen Sie Transmissions- und Reflexionskoeffizienten T und R .
- Zeigen Sie, dass

$$T + R = 1$$

ist.

- Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem klassischen Fall.

Aufgabe 2: δ -Potential

6 Punkte

Betrachten Sie ein Potential der Form

$$V(x) = V_0 \delta(x), V_0 > 0 .$$

- In diesem Problem ist die Wellenfunktion stetig, die erste Ableitung ist jedoch nicht stetig. Berechnen Sie den Sprung der ersten Ableitung der Wellenfunktion, indem Sie die Schrödingergleichung von $-\epsilon$ bis ϵ integrieren und den Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ durchführen.
- Berechnen Sie die Lösungen der stationären Schrödingergleichung mit Energie $E > 0$. Nehmen Sie hierbei an, dass die Welle von links einläuft.

Aufgabe 3: Hermitesche Operatoren

4 Punkte

In der Quantenmechanik treten aufgrund des Superpositionsprinzips nur lineare Operatoren auf. Lineare Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ sind Abbildungen

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

mit den Eigenschaften

$$A(\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \lambda_1 A\Psi_1 + \lambda_2 A\Psi_2, \quad \Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{H}, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} .$$

Lineare Operatoren lassen sich auf endlich-dimensionalen Räumen durch Matrizen darstellen. Von besonderer Bedeutung sind hermitesche Operatoren. Dies sind lineare Operatoren, die zusätzlich die Bedingung

$$\langle \Psi_1, A\Psi_2 \rangle = \langle A\Psi_1, \Psi_2 \rangle \quad \forall \Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{H}$$

(bitte wenden)

erfüllen. Die hermitesche Konjugation ($\dagger$) eines linearen Operators A wird definiert über

$$\langle \Psi_1, A\Psi_2 \rangle = \langle A^\dagger \Psi_1, \Psi_2 \rangle \quad \forall \Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{H}.$$

Zeigen Sie

- a) Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell.
- b) Für die Matrizen­darstellung in endlich-dimensionalen Räumen gilt $A^\dagger = (A^*)^T$
- c) Kommutieren zwei Operatoren A, B , d.h. $[A, B] = AB - BA = 0$, dann lassen sie sich gleichzeitig diagonalisieren.

6. Aufgabe: Potentialbarrieren

(a) Die Schrödingergleichung liefert

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V) \right] \psi(x) = 0$$

Wir setzen in den drei Bereichen an:

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx} & x < -a \\ A_2 e^{\tilde{k}x} + A'_2 e^{-\tilde{k}x} & -a < x < a \\ A_3 e^{ikx} + A'_3 e^{-ikx} & a < x \end{cases}$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \tilde{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

was aus der Schrödingergleichung direkt folgt (siehe auch Vorlesung oder letztes Übungsblatt).

Da die Welle von links einläuft setzen wir zuerst einmal $A'_3 = 0$.

(b) Die Anschlussbedingungen sind, dass sowohl ψ also auch seine Ableitung an den Grenzstellen $x = \pm a$ stetig sein müssen, also

$$\begin{aligned} A_1 e^{-ika} + A'_1 e^{ika} &= A_2 e^{-\tilde{k}a} + A'_2 e^{\tilde{k}a} \\ A_2 e^{\tilde{k}a} + A'_2 e^{-\tilde{k}a} &= A_3 e^{ika} \\ ikA_1 e^{-ika} - ikA'_1 e^{ika} &= \tilde{k}A_2 e^{-\tilde{k}a} - \tilde{k}A'_2 e^{\tilde{k}a} \\ \tilde{k}A_2 e^{\tilde{k}a} - \tilde{k}A'_2 e^{-\tilde{k}a} &= ikA_3 e^{ika} \end{aligned}$$

Da wir wieder frei in der Wahl einer Normalisierung sind (homogene Gleichung) setzen wir $A_1 = 1$ und erhalten dann

$$\begin{aligned} e^{-ika} + A'_1 e^{ika} &= A_2 e^{-\tilde{k}a} + A'_2 e^{\tilde{k}a} \\ A_2 e^{\tilde{k}a} + A'_2 e^{-\tilde{k}a} &= A_3 e^{ika} \\ ik e^{-ika} - ik A'_1 e^{ika} &= \tilde{k} A_2 e^{-\tilde{k}a} - \tilde{k} A'_2 e^{\tilde{k}a} \\ \tilde{k} A_2 e^{\tilde{k}a} - \tilde{k} A'_2 e^{-\tilde{k}a} &= ik A_3 e^{ika} \end{aligned}$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem, welches sich auch in einer Matrix schreiben

lässt:

$$\begin{pmatrix} e^{ika} & -e^{-\tilde{k}a} & -e^{\tilde{k}a} & 0 & -e^{-ika} \\ 0 & e^{\tilde{k}a} & e^{-\tilde{k}a} & -e^{ika} & 0 \\ -ike^{ika} & -\tilde{k}e^{-\tilde{k}a} & \tilde{k}e^{\tilde{k}a} & 0 & -ike^{-ika} \\ 0 & \tilde{k}e^{\tilde{k}a} & -\tilde{k}e^{-\tilde{k}a} & -ike^{ika} & 0 \end{pmatrix}$$

Dieses lässt sich jetzt durch ein einfaches Gauß-Verfahren lösen, was hier nicht weiter aufgezeigt werden soll. Die Lösung ist

$$\begin{aligned} A'_1 &= \frac{e^{-2iak} (-1 + e^{4a\tilde{k}}) (k^2 + \tilde{k}^2)}{(-1 + e^{4a\tilde{k}}) k^2 + 2i (1 + e^{4a\tilde{k}}) k\tilde{k} - (-1 + e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^2} \\ A_2 &= -\frac{2e^{a(-ik+\tilde{k})} k(k - i\tilde{k})}{(-1 + e^{4a\tilde{k}}) k^2 + 2i (1 + e^{4a\tilde{k}}) k\tilde{k} - (-1 + e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^2} \\ A'_2 &= \frac{2e^{-iak+3a\tilde{k}} k(k + i\tilde{k})}{(-1 + e^{4a\tilde{k}}) k^2 + 2i (1 + e^{4a\tilde{k}}) k\tilde{k} - (-1 + e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^2} \\ A_3 &= \frac{4ie^{2a(-ik+\tilde{k})} k\tilde{k}}{(-1 + e^{4a\tilde{k}}) k^2 + 2i (1 + e^{4a\tilde{k}}) k\tilde{k} - (-1 + e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^2} \end{aligned}$$

Die Koeffizienten sind dann gerade

$$R = |A'_1|^2 \quad T = |A_3|^2$$

Diese möchten wir jetzt berechnen:

$$|A'_1|^2 = \frac{(e^{4a\tilde{k}} - 1)^2 (k^2 + \tilde{k}^2)^2}{(e^{4a\tilde{k}} - 1)^2 (k^2 - \tilde{k}^2)^2 + 4 (e^{4a\tilde{k}} + 1)^2 k^2 \tilde{k}^2}$$

Unten steht dann ausmultipliziert:

$$(e^{4a\tilde{k}})^2 k^4 + 2 (e^{4a\tilde{k}})^2 k^2 \tilde{k}^2 + (e^{4a\tilde{k}})^2 \tilde{k}^4 - 2 (e^{4a\tilde{k}}) k^4 + 12 (e^{4a\tilde{k}}) k^2 \tilde{k}^2 - 2 (e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^4 + k^4 + 2k^2 \tilde{k}^2 + \tilde{k}^4$$

und oben

$$(e^{4a\tilde{k}})^2 k^4 + 2 (e^{4a\tilde{k}})^2 k^2 \tilde{k}^2 + (e^{4a\tilde{k}})^2 \tilde{k}^4 - 2 (e^{4a\tilde{k}}) k^4 - 4 (e^{4a\tilde{k}}) k^2 \tilde{k}^2 - 2 (e^{4a\tilde{k}}) \tilde{k}^4 + k^4 + 2k^2 \tilde{k}^2 + \tilde{k}^4$$

Für T gilt im Nenner der gleiche Ausdruck. Im Zähler stattdessen

$$|4ie^{2a(-ik+\tilde{k})} k\tilde{k}|^2 = 16 (e^{4a\tilde{k}}) k^2 \tilde{k}^2$$

- (c) Betrachtet man die beiden Ergebnisse aus der Teilaufgabe vorher, so sieht man schnell, dass die beiden Zähler addiert gerade den Nenner ergeben (die -4 wird mit der +16 zur +12). Deshalb kürzt sich der ganze Ausdruck und man erhält

$$R + T = 1$$

- (d) Im klassischen Fall wäre der Bereich des Potentials und noch spezieller der rechte Teilbereich verboten. Das Teilchen hätte nicht die Energie, um über die Barriere zu kommen und würde totalreflektiert. Hier ist der Transmissionskoeffizient jedoch nicht Null (und R auch nicht 1). Es gibt also auch eine Wahrscheinlichkeit, das Teilchen nach der Barriere zu messen!

7. Aufgabe: δ -Potential

- (a) Wir benutzen die Schrödingergleichung in der Form

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\phi(x)$$

Wir integrieren diese Differentialgleichung auf beiden Seiten von $-\varepsilon$ bis ε und erhalten auf der rechten Seite:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (V_0\delta(x) - E)\phi(x) dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0\phi(x)\delta(x) dx - \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\phi(x) dx$$

Da E beschränkt ist, geht der zweite Summand im Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen 0. Für den ersten Summanden gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0\phi(x)\delta(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2m}{\hbar^2} V_0\phi(0) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0\phi(0)$$

nach den Eigenschaften der Deltadistribution. Für den linken Teil der Gleichung gilt hingegen

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) dx = \frac{d}{dx}\phi(\varepsilon) - \frac{d}{dx}\phi(-\varepsilon)$$

Im Grenzübergang für $\varepsilon \rightarrow 0$ müssen die beiden Ergebnisse jedoch gleich sein. Deshalb macht die Ableitung an der Stelle $x = 0$ einen Sprung von

$$\phi'(x)_+ - \phi'(x)_- = \frac{2m}{\hbar^2} V_0\phi(0)$$

(b) Der Bereich ist in zwei Teilbereiche aufgespalten. Wir wählen den Ansatz

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 & x < 0 \\ \psi_2 & x > 0 \end{cases} = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx} & x < 0 \\ A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, da wir die Lösung für die Schrödingergleichung mit Potential $V = 0$ (was in diesen beiden Bereichen gelten muss) schon kennen. Dann muss ψ an der Stelle $x = 0$ stetig sein und die Ableitung muss den oben berechneten Sprung aufzeigen. Berechnen wir zuerst einmal die Ableitung

$$\psi' = \begin{cases} ikA_1 e^{ikx} - ikA'_1 e^{-ikx} & x < 0 \\ ikA_2 e^{ikx} - ikA'_2 e^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$$

Nun zu den einzelnen Bedingungen:

$$\phi \text{ stetig für } x = 0 : \psi_1(0) = \psi_2(0) = A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$$

$$\phi' \text{ springt für } x = 0 : \psi'_2(0) - \psi'_1(0) = ikA_2 - ikA'_2 - ikA_1 + ikA'_1 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \phi(0)$$

Da die Welle nur von links kommen soll, setzen wir $A'_2 = 0$. Außerdem können wir die Normierung frei wählen, weshalb wir zur Vereinfachung $A_1 = 1$ wählen. Man erhält dann die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} 1 + A'_1 &= A_2 \\ ikA_2 - ik + ikA'_1 &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi(0) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 A_2 \end{aligned}$$

Wir setzen die erste Gleichung in die zweite Gleichung ein und erhalten:

$$(1 + A'_1) - 1 + A'_1 = \frac{2m}{ik\hbar^2} V_0 (1 + A'_1) \implies 2A'_1 = \frac{2m}{ik\hbar^2} V_0 + A'_1 \frac{2m}{ik\hbar^2} V_0$$

und daraus die Lösung für A'_1 mit

$$A'_1 = \frac{mV_0}{ik\hbar^2} \frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar^2}} = \frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar^2}} - 1$$

Für A_2 erhält man dann durch Einsetzen

$$A_2 = 1 + A'_1 = \frac{1}{1 - \frac{mV_0}{ik\hbar^2}}$$

8. Aufgabe: Hermitesche Operatoren

- (a) Sei A ein hermitescher Operator. Und λ ein Eigenwert von A mit dem dazugehörigen Eigenvektor ψ , also

$$A\psi = \lambda\psi$$

Dann ist vor allem

$$\lambda\langle\psi, \psi\rangle = \langle\psi, \lambda\psi\rangle = \langle\psi, A\psi\rangle = \langle A\psi, \psi\rangle = \langle\lambda\psi, \psi\rangle = \bar{\lambda}\langle\psi, \psi\rangle$$

Dies ist aber nur möglich für $\lambda = \bar{\lambda}$, also λ reell (da der Vektor ψ als EV ungleich Null sein muss).

- (b) Sei A ein linearer Operator auf einem endlich-dimensionalen Vektorraum $\mathcal{H}$. Sei außerdem $\{u_i\}$ eine Basis auf diesem Raum. Dann lässt sich das Matrixelement von $A^\dagger$ an der Stelle (i, j) angeben mit

$$A_{(i,j)}^\dagger = \langle u_i, A^\dagger u_j \rangle$$

Dies lässt sich jedoch mit den Eigenschaften des Skalarproduktes und der adjungierten Operatoren umformen in

$$A_{(i,j)}^\dagger = \langle u_i, A^\dagger u_j \rangle = \overline{\langle A^\dagger u_j, u_i \rangle} = \overline{\langle u_j, Au_i \rangle}$$

nach Definition ist dies aber das komplex konjugierte (j, i) -te Matrixelement von A , also kurz

$$A^\dagger = (A^*)^T$$

- (c) *Behauptung:* Kommutierende Operatoren lassen sich gleichzeitig diagonalisieren.

$$A\Psi_a = a\Psi_a \quad B\Psi_b = b\Psi_b$$

Dann gilt

$$AB\Psi_a = BA\Psi_a = Ba\Psi_a = aB\Psi_a$$

das heißt $B\Psi_a$ ist ebenfalls Eigenzustand zu A zum gleichen Eigenwert.

4. Übung

Aufgabe 1: Reflexion eines Wellenpakets

4 Punkte

- a) Ebene Wellen (mit Energie $E = k^2 \hbar^2 / (2m)$, $E < V_0$) erfahren bei Reflexion an einer Potentialstufe der Höhe V_0 , also an dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases},$$

einen Phasensprung um 2ϕ . Die Lösung der Schrödingergleichung hat also für $x < 0$ die Form

$$\Psi_-(x) = e^{ikx} + e^{-2i\phi} e^{-ikx}.$$

Berechnen Sie ϕ als Funktion von m , V_0 und k . Lösen Sie hierzu wie gewohnt die Schrödingergleichung, indem Sie die Anschlussbedingungen bei $x = 0$ ausnutzen.

- b) Ein Wellenpaket mit Verteilung $g(k)$ (Maximum bei k_0 mit $k_0^2 \hbar^2 / (2m) < V_0$, lokalisiert um k_0) wird an derselben Stufe reflektiert. Das reflektierte Wellenpaket hat eine Zeitverzögerung von δt gegenüber dem entsprechenden klassischen Teilchen.

Betrachten Sie die Fourierdarstellung des Wellenpakets (vgl. Aufgabe 1a) Blatt 2, die Funktion $g(k)$ muss nicht explizit eingesetzt werden) jeweils vor und nach der Reflexion. Entwickeln Sie das Argument der Exponentialfunktion bis zur ersten Ordnung in k um k_0 . Der k -abhängige Teil der Exponentialfunktion des Wellenpakets lässt sich auf die Form $\exp(i(k - k_0)(x - x_0))$ bringen. Bestimmen Sie den Ort des Maximums der Wellenfunktion x_0 vor und nach der Reflexion. Durch Vergleich der Ergebnisse für x_0 lässt sich die Zeitverzögerung bestimmen.

Aufgabe 2: Fourier-Entwicklung

4 Punkte

Die trigonometrischen Funktionen

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\cos nx}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin nx}{\sqrt{\pi}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

bilden auf dem Intervall $[-\pi, \pi]$ ein orthonormales Funktionensystem. Dieses System ist vollständig, so dass für alle (quadratintegrablen) Funktionen $f(x)$ die zugehörige Fourier-Reihe im Mittel gegen $f(x)$ konvergiert:

$$f_N(x) = a_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{n=1}^N \left(a_n \frac{\cos nx}{\sqrt{\pi}} + b_n \frac{\sin nx}{\sqrt{\pi}} \right) \rightarrow f(x) \quad \text{für } N \rightarrow \infty.$$

Die Fourierkoeffizienten berechnen sich dabei durch

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x), \quad a_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \cos nx, \quad b_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \sin nx.$$

- a) Zeigen Sie, dass für gerade Funktionen (bzw. ungerade Funktionen) die Koeffizienten b_n (bzw. a_n) verschwinden.

- b) Bestimmen Sie die Fourierkoeffizienten für die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} \sin(2x) & -\pi \leq x \leq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

(bitte wenden)

c) Führen Sie außerdem die Fourieranalyse durch für die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} \pi + x & -\pi \leq x \leq 0 \\ \pi - x & 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$$

Aufgabe 3: Orthonormalsysteme

6 Punkte

Der Zustandsraum für ein physikalisches System sei durch die Orthonormalbasis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ aufgespannt. Die Vektoren $|\Psi_1\rangle$ und $|\Psi_2\rangle$ seien gegeben durch:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{i}{2}|2\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|3\rangle \\ |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|1\rangle + \frac{-i}{\sqrt{3}}|3\rangle \end{aligned}$$

- Normieren Sie $|\Psi_1\rangle$ und $|\Psi_2\rangle$. Suchen Sie einen Vektor $|\Psi_3\rangle$ derart, dass $\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle\}$ eine Orthonormalbasis bildet.
- Berechnen Sie die Matrizen, die in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ die Projektoren auf $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ bzw. $|\Psi_3\rangle$ darstellen und zeigen Sie, dass diese Matrizen hermitesch sind. Überprüfen Sie die Vollständigkeit $\sum_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| = 1$.

Aufgabe 4: Eigenwerte, -funktionen und Projektoren

6 Punkte

In einem dreidimensionalen Vektorraum sei $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ eine Orthonormalbasis, bezüglich derer der Operator L_y die folgende Matrixdarstellung besitze:

$$L_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

- Ist L_y hermitesch? Berechnen Sie die Eigenwerte und die zugehörigen (normierten) Eigenvektoren bezüglich obiger Basis.
- Berechnen Sie den Projektor auf die Eigenvektoren. Prüfen Sie die Orthogonalität und die Vollständigkeit.

9. Aufgabe: Reflexion eines Wellenpakets

(a) Wie schon des Öfteren gesehen, setzen wir für die beiden Bereiche an:

$$\psi_- = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-2i\phi} e^{-ikx} \quad \psi_+ = A_2 e^{\rho x} + A'_2 e^{-\rho x}$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}$$

Zur Normierung setzen wir $A_2 = 0$ (damit die Lösung für $x \rightarrow \infty$ verschwindet) und $A_1 = 1$. Die Anschlussbedingungen liefern dann die Stetigkeit der Wellenfunktion

$$\psi_-(0) = \psi_+(0) \implies 1 + A'_1 e^{-2i\phi} = A'_2$$

und deren Ableitung

$$\psi'_-(0) = \psi'_+(0) \implies ik - ikA'_1 e^{-2i\phi} = -\rho A'_2$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit ik und addieren sie zur zweiten Gleichung. Man erhält

$$2ik = ikA'_2 - \rho A'_2 \implies A'_2 = \frac{2ik}{ik - \rho} = \frac{2k}{k + i\rho}$$

und damit in der ersten Gleichung

$$1 + A'_1 e^{-2i\phi} = \frac{2k}{k + i\rho} \implies A'_1 e^{-2i\phi} = \frac{2k}{k + i\rho} - 1 = \frac{k - i\rho}{k + i\rho}$$

Wir sehen hier, dass die Konstante A'_1 den Betrag Eins haben muss. Da der Faktor $e^{-2i\phi}$ schon für "den Winkel" verantwortlich ist, wählen wir einfach $A'_1 = 1$. Wir haben dann

$$e^{-2i\phi} = \frac{k - i\rho}{k + i\rho} \implies \tan \phi = \frac{\rho}{k} = \sqrt{\frac{2mV_0}{k^2 \hbar^2} - 1}$$

(b) Wir benutzen

$$\psi = \int g(k) \exp(ikt - i\omega(k)t) dk$$

und berechnen jeweils den Exponenten.

Für den reflektierten Teil haben wir

$$\int g(k) A_1'(k) \exp(-ikx - i\omega(k)t) dk = \int g(k) \exp(-ikx - 2i\phi - i\omega(k)t) dk$$

$$-2i\phi - i\omega(k)t = -\omega(k)(t + \delta t)$$

$$\delta(t) = \frac{2\phi}{\omega(k)}$$

$$\phi = \arctan\left(\frac{\rho}{k}\right) \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$k = k_0 : \omega(k) + 2\phi(k) = \omega(k_0) + \partial_k \omega(k_0)(k - k_0) + 2\phi(k_0)$$

Now look at the reflected Wave:

$$\int g(k) \exp(-2i\phi(k_0)) \exp(-i\omega(k_0)t - ik_0x) \exp(-i(\partial_k \omega(k_0) + 2\partial_k \phi(k_0))(k - k_0)) dk$$

$$\text{Delay for } k \text{ takes } k_0 \implies -\frac{2\partial_k \phi(k_0)}{\partial_k \omega(k_0)} = \delta t = -\frac{1}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_0^2}}$$

For a classical wave: $A_1 + A_1' = 0 \implies A_1' = -A_1$ because no partical on the right side, no phase.

Nils Man erhält für die einlaufende Welle einen Ausdruck der Form

$$i(k - k_0) \left(x - \frac{k_0 \hbar t}{m} \right)$$

wobei der k -unabhängige Teil weggelassen wurde. Für den reflektierten Teil (wieder nur k -abhängig) erhält man

$$-i(k - k_0) \left(x - \left(\frac{2}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_0^2}} - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right) \right)$$

Wie man sieht, hinkt die reflektierte Welle etwas hinterher. Sie wird erst wieder für δt Null, mit

$$\delta t = \frac{2}{k_0} \frac{1}{\sqrt{2V_0 - \frac{\hbar^2 k_0^2}{m}}}$$

10. Aufgabe: Fourier-Entwicklung

(a) **Phil:**

Use

$$\cos(nx) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l)!} n^{2l} x^{2l} \quad \sin(nx) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} n^{2l+1} x^{2l+1}$$

Odd function, $m \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} \sqrt{\pi} \cdot a_n &= \int_{-\pi}^{\pi} x^{2m+1} \cos(nx) \, dx \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} x^{2m+1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l)!} n^{2l} x^{2l} \, dx \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l)!} n^{2l} \int_{-\pi}^{\pi} x^{2(m+l)+1} \, dx \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l)!} n^{2l} \frac{1}{2(m+l+1)} x^{2(m+l+1)} \Big|_{-\pi}^{\pi} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Even Function, $m \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \sqrt{\pi} \cdot b_n &= \int_{-\pi}^{\pi} x^{2m} \sin(nx) \, dx \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} x^{2m} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} n^{2l+1} x^{2l+1} \, dx \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} n^{2l+1} \int_{-\pi}^{\pi} x^{2l+1+2m} \, dx \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} n^{2l+1} \int_{-\pi}^{\pi} x^{2l+1+2m} \, dx \frac{1}{2(m+l+1)} x^{2(m+l+1)} \Big|_{-\pi}^{\pi} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Nils:

Sei also f eine gerade Funktion, also

$$f(x) = f(-x)$$

für alle $x \in [-\pi, \pi]$. Nach der Linearität des Integrales ist

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(nx) \, dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 f(x) \sin(nx) \, dx + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx) \, dx$$

Im ersten Integral substituieren wir $-x$ mit u und erhalten:

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^0 f(-u) \sin(-nu) \, du + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx) \, dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^0 f(u) \sin(nu) \, du + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx) \, dx \end{aligned}$$

da f gerade und $\sin$ ungerade. Dies ist aber gleich Null (da sich beim Tauschen der Integralgrenzen das Vorzeichen ändert).

Für eine ungerade Funktion gilt analog $f(x) = -f(-x)$ und da der Cosinus eine gerade Funktion ist, verschwinden diesmal alle a_n (durch analoge Rechnung).

(b)

$$f(x) = \begin{cases} \sin(2x) & -\pi \leq x \leq 0 \\ 0 & x \geq 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{2\pi}a_0 &= \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx \\ &= \int_{-\pi}^0 \sin(2x) \, dx \\ &\stackrel{u=2x}{=} \int_{-2\pi}^0 \frac{1}{2} \sin(u) \, du \\ &= 0 \\ \implies a_0 &= 0 \end{aligned}$$

Im Folgenden sei zuerst $n \neq 2$:

$$\begin{aligned}
b_n &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(nx) \, dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \sin(2x) \sin(nx) \, dx \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sin(x(n-2))}{n-2} - \frac{\sin(x(n+2))}{n+2} \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sin(n\pi)}{n^2-4} \\
&= 0 \\
a_n &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \cos(nx) \sin(2x) \, dx \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{\cos((n+2)x)}{n+2} + \frac{\cos((n-2)x)}{n-2} \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1 - (-1)^n}{(n-2)(n+2)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1 - (-1)^n}{n^2-4}
\end{aligned}$$

Für $n = 2$ erhalten wir für b_2 :

$$b_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \sin^2(2x) \, dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \frac{1}{2} (1 - \cos(4x)) \, dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[x - \frac{1}{4} \sin(4x) \right]_{-\pi}^0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

und für a_2 :

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \cos(2x) \sin(2x) \, dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^0 \frac{1}{2} \sin(4x) \, dx = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \cos(4x) \Big|_{-\pi}^0 = 0$$

Damit ist das Endergebnis

$$f(x) = \frac{1}{2} \sin(2x) + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1, n \neq 2}^{\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n^2 - 4} \cos(nx)$$

(c)

$$f(x) = \begin{cases} x + \pi & -\pi \leq x \leq 0 \\ \pi - x & 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$$

This is an even Function. *Proof:* Choose $a \in [0, \pi]$:

$$f(-a) = -a + \pi = f(a)$$

This leads us to

$$b_n = 0$$

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos(nx) \, dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\int_{-\pi}^0 \cos(nx)(\pi + x) \, dx + \int_0^{\pi} \cos(nx)(\pi - x) \, dx \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1 - (-1)^n}{n^2} + \frac{1 - (-1)^n}{n^2} \right) \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1 - (-1)^n}{n^2} \\ a_0 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\pi}^0 \pi + x \, dx + \int_0^{\pi} \pi - x \, dx \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\pi^2 - \frac{1}{2}\pi^2 + \pi^2 - \frac{1}{2}\pi^2 \right) \\ &= \frac{\pi^2}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

Finally we have

$$f(x) = \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n^2} \cos(nx)$$

11. Aufgabe: Orthonormalsysteme

- (a) Zuerst berechnen wir die Norm der Vektoren, um sie dann normieren zu können. Wir benutzen dabei, dass die gegebenen Vektoren $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ schon eine ONB sind. Es ist

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = \frac{5}{4}$$

weshalb wir als normierten Vektor ansetzen:

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = \frac{2}{\sqrt{5}}|\psi_1\rangle$$

Analog auch

$$\langle\psi_2|\psi_2\rangle = \frac{2}{3}$$

und damit

$$|\tilde{\psi}_2\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}|\psi_2\rangle$$

Wir haben also jetzt die Vektoren:

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}}|1\rangle + \frac{i}{\sqrt{5}}|2\rangle + i\sqrt{\frac{2}{5}}|3\rangle \quad |\tilde{\psi}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|3\rangle$$

Wir machen den Ansatz

$$|\psi_3\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle$$

Da $|\psi\rangle_3$ auf den anderen beiden Vektoren senkrecht stehen muss, muss also gelten

$$\begin{aligned}\langle\tilde{\psi}_1|\psi_3\rangle \stackrel{!}{=} 0 &\implies \sqrt{\frac{2}{5}}a - \frac{i}{\sqrt{5}}b - i\sqrt{\frac{2}{5}}c = 0 \\ \langle\tilde{\psi}_2|\psi_3\rangle \stackrel{!}{=} 0 &\implies \frac{1}{\sqrt{2}}a + \frac{i}{\sqrt{2}}c = 0\end{aligned}$$

Aus der zweiten Gleichung folgt $a = -ic$ und damit aus der ersten Gleichung

$$b = -2\sqrt{2}c$$

Wir wählen $c = -1$ und erhalten

$$|\psi_3\rangle = i|1\rangle + 2\sqrt{2}|2\rangle - |3\rangle$$

(welcher auch linear unabhängig zu den anderen beiden Vektoren ist). Der Vektor muss noch normiert werden. Es ist

$$\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1 + 8 + 1 = 10$$

$$|\tilde{\psi}_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}|\psi_3\rangle$$

und damit bilden $\{|\tilde{\psi}_1\rangle, |\tilde{\psi}_2\rangle, |\tilde{\psi}_3\rangle\}$ ein Orthonormalsystem.

(b) Die Projektion ist definiert also

$$P_{\psi_i} = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

für $i = 1, 2, 3$. Für die Matrixdarstellung benutzen wir jetzt die Darstellung in der Basis $|i\rangle$ mit

$$P_{\psi_i}(s, t) = \langle s|\psi_i\rangle \langle \psi_i|t\rangle$$

wenn die (s, t) -te Stelle der Matrix gesucht ist. Damit lassen sich die einzelnen Komponenten berechnen (wir benutzen jeweils die schon normierten Vektoren von oben). Man erhält

$$P_{\tilde{\psi}_1} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 2 & -i\sqrt{2} & -2i \\ i\sqrt{2} & 1 & \sqrt{2} \\ 2i & \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$$

$$P_{\tilde{\psi}_2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_{\tilde{\psi}_3} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & 2i\sqrt{2} & -i \\ -2i\sqrt{2} & 8 & -2\sqrt{2} \\ i & -2\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

Offensichtlich sind diese Matrizen alle hermitesch, denn es ist

$$P_{\tilde{\psi}_1}^\dagger = P_{\tilde{\psi}_1} \quad P_{\tilde{\psi}_2}^\dagger = P_{\tilde{\psi}_2} \quad P_{\tilde{\psi}_3}^\dagger = P_{\tilde{\psi}_3}$$

und außerdem (allgemein)

$$(P_{\psi_i})^\dagger(s, t) = (P_{\psi_i})^*(t, s) = (\langle t|\psi_i\rangle \langle \psi_i|s\rangle)^* = \langle \psi_i|t\rangle \langle s|\psi_i\rangle = \langle s|\psi_i\rangle \langle \psi_i|t\rangle = P_{\psi_i}(s, t)$$

Weiterhin ist zu erkennen, dass

$$\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 2 & -i\sqrt{2} & -2i \\ i\sqrt{2} & 1 & \sqrt{2} \\ 2i & \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & 2i\sqrt{2} & -i \\ -2i\sqrt{2} & 8 & -2\sqrt{2} \\ i & -2\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und damit die Vollständigkeitsrelation erfüllt ist (was auch klar war, da die Vektoren eine ONB bilden).

12. Aufgabe: Eigenwerte,-funktionen und Projektoren

(a)

$$L_y^\dagger = -\frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = L_y$$

So L_y is an hermitean Matrix.

Eigenvalues

$$\begin{aligned} \det(L_y - \lambda \mathbb{1}) &= \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & 0 \\ -\frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \\ 0 & -\frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & -\lambda \end{vmatrix} \\ &= -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \\ -\frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & -\lambda \end{vmatrix} + \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \begin{vmatrix} \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & 0 \\ -\frac{\hbar}{\sqrt{2}i} & -\lambda \end{vmatrix} \\ &= -\lambda \left(\lambda^2 - \frac{\hbar^2}{2} \right) + \lambda \frac{\hbar^2}{2} \\ &= \lambda (\hbar^2 - \lambda^2) \\ &\stackrel{!}{=} 0 \\ &\implies \lambda \in \{-\hbar, 0, \hbar\} \end{aligned}$$

Eigenvectors Assumption:

$$\lambda = \lambda_1 = -\hbar \implies v_1 = -|1\rangle + i\sqrt{2}|2\rangle + |3\rangle$$

Proof:

$$\hbar \begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{2} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} + i\sqrt{2} - \frac{i}{\sqrt{2}} \\ -1 + 1 \end{pmatrix} = 0$$

Norming :

$$\|v_1\| = 4 \implies \tilde{v}_1 = \frac{1}{2}v_1$$

Assumption :

$$\lambda = \lambda_2 = 0 \implies v_3 = |1\rangle + |3\rangle$$

Proof:

$$L_y \cdot (|1\rangle + |3\rangle) = 0|1\rangle + (-\sqrt{2} + \sqrt{2})|2\rangle + 0|3\rangle = 0$$

Norming:

$$\tilde{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}v_2$$

Assumption:

$$\lambda = \lambda_2 = \hbar \implies v_3 = -|1\rangle - i\sqrt{2}|2\rangle + |3\rangle$$

Proof:

$$\hbar \begin{pmatrix} -1 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -1 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-1 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} + i\sqrt{2} - \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 1-1 \end{pmatrix} = 0$$

Norming :

$$\tilde{v}_3 = \frac{1}{2}v_3$$

(b) Wir berechnen die Projektoren wieder wie oben über

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

wobei die Vektoren ψ jetzt die Eigenvektoren sind. Wir erhalten

$$P_1 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & i\sqrt{2} & -1 \\ -i\sqrt{2} & 2 & i\sqrt{2} \\ -1 & -i\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_3 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -i\sqrt{2} & -1 \\ i\sqrt{2} & 2 & -i\sqrt{2} \\ -1 & i\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$P = P_1 + P_2 + P_3 = E$$

Man erkennt also die Vollständigkeit. Außerdem lassen sich die Skalarprodukte berechnen und man erhält die Orthogonalität (ach was... bei einem hermiteschen Operator).

5. Übung

Aufgabe 1: kommutierende Operatoren

8 Punkte

Ein dreidimensionaler Vektorraum sei durch eine Orthonormalbasis aufgespannt, bezüglich derer zwei Operatoren H und B wie folgt definiert sind (ω, b reell):

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = b \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Zeigen Sie, dass H und B hermitesch sind. Die Eigenwerte beider Operatoren sind folglich reell. Wie lauten Sie?
- Zeigen Sie, dass der Kommutator $[H, B]$ verschwindet. Es existiert daher ein Satz gemeinsamer Eigenvektoren zu H und B . Geben Sie eine Orthonormalbasis an, die aus derartigen Eigenvektoren gebildet ist.
- Wegen der Vertauschbarkeit von H und B muss es eine Basis geben, bezüglich derer beide Matrizen Diagonalgestalt haben (mit den jeweiligen Eigenwerten in der Diagonalen). Finden Sie eine Übergangsmatrix U für solch einen Basiswechsel, d. h. gesucht ist eine unitäre Matrix U , so dass $B' = UBU^\dagger$ und $H' = UHU^\dagger$ beide diagonal sind.
- Welche der Mengen $\{H\}, \{B\}, \{H, B\}, \{H^2, B\}$ von Operatoren bilden einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen?

Aufgabe 2:

12 Punkte

Betrachten wir ein Potential der Form

$$V(x) = -V_0\delta(x) \quad \text{mit} \quad V_0 > 0.$$

- Es existiert ein gebundener Zustand ($E < 0$). Zeigen Sie, dass dieser Zustand gegeben ist durch:

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\rho}e^{-\rho|x|} \quad \text{mit} \quad \rho = (mV_0)/\hbar^2.$$

- Für Steuzustände ($E > 0$) mit von links einlaufenden Wellen ergibt sich (vgl. Blatt 3, Aufgabe 2):

$$\Phi_p^l(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \begin{cases} e^{ipx/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa}e^{-ipx/\hbar} & , \quad x \leq 0 \\ \frac{i\kappa}{1+i\kappa}e^{ipx/\hbar} & , \quad x > 0 \end{cases}$$

mit $p = \sqrt{2mE}$ und $\kappa = p/(\rho\hbar)$.

- Um ein vollständiges Orthonormalsystem zu konstruieren, benötigen wir noch Streuzustände mit von rechts einlaufenden Wellen $\Phi_p^r(x)$. Bestimmen Sie $\Phi_p^r(x)$.
- Das System ist orthonormiert, also müssen folgende Relationen gelten:

$$\begin{array}{ll} 1.) \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1 & 2.) \langle \Psi_0 | \Phi_p^l \rangle = 0 \\ 3.) \langle \Psi_0 | \Phi_p^r \rangle = 0 & 4.) \langle \Phi_p^l | \Phi_{p'}^l \rangle = \delta(p - p') \\ 5.) \langle \Phi_p^r | \Phi_{p'}^r \rangle = \delta(p - p') & 6.) \langle \Phi_p^l | \Phi_{p'}^r \rangle = 0 \end{array}$$

mit $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_0^*(x) \Psi_0(x)$, usw.

Verifizieren Sie die Relation 1.), 2.), 4.) und 6.).

Hinweis: Verwenden Sie $\int_0^{\infty} dx e^{ikx} = \frac{i}{k} + \pi\delta(k)$

e) Zeigen Sie für den Fall $x > 0$ und $x' > 0$, dass das System vollständig ist, also dass

$$\Psi_0(x)\Psi_0(x') + \int_0^{\infty} dp \Phi_p^{l*}(x)\Phi_p^l(x') + \int_0^{\infty} dp \Phi_p^{r*}(x)\Phi_p^r(x') = \delta(x - x')$$

gilt.

Hinweis: Die Integrale $\int_0^{\infty} dx \frac{\cos(ax)}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} e^{-|a|}$ und $\int_0^{\infty} dx \frac{x \sin(bx)}{1+x^2} = \text{sign}(b) \frac{\pi}{2} e^{-|b|}$ sind nützlich.

13. Aufgabe: Kommutierende Operatoren

(a) H und B sind hermitesch, da offensichtlich

$$H^\dagger = H \quad B^\dagger = B$$

Die Eigenwerte von H lauten

$$\lambda_{h_1} = \hbar\omega, \lambda_{h_2} = -\hbar\omega$$

wie man leicht einsieht, da H schon in Diagonalform ist. Die Eigenwerte von B lassen sich berechnen über

$$\det(B - X E_3) = -X^2(X+b) - b^2(b+X) = -(X^2 + b^2)(B+X) = 0 \quad \lambda_{b_1} = b, \lambda_{b_2} = -b$$

(b) Der Kommutator ist

$$[H, B] = HB - BH = \hbar\omega b \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \hbar\omega b \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Wir berechnen die Eigenvektoren von B . Zuerst zu $\lambda_{b_1} = b$. Dieser ist gegeben durch

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Denn es ist

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & ib & 0 \\ -ib & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -b \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Für $\lambda_{b_2} = -b$ erhalten wir einen Eigenraum mit 2 Dimensionen. Wir wählen daraus

$$|v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

denn es ist $B|v_2\rangle$ offensichtlich $-b|v_2\rangle$ und $B|v_3\rangle = -b|v_3\rangle$ analog zu oben. Wie wir sehen, sind die Vektoren schon normiert und sogar orthogonal gewählt (zu zwei verschiedenen EW folgt das aus der Hermizität, zum gleichen EW sind die beiden

Vektoren so gewählt worden).

Diese Vektoren sind aber zugleich auch Eigenvektoren von H . Durch die einfache Gestalt von H sehen wir nämlich sofort, dass

$$H |v_1\rangle = \hbar\omega |v_1\rangle \quad H |v_3\rangle = \hbar\omega |v_3\rangle \quad H |v_2\rangle = -\hbar\omega |v_2\rangle$$

Damit bilden die $|v_i\rangle$ eine ONB, die aus Eigenvektoren von beiden Matrizen gebildet wird.

- (c) Wir benutzen einfach die ONB aus der Aufgabe davor. Diese erfüllt nämlich schon alle Bedingungen. Denn wenn wir als Basiswechsellmatrix U wählen

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

Denn es ist

$$U \cdot H \cdot U^\dagger = \begin{pmatrix} -\omega\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \omega\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \omega\hbar \end{pmatrix}$$

und

$$U \cdot B \cdot U^\dagger = \begin{pmatrix} -b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & -b \end{pmatrix}$$

welche beide in Diagonalgestalt sind (mit den Eigenwerten als Diagonalelemente). Außerdem ist U unitär, da es aus den Vektoren einer ONB besteht (welche senkrecht aufeinander stehen).

- (d) Die Operatoren H und B alleine sind noch kein v.S.k.O, da sie beide einen Eigenwert besitzen, der entartet ist ($-b$ oder $-\omega\hbar$), also die Wahl der Eigenvektoren nicht eindeutig ist.

Betrachten wir jetzt das Set H, B . Wie oben gezeigt kommutieren die beiden Operatoren und eine mögliche Eigenvektorbasis wäre gegeben durch

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wir geben die dazugehörigen Eigenwerte von B und H an. Es ist

$$\begin{aligned} B|v_1\rangle &= b|v_1\rangle & H|v_1\rangle &= \hbar\omega|v_1\rangle & B|v_2\rangle &= -b|v_2\rangle \\ H|v_2\rangle &= -\hbar\omega|v_2\rangle & B|v_3\rangle &= -b|v_3\rangle & H|v_3\rangle &= \hbar\omega|v_3\rangle \end{aligned}$$

Wie man sieht, ist also die Charakterisierung der Eigendasenvektoren $|v_i\rangle$ durch ihre Eigenwerte eindeutig. Also bilden H und B ein v.S.k.O.

Da H eine so einfache Struktur hat, lässt sich H^2 und vor allem die dazugehörigen Eigenvektoren (und Werte) sofort berechnen. Es ist

$$H^2 = \hbar^2\omega^2 E_3$$

Damit ist $\hbar^2\omega^2$ der einzige Eigenwert zu den drei Eigenvektoren e_1, e_2, e_3 . Wie auch schon für H können wir wieder eine Basis konstruieren, die ONB ist und Eigenvektoren für H^2 und B sind. Wir wählen die selbe Basis wie oben, nämlich

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dann ist (analog zu oben)

$$\begin{aligned} B|v_1\rangle &= b|v_1\rangle & H^2|v_1\rangle &= \hbar^2\omega^2|v_1\rangle & B|v_2\rangle &= -b|v_2\rangle \\ H^2|v_2\rangle &= \hbar^2\omega^2|v_2\rangle & B|v_3\rangle &= -b|v_3\rangle & H^2|v_3\rangle &= \hbar^2\omega^2|v_3\rangle \end{aligned}$$

Wie man sieht, ist die Charakterisierung diesmal nicht eindeutig. Also bilden H^2 und B kein v.S.k.O.

14. Aufgabe: Störwelle

- (a) Wir berechnen die Lösung der Schrödingergleichung in einem Bereich ohne Potential (dalso $x \neq 0$). Mit dem Ansatz

$$\psi = e^{i\lambda x}$$

folgt sofort

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \pm i \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Wir setzen

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

was reell ist, da $E < 0$.

Wir wählen dann zur Beschreibung der Wellenfunktion zwei Bereiche:

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} & x < 0 \\ A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} & x > 0 \end{cases}$$

Aufgrund der Normierbarkeit fallen aber A_1' und A_2' sofort weg. Nun betrachten wir noch die Anschlussbedingungen. Da ψ an der Stelle $x = 0$ stetig sein muss, folgt $A_1 = A_2$. Die Sprungbedingung für die Ableitung bringt

$$\psi'_+ - \psi'_- = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \implies -\rho - \rho = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \implies \rho = \frac{mV_0}{\hbar^2}$$

Zur Bestimmung des Faktors $A_1 = A_2 = A$ Normieren wir die Wellenfunktion (welche reell ist, weshalb auf die komplexe Konjugation unterdrückt werden kann):

$$\int \psi(x)^2 dx = \int_{-\infty}^0 A^2 e^{2\rho x} dx + \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\rho x} dx = 1$$

Das entspricht (wenn man die Integrale löst)

$$\frac{A^2}{2\rho} + \frac{A^2}{2\rho} = 1 \implies A^2 = \rho$$

Schließlich kommt man auf das behauptete Endergebnis

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{\rho} e^{\rho x} & x < 0 \\ \sqrt{\rho} e^{-\rho x} & x > 0 \end{cases} = \sqrt{\rho} e^{-\rho|x|}$$

(b) Keine Aufgabenstellung

(c) Das Problem ist symmetrisch. Es reicht also in der Lösung für Φ_p^l einfach x mit $-x$ zu vertauschen. Es ist also

$$\Phi_p^r(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \begin{cases} e^{-ipx/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa} e^{ipx/\hbar} & x > 0 \\ \frac{i\kappa}{1+i\kappa} e^{-ipx/\hbar} & x < 0 \end{cases}$$

(d) (1) $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$: Diese Relation wurde schon in der Aufgabenstellung a) bestätigt, da die dort verwendete Variable A so gewählt worden ist (damit ψ_0 normiert wird).

(2) Es ist

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi_p^l \rangle &= \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^0 e^{\rho x + ipx/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa} e^{\rho x - ipx/\hbar} dx + \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} \frac{i\kappa}{1+i\kappa} e^{-\rho x + ipx/\hbar} dx \\ &= \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} e^{-\rho x - ipx/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa} e^{-\rho x + ipx/\hbar} + \frac{i\kappa}{1+i\kappa} e^{-\rho x + ipx/\hbar} dx \\ &= \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} e^{ix(i\rho - p/\hbar)} - \frac{1}{1+i\kappa} e^{ix(i\rho + p/\hbar)} + \frac{i\kappa}{1+i\kappa} e^{ix(i\rho + p/\hbar)} dx \end{aligned}$$

Wir benutzen jetzt die angegebene Formel auf dem Übungsblatt, bemerken aber gleich, dass ρ und p beide reell sind und deshalb der Exponent nie Null sein kann. Deshalb bleiben nur noch die Brüche mit i im Zähler stehen.

Man erhält

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \left[\frac{i}{i\rho - p/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa} \frac{i}{i\rho + p/\hbar} + \frac{i\kappa}{1+i\kappa} \frac{i}{i\rho + p/\hbar} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\hbar}} \frac{-\rho - i\kappa\rho + ip/\hbar - \kappa p/\hbar + \rho + ip/\hbar - i\rho\kappa + \kappa p/\hbar}{(1+i\kappa)(i\rho - p/\hbar)(i\rho + p/\hbar)} \end{aligned}$$

Setzt man jetzt noch die Definition von

$$\kappa = \frac{p}{\rho\hbar}$$

ein, so sieht man, dass sich die Summanden jeweils paarweise wegheben. Man erhält also wirklich

$$\langle \psi_0 | \psi_p^l \rangle = 0$$

(3) Zeige

$$2\pi\hbar \langle \Psi_p^l | \Psi_{p'}^l \rangle = 2\pi\hbar \delta(p - p')$$

$$\int_{-\infty}^0 dx \left(e^{-\frac{ipx}{\hbar}} - \frac{1}{1-i\kappa} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right) \left(e^{ip'x/\hbar} - \frac{1}{1+i\kappa'} e^{-ip'x/\hbar} \right) + \int_0^{\infty} dx \frac{i\kappa}{1-i\kappa} e^{-ipx/\hbar} - \frac{i\kappa'}{1+i\kappa'} e^{ip'x/\hbar}$$

Integral zusammenfassen mit Integralgrenzen $\int_0^\infty dx$

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^\infty dx \left(e^{i(p-p')x} + \frac{1 + \kappa\kappa'}{(1 - i\kappa)(1 + i\kappa')} e^{-i(p-p')x/\hbar} - \frac{e^{-i(p-p')x/\hbar}}{1 - i\kappa} - \frac{e^{i(p+p')x/\hbar}}{1 + i\kappa'} \right) \\
 &= \frac{1}{(1 - i\kappa)(1 + i\kappa')} \left(\frac{\kappa - \kappa'}{p - p'} \hbar - \frac{\kappa + \kappa'}{p + p'} \hbar + (2 + i(\kappa - \kappa') + 2\kappa\kappa')\pi\delta\left(\frac{p - p'}{\hbar}\right) - (2 + i(\kappa + \kappa'))\pi\delta\left(\frac{p + p'}{\hbar}\right) \right) \\
 &= 2\pi\hbar\delta(p - p')
 \end{aligned}$$

(4) Nicht bearbeitet.

(e) Wir berechnen zuerst die beiden Integrale. Diese lassen sich zu einem Integral umschreiben. Der Integrand lautet dann

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \left(e^{-\frac{ipx}{\hbar}} - \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{1 - i\kappa} \right) \left(e^{\frac{ipx'}{\hbar}} - \frac{e^{-\frac{ipx'}{\hbar}}}{1 + i\kappa} \right) + \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}} - \frac{ipx'}{\hbar} \kappa^2}{(1 - i\kappa)(1 + i\kappa)}$$

Wir multiplizieren aus und benutzen die Exponentialdarstellungen von Kosinus und Sinus. Man erhält

$$\frac{1}{\pi\hbar} \left[\cos\left(\frac{p(x - x')}{\hbar}\right) - \frac{\left(\cos\left(\frac{p(x+x')}{\hbar}\right) + \kappa \sin\left(\frac{p(x+x')}{\hbar}\right)\right)}{1 + \kappa^2} \right]$$

Kümmern wir uns erst um den hinteren Teil. Bei der Integration substituieren wir

$$\kappa = \frac{p}{\rho\hbar}$$

und erhalten mit den Formeln auf dem ÜB

$$-\frac{\rho}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{\cos(\rho\kappa(x + x')) + \kappa \sin(\rho\kappa(x + x'))}{1 + \kappa^2} = -\frac{\rho}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} e^{-\rho(x+x')} + \frac{\pi}{2} e^{-\rho(x+x')} \right] = -\rho e^{-\rho(x+x')}$$

Jetzt zum ersten Teil. Wir schreiben wieder um

$$\frac{1}{\pi\hbar} \cos\left(\frac{p(x - x')}{\hbar}\right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[e^{-ip/h(x-x')} + e^{ip/h(x-x')} \right]$$

Bei der Integration lässt sich jetzt wieder die Formel von oben verwenden. Man erhält

nach Integrieren

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \left[-\frac{i}{p/\hbar(x-x')} + \frac{i}{p/\hbar(x-x')} + \pi\delta\left(-\frac{x-x'}{\hbar}\right) + \pi\delta\left(\frac{x-x'}{\hbar}\right) \right]$$

Nach den Regeln zur Deltadistribution wird dies zu

$$\frac{1}{2\pi\hbar} [\hbar\pi\delta(x-x') + \hbar\pi\delta(x-x')] = \delta(x-x')$$

Uns fehlt jetzt nur noch der Term ohne Integral. Dieser ist

$$\psi_0(x)\psi_0(x') = \rho e^{-\rho(x+x')}$$

Dieser hebt sich also mit dem Term von vorher gerade weg und als Endergebnis bleibt

$$\delta(x-x')$$

und damit die Behauptung.

6. Übung

Aufgabe 1: Virialsatz

6 Punkte

Gegeben sei der (eindimensionale) Hamiltonoperator $H = \frac{P_x^2}{2m} + V(X)$. Zeigen Sie, dass für einen stationären Zustand $\frac{d}{dt}\langle XP_x \rangle = 0$ gilt, und leiten Sie daraus den Virialsatz

$$\frac{i}{\hbar}\langle X[P_x, V(X)] \rangle = 2\left\langle \frac{P_x^2}{2m} \right\rangle$$

her. Benutzen Sie hierzu $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle + \langle \frac{\partial}{\partial t} A \rangle$ für $A = XP_x$.

Was erhalten Sie für $V(x) = \lambda x^n$ und speziell für $n = 2$?

Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator I

7 Punkte

Für den linearen harmonischen Oszillator mit den Energie-Eigenzuständen $|\Phi_n\rangle$ sind mit Hilfe der Operatoren a und $a^\dagger$ die folgenden Größen zu berechnen:

a) die Matrixelemente $\langle \Phi_m | X | \Phi_n \rangle$ und $\langle \Phi_m | P | \Phi_n \rangle$,

b) das Produkt $(\Delta x)(\Delta p)$ mit

$$(\Delta x)^2 = \langle \Phi_n | X^2 | \Phi_n \rangle - (\langle \Phi_n | X | \Phi_n \rangle)^2$$

und analog für $(\Delta p)^2$,

c) die Erwartungswerte der potentiellen und kinetischen Energie für die Zustände $|\Phi_n\rangle$. Vergleichen Sie das Resultat mit dem von Aufgabe 1.

Aufgabe 3: Harmonischer Oszillator II

7 Punkte

Betrachten Sie einen harmonischen Oszillator der Masse m und Frequenz ω . Sein Zustand sei zur Zeit $t = 0$ durch

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle$$

gegeben, wobei die $|\Phi_n\rangle$ stationäre Zustände zu den Energien $(n + 1/2)\hbar\omega$ sind.

a) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P , dass eine Energiemessung zu einer beliebigen Zeit $t > 0$ einen Wert größer $2\hbar\omega$ liefert? Geben Sie im Falle $P = 0$ die nichtverschwindenden Koeffizienten c_n an.

b) Für den Rest der Aufgabe seien nur c_0 und c_1 ungleich Null angenommen (auch für Teil c) und d)). Geben Sie Normierungsbedingung für $|\Psi(0)\rangle$ und den Erwartungswert der Energie $\langle H \rangle$ als Funktion von c_0 und c_1 an. Berechnen Sie $|c_0|^2$ und $|c_1|^2$ unter der Annahme, dass $\langle H \rangle = \hbar\omega$ ist.

c) Im Folgenden sei $c_0 > 0$ angenommen. Dadurch wird der Phasenfaktor des normierten Zustands $|\Psi(0)\rangle$ festgelegt. Des Weiteren sei $\langle H \rangle = \hbar\omega$ und $\langle x \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Berechnen Sie dann den Wert für θ_1 in $c_1 = |c_1| \exp(i\theta_1)$.

d) Berechnen Sie mit dem so festgelegten $|\Psi(0)\rangle$ den Zustand $|\Psi(t)\rangle$ für $t > 0$ und bestimmen Sie den Wert für θ_1 zur Zeit t . Was ist der Erwartungswert von $\langle x \rangle(t)$ zur Zeit t ?

15. Aufgabe: Virialsatz

Wir zeigen zuerst, dass

$$\frac{d}{dt}\langle XP_x \rangle = 0$$

gilt. Wähle dazu ψ als einen stationären Zustand. Er ist also eine Lösung der Eigenwertgleichung

$$H |\psi(t_0)\rangle = E |\psi(t_0)\rangle$$

zur Zeit $t = t_0$ für eine Energie E . Der Zustand zur beliebigen Zeit t lässt sich dann darstellen als

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle$$

Berechnen wir also jetzt den Erwartungswert von XP_x zur Zeit t . Er ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle XP_x \rangle(t) &= \langle \psi(t) | XP_x | \psi(t) \rangle = \langle e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \psi(t_0) | XP_x | e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \psi(t_0) \rangle \\ &= e^{iE(t-t_0)/\hbar} e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \langle \psi(t_0) | XP_x | \psi(t_0) \rangle = \langle XP_x \rangle(t_0) \end{aligned}$$

Wie man sieht gibt es keinen Unterschied zwischen der Zeit t_0 und der beliebigen Zeit t . Also muss der Erwartungswert konstant sein.

Wir benutzen die Formel auf dem Übungsblatt und erhalten

$$0 = \frac{d}{dt}\langle XP_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, XP_x] \rangle + \underbrace{\langle \partial_t XP_x \rangle}_{=0}$$

Der letzte Summand muss Null sein, da weder X noch P_x direkt von der Zeit abhängen. Betrachten wir jetzt den Kommutator:

$$\begin{aligned} [H, XP_x] &= X[H, P_x] + [H, X]P_x = \underbrace{[V(X), X]}_{=0} P_x + \frac{1}{2m} [P_x^2, X] P_x + X[V(X), P_x] + \frac{X}{2m} \underbrace{[P_x^2, P_x]}_{=0} \\ &= \frac{2P_x}{2m} \underbrace{[P_x, X]}_{=-i\hbar} P_x + X[V(X), P_x] \end{aligned}$$

Mit dieser Lösung erhalten wir

$$0 = \frac{i}{\hbar} \left\langle -2i\hbar \frac{P_x^2}{2m} + X[V(X), P_x] \right\rangle = 2 \left\langle \frac{P_x^2}{2m} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle X[V(X), P_x] \rangle$$

und daraus die Behauptung

$$2 \left\langle \frac{P_x^2}{2m} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle X[P_x, V(X)] \rangle$$

Setzen wir jetzt

$$V(X) = \lambda X^n$$

so erhält man

$$\frac{i}{\hbar} \langle X [P_x, V(X)] \rangle = \frac{i\lambda}{\hbar} \langle X [P_x, X^n] \rangle = \frac{i\lambda}{\hbar} \langle X n X^{n-1} \underbrace{[P_x, X]}_{=-i\hbar} \rangle = n\lambda \langle X^n \rangle$$

und damit

$$n\lambda \langle X^n \rangle = 2 \left\langle \frac{P_x^2}{2m} \right\rangle$$

oder speziell für $n = 2$

$$\lambda \langle X^2 \rangle = \left\langle \frac{P_x^2}{2m} \right\rangle$$

Dies kennen wir schon aus der klassischen Mechanik: auf der linken Seite steht die potentielle Energie (eigentlich natürlich ihr Erwartungswert) und auf der rechten Seite die kinetische Energie.

16. Aufgabe: Harmonischer Oszillator I

(a) Durch die Definition von a und $a^\dagger$ wissen wir

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad P = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a)$$

Benutzen wir jetzt noch die Aufsteige- und Absteigeigenschaften von a und $a^\dagger$ mit

$$a^\dagger |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle \quad a |\phi_n\rangle = \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle$$

so kommt man auf

$$\langle \phi_m | X | \phi_m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \phi_m | (a^\dagger + a) | \phi_m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \phi_m | [\sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle] \rangle$$

und da die ϕ_n eine ONB bilden und damit

$$\phi_n \phi_m = \delta_{nm}$$

gilt, folgt daraus

$$\langle \phi_m | X | \phi_m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1}]$$

Für die Berechnung zum Impuls ändert sich nur der Vorfaktor und das Vorzeichen. Sie kann deswegen analog übernommen werden. Man kommt auf

$$\langle \phi_m | P | \phi_m \rangle = i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right]$$

- (b) Wir sehen schon in den obigen Formeln, dass für $n = m$ der Erwartungswert von P und X verschwindet, da $n-1 \neq n \neq n+1$ für jedes n gelten muss. Des Weiteren ist

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left((a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + a^2 \right)^2$$

und damit mit den Aufsteige- und Absteigeigenschaften (siehe oben)

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | X^2 | \phi_n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \phi_n | \left[a^\dagger \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle + a \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle + a^\dagger \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle + a \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle \right] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \phi_n | \left[\sqrt{n+1} \sqrt{n+2} | \phi_{n+2} \rangle + (n+1) | \phi_n \rangle + n | \phi_n \rangle + \sqrt{n-1} \sqrt{n} | \phi_{n-2} \rangle \right] \end{aligned}$$

Auch hier wenden wir wieder an, dass die ϕ_n eine ONB sind, weshalb nur die Produkte mit $\langle \phi_n | \phi_n \rangle$ stehen bleiben. Man erhält

$$\langle \phi_n | X^2 | \phi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (n+1+n) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

und damit

$$(\Delta x)^2 = \langle \phi_n | X^2 | \phi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \implies \Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

Für den Impuls benutzen wir

$$P^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2} \left((a^\dagger)^2 + aa^\dagger - a^\dagger a + a^2 \right)$$

und erhalten analog wie oben

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \langle \phi_n | P^2 | \phi_n \rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \phi_n | \left[\sqrt{n+1} \sqrt{n+2} | \phi_{n+2} \rangle - (n+1) | \phi_n \rangle + n | \phi_n \rangle - \sqrt{n-1} \sqrt{n} | \phi_{n-2} \rangle \right] \\ &= \frac{m\omega\hbar}{2} (n+1+n) = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \implies \Delta p = \sqrt{m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)} \end{aligned}$$

Damit ist das gesuchte Produkt

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

(c) Es ist

$$\langle V(X) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle X^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 [(\Delta X)^2 + \langle X \rangle^2]$$

Wie wir oben gesehen haben, ist $\langle X \rangle = 0$ und damit

$$\langle V(X) \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta X)^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Für die kinetische Energie gilt:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = \frac{1}{2m} [(\Delta P)^2 + \langle P \rangle^2]$$

Wieder benutzen wir, dass $\langle P \rangle = 0$ und damit

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m} (\Delta P)^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \langle V(X) \rangle$$

Wie wir oben schon gesehen haben, gleichen sich Erwartungswert von kinetischer und potentieller Energie in diesem Fall.

17. Aufgabe: Harmonischer Oszillator II

(a) Es ist

$$P(E > 2\hbar\omega) = \sum_{E=2\hbar\omega}^{\infty} P(E) = \sum_{n=2}^{\infty} P(E = E_n = (n + 1/2)\hbar\omega)$$

Jeder Messung in der Quantenphysik entspricht ein Operator und die Energiemessung wird trivialerweise durch den Hamiltonoperator repräsentiert. Seine Eigenwerte sind in diesem Fall gerade E_n mit den dazugehörigen Eigenvektoren ϕ_n also die stationären Zustände. Es ist also (wenn wir annehmen, dass $\psi(0)$ normiert ist)

$$P(E > 2\hbar\omega) = \sum_{n=2}^{\infty} P(E = E_n = (n+1/2)\hbar\omega) = \sum_{n=2}^{\infty} |\langle \phi_n | \psi(t) \rangle|^2 = \sum_{n=2}^{\infty} |\langle \phi_n | U(t, 0) | \psi(0) \rangle|^2$$

mit dem Entwicklungsoperator U . Nun ist $\psi(0)$ eine Linearkombination auf den stationären Zuständen ϕ_n und die Wirkung von U auf diese Eigenzustände ist sehr

einfach:

$$U(t, 0) |\phi_n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle$$

Wir können deshalb schreiben

$$P(E > 2\hbar\omega) = \sum_{n=2}^{\infty} \left| \sum_i c_i e^{-iE_i t/\hbar} \underbrace{\langle \phi_n | \phi_i \rangle}_{=\delta_{in}} \right|^2 = \sum_{n=2}^{\infty} |c_n e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = \sum_{n=2}^{\infty} |c_n|^2$$

Damit die Wahrscheinlichkeit jetzt 0 ist, dürfen also nur noch die Terme c_0 und c_1 stehen bleiben (was auch sinnvoll ist!)

(b) Die Normierungsbedingung liefert

$$\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = \langle c_0 \phi_0 + c_1 \phi_1 | c_0 \phi_0 + c_1 \phi_1 \rangle$$

Wir nutzen die ONB-Eigenschaften von ϕ_0, ϕ_1 und erhalten

$$\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = |c_0|^2 \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle + |c_1|^2 \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = |c_0|^2 + |c_1|^2$$

Damit die Normierung erfüllt ist, muss dies Eins sein. Der Erwartungswert in diesem Zustand für H ist

$$\langle H \rangle = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle = \langle c_0 \phi_0 + c_1 \phi_1 | H | c_0 \phi_0 + c_1 \phi_1 \rangle$$

Die ϕ_0, ϕ_1 sind Eigenvektoren von H zu den Eigenwerten E_0, E_1 , also

$$\langle H \rangle = \langle c_0 \phi_0 + c_1 \phi_1 | c_0 E_0 \phi_0 + c_1 E_1 \phi_1 \rangle$$

und damit analog zu oben (mit dem Ergebnis aus der 2)

$$\langle H \rangle = |c_0|^2 E_0 + |c_1|^2 E_1 = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} |c_0|^2 + \frac{3}{2} |c_1|^2 \right)$$

Mit der Annahme $\langle H \rangle = \hbar\omega$ kommt man auf das Gleichungssystem

$$1 = |c_0|^2 + |c_1|^2 \tag{1}$$

$$1 = \frac{1}{2} |c_0|^2 + \frac{3}{2} |c_1|^2 \tag{2}$$

Wir subtrahieren (1) von 2 mal (2) und erhalten

$$2|c_1|^2 = 1 \implies |c_1|^2 = |c_0|^2 = \frac{1}{2}$$

(c) Damit die Aussage $c_0 > 0$ überhaupt einen Sinn hat, muss c_0 reell sein. Da es laut Aussage auch positiv ist und die Beziehungen von oben weiter gelten, gilt

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Für den Erwartungswert von X gilt

$$\langle X \rangle = \langle c_0\phi_0 + c_1\phi_1 | X | c_0\phi_0 + c_1\phi_1 \rangle$$

und aufgrund der Linearität

$$= |c_0|^2 \langle \phi_0 | X | \phi_0 \rangle + c_0^* c_1 \langle \phi_0 | X | \phi_1 \rangle + c_0 c_1^* \langle \phi_1 | X | \phi_0 \rangle + |c_1|^2 \langle \phi_1 | X | \phi_1 \rangle$$

Die einzelnen Summanden sind gerade die Darstellung von X in der Basis der Eigenvektoren. Diese wurde schon in der vorherigen Aufgabe berechnen. Wir wissen also

$$X_{00} = X_{11} = 0 \quad X_{10} = X_{01} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

und dies liefert

$$\langle X \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_0^* c_1 + c_0 c_1^*) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_1 + c_1^*) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (c_1 + c_1^*)$$

Damit die Beziehung für $\langle X \rangle$ auf dem Übungsblatt erfüllt ist, muss gelten

$$c_1 + c_1^* = 1$$

Setzen wir jetzt noch

$$c_1 = |c_1| e^{i\Theta}$$

und

$$|c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

wie wir von vorher wissen, so erhält man

$$1 = c_1 + c_1^* = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\Theta} + e^{-i\Theta}] = \frac{1}{\sqrt{2}} 2 \cos(\Theta) = \sqrt{2} \cos(\Theta)$$

Es muss also

$$\cos \Theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \implies \Theta = \frac{\pi}{4}$$

(d) Wir haben bisher gefunden:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\Theta} |\phi_1\rangle$$

Für die Zeitentwicklung benutzen wir wieder den Zeitentwicklungsoperator U und seine einfache Wirkung auf die Basisvektoren ϕ_n . Man erhält

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0t/\hbar} |\phi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\Theta} e^{-iE_1t/\hbar} |\phi_1\rangle$$

Man erkennt den neuen Phasenfaktor

$$\Theta_t = \Theta - E_1t/\hbar = \Theta - \frac{3}{2}t\omega = \frac{\pi}{4} - \frac{3}{2}t\omega$$

Beziehungsweise den Unterschied zwischen den beiden Anteilen

$$\Delta\Theta = \Theta - \frac{3}{2}t\omega + \frac{1}{2}t\omega = \frac{\pi}{4} - t\omega$$

Für den Erwartungswert von X gilt jetzt

$$\langle X \rangle(t) = \langle c_0(t)\phi_0 + c_1(t)\phi_1 | X | c_0(t)\phi_0 + c_1(t)\phi_1 \rangle$$

Wie man sieht, ergeben sich die selben Formeln wie in der Aufgabe davor, wenn man nur immer die zeitabhängigen Vorfaktoren benutzt. Man erhält also

$$\langle X \rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_0^*(t)c_1(t) + c_0(t)c_1^*(t))$$

mit

$$c_0(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0t/\hbar} \quad c_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\Theta} e^{-iE_1t/\hbar}$$

erhält man

$$c_0^*(t)c_1(t) = \frac{1}{2} e^{iE_0t/\hbar} e^{i\Theta} e^{-iE_1t/\hbar} = \frac{1}{2} e^{i\Delta\Theta} \quad c_0(t)c_1^*(t) = (c_0^*(t)c_1(t))^* = \frac{1}{2} e^{-i\Delta\Theta}$$

und damit

$$\langle X \rangle(t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (e^{i\Delta\Theta} + e^{-i\Delta\Theta}) = \sqrt{2} \langle X \rangle(0) \cos(\Delta\Theta) = \sqrt{2} \langle X \rangle(0) \cos\left(\frac{\pi}{4} - t\omega\right)$$

7. Übung

Aufgabe 1: Gaußsches Wellenpaket im HO

8 Punkte

Die Wellenfunktion $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle$ für ein Teilchen der Masse m sei zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ durch ein Gaußsches Wellenpaket gegeben:

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \beta^2 (x - a)^2 \right)$$

Das Teilchen befinde sich im Oszillator-Potential $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ mit $\beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$.

a) Berechnen Sie $\Psi(x, t)$. Schieben Sie hierzu in $\langle x | \Psi(t) \rangle = \langle x | e^{-iHt/\hbar} | \Psi(0) \rangle$ einen vollständigen Satz von Energie-Eigenfunktionen $|\phi_n\rangle$ ein.

Zur Berechnung können Sie die folgenden Relationen für die Hermite-Polynome gebrauchen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-(\xi-\alpha)^2} H_n(\xi) = \sqrt{\pi} (2\alpha)^n ,$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \lambda^n = \exp(-\lambda^2 + 2\lambda\xi) .$$

b) Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|^2$ kann in die Form

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp \left[-\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{2(\Delta x)^2} \right] .$$

gebracht werden. Was ergibt sich für den Erwartungswert $\langle X \rangle$ und die Breite Δx ?

c) Vergleichen Sie die Resultate mit den bekannten Ergebnissen für das freie Gaußsche Wellenpaket.

Aufgabe 2: Pauli-Matrizen

6 Punkte

Es seien σ_i ($i = 1, 2, 3$) die Pauli-Matrizen und $\mathbb{1}$ die 2×2 Einheitsmatrix.

a) Verifizieren Sie für den Spezialfall $i = 1, j = 2$, dass gilt:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \mathbb{1} ,$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] \equiv \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k .$$

b) Mit Hilfe von a) soll gezeigt werden, dass für beliebige Vektoren $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{C}^3$ die Identität

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} \mathbb{1} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

gilt.

c) Eine beliebige 2×2 Matrix M sei definiert durch

$$M = a_0 \mathbb{1} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma} , \quad a_0, a_i \in \mathbb{C} .$$

Wie können a_0 und a_i durch die Spuren $Sp(M)$ und $Sp(\sigma_i M)$ ausgedrückt werden?

Aufgabe 3: Operatoridentitäten (freiwillig)

6 Bonuspunkte

Beweisen Sie die folgenden Operatoridentitäten:

a) Die Baker-Hausdorff-Identität:

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A, B]_n,$$

wobei $[A, B]_0 \equiv B$, $[A, B]_1 \equiv [A, B]$, $[A, B]_2 \equiv [A, [A, B]]$, $\dots$

Hinweis: Betrachten Sie die Taylorentwicklung der Funktion $F(x) = e^{xA} B e^{-xA}$ in der reellen Variablen x .

b) Falls der Kommutator zweier Operatoren A und B mit diesen kommutiert, gilt die folgende Beziehung:

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

Hinweis: Betrachten Sie die Taylorentwicklung der Funktion $F(x) = e^{xA} e^{xB}$ und wenden Sie die Baker-Hausdorff-Identität an.

18. Aufgabe: Wellenpaket im harmonischen Oszillator

Wir benutzen

$$\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

und mit der Definition von β auf dem Blatt

$$\phi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\beta x) e^{-\frac{(\beta x)^2}{2}}$$

(a) Wir schieben ein

$$\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|e^{-iHt/\hbar}\left(\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\right)|\psi(0)\rangle = \sum_n \langle x|e^{-iHt/\hbar}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi(0)\rangle$$

Nun nutzen wir noch aus, dass die ϕ_n Eigenvektoren von H sind:

$$= \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \langle x|\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi(0)\rangle$$

Wir betrachten zuerst das Skalarprodukt am Ende in Ortsdarstellung

$$\langle\phi_n|\psi(0)\rangle = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \int dx H_n(\beta x) e^{-\frac{(\beta x)^2}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\beta x - \beta a)^2}$$

nach der Substitution $u = \beta x$ und quadratischer Ergänzung im Exponenten erhält man

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi}} \int du H_n(u) \exp\left[-\left(u - \frac{\beta a}{2}\right)^2 - \frac{(\beta a)^2}{4}\right] = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (\beta a)^n e^{-\frac{(\beta a)^2}{4}}$$

wenn man die Formel auf dem Übungsblatt mit $\alpha = \frac{\beta a}{2}$ benutzt. Jetzt können wir zusammensetzen

$$\psi(x, t) = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\beta x) e^{-\frac{(\beta x)^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (\beta a)^n e^{-\frac{(\beta a)^2}{4}}$$

und etwas umgestellt mit der Formel für die Energieniveaus

$$= \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{(\beta x)^2}{2} - \frac{(\beta a)^2}{4} - \frac{it\omega}{2}\right] \sum_n \left(\frac{e^{-it\omega}\beta a}{2}\right)^n \frac{H_n(\beta x)}{n!}$$

Wir benutzen wieder eine Formel vom Übungsblatt

$$= \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{(\beta x)^2}{2} - \frac{(\beta a)^2}{4} - \frac{it\omega}{2}\right] \exp\left[-\left(\frac{e^{-it\omega}\beta a}{2}\right)^2 + e^{-it\omega}\beta^2 ax\right]$$

(b) Wir stellen um zu

$$\psi(x, t) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\beta^2}{2}\left(x^2 + \frac{a^2}{2} + \frac{it\omega}{\beta^2} + \frac{(e^{-it\omega}a)^2}{2} - 2e^{-it\omega}ax\right)\right]$$

Dann ist der Betrag gegeben durch das Produkt aus ψ und seinem komplex konjugiertem:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\sqrt{2}\beta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\beta^2\left(x^2 + \frac{a^2}{2} + \left(\frac{e^{-i\omega t}a}{2}\right)^2 + \left(\frac{e^{i\omega t}a}{2}\right)^2 - e^{-i\omega t}ax - e^{i\omega t}ax\right)\right]$$

Die Exponentialfunktion lässt sich mit quadratischer Ergänzung umformen, denn

$$\left(\frac{e^{-i\omega t}a}{2}\right)^2 + \left(\frac{e^{i\omega t}a}{2}\right)^2 + \frac{a^2}{2} = \frac{a^2}{4}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})^2 = a^2 \cos^2(\omega t)$$

und

$$e^{-i\omega t}ax + e^{i\omega t}ax = 2ax \cos(\omega t)$$

und damit

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\sqrt{2}\beta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\beta^2(x^2 + a^2 \cos^2(\omega t) - 2ax \cos(\omega t))\right] = \frac{\sqrt{2}\beta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\beta^2(x - a \cos(\omega t))^2\right]$$

Die Formel auf dem Übungsblatt ist also für

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} \quad \langle X \rangle = a \cos(\omega t)$$

erfüllt.

(c) Für ein freies Wellenpaket hatten wir für den Mittelwert

$$\langle X \rangle = v_0 t$$

erhalten. Auch hier erhalten wir ein ähnliches Ergebnis: Der Erwartungswert verhält sich wie im klassischen Fall ein Teilchen. Es führt eine Schwingung (Cosinus-Term) mit der Frequenz ω und der Amplitude a aus. Für die Breite des Wellenpaketes ergibt

sich jedoch etwas anderes. Das freie Wellenpaket floss auseinander. Das Wellenpaket im HO besitzt immer eine fest definierte Breite (zeitlich und räumlich konstant).

19. Aufgabe: Pauli-Matrizen

Wir benutzen im folgenden die Darstellung der Paulimatrizen in der Basisdarstellung aus $|1\rangle$ und $|0\rangle$, also

$$\sigma_1 = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \quad \sigma_2 = i(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|) \quad \sigma_3 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$$

(a) Für $i = 1$ und $j = 2$ gilt:

$$\{\sigma_1, \sigma_2\} = i(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|) + i(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|)(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)$$

Dann nutzen wir die Orthonormalität von $|0\rangle$ und $|1\rangle$, also

$$= i(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|) = 0 = 2\delta_{12}\mathbb{1}$$

und stark analog

$$[\sigma_1, \sigma_2] = i(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|) - i(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|)(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)$$

und wieder

$$= i(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 0|) = 2i(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) = 2i\sigma_3\varepsilon_{123}$$

und damit die Behauptungen.

(b) Mit den Formeln aus der a) gilt vor allem für alle i, j :

$$2\sigma_i\sigma_j = \{\sigma_i, \sigma_j\} + [\sigma_i, \sigma_j] = 2\delta_{ij}\mathbb{1} + 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

und damit

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \left(\sum_i \sigma_i a_i\right) \left(\sum_j \sigma_j b_j\right) = \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j a_i b_j = \sum_{i,j} (\delta_{ij}\mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k) a_i b_j$$

wir ziehen die beiden Summanden auseinander:

$$= \sum_{i,j} \delta_{ij} a_i b_j \mathbb{1} + \sum_{i,j} i\varepsilon_{ijk} \sigma_k a_i b_j = \sum_i a_i b_i \mathbb{1} + i\sigma_k \sum_{i,j} \varepsilon_{ijk} a_i b_j = \vec{a} \cdot \vec{b} \mathbb{1} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

und erhalten damit die Behauptung.

- (c) Zuerst erkennen wir, dass die Pauli-Matrizen selbst spurfrei sind (Betrachte dazu einfach die Matrixdarstellung!). Wir bezeichnen mit σ_0 im Folgenden die Einheitsmatrix $\mathbb{1}$. Dann ist

$$M = a_0\sigma_0 + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3 = \sum_{i=0}^3 a_i\sigma_i$$

Vor allem ist

$$\text{Sp}(M) = \text{Sp}(\sigma_0 M) = \sum_{i=0}^3 a_i \text{Sp}(\sigma_i) = a_0 \text{Sp}(\sigma_0) = 2a_0$$

und für $i = 1, 2, 3$:

$$\text{Sp}(\sigma_i M) = \underbrace{\text{Sp}(a_0\sigma_i)}_{=0} + \sum_{j=1}^3 a_j \text{Sp}(\sigma_i\sigma_j)$$

da die Paulimatrizen spurfrei sind. Wieder benutzen wir die Beziehung aus der a)

$$= \sum_{j=1}^3 a_j \text{Sp}(\delta_{ij}\sigma_0 + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k) = a_i \underbrace{\text{Sp}(\sigma_0)}_{=2} + \sum_{j=1}^3 \underbrace{\text{Sp}(i\varepsilon_{ijk}\sigma_k)}_{=0} = 2a_i$$

20. Aufgabe: Operatoridentitäten (freiwillig)

- (a) Wir bilden die erste Ableitung:

$$F'(x) = e^{xA} A B e^{-xA} + e^{xA} B e^{-xA} (-A) = e^{xA} A B e^{-xA} - e^{xA} B A e^{-xA}$$

Wir haben hier benutzt, dass A und e^{xA} vertauschen.

Beweis: Benutze die Potenzreihendarstellung von

$$e^{xA} = \sum_n \frac{1}{n!} (xA)^n = \sum_n \frac{1}{n!} x^n A^n$$

und da A trivialerweise mit A^n vertauscht, gilt auch

$$[e^{xA}, A] = 0$$

Wir erkennen hier schon eine Gesetzmäßigkeit

$$F'(x) = AF(x) - F(x)A = AF^{(0)}(x) - F^{(0)}(x)A$$

welche allgemein

$$F^{(n+1)}(x) = AF^{(n)}(x) - F^{(n)}(x)A$$

heißt. Der Induktionsanfang wurde schon bewiesen und der Induktionsschritt ist trivial, da

$$F^{(n+1)}(x) = (F^{(n)}(x))' = (AF^{(n-1)}(x) - F^{(n-1)}(x)A)' = AF^{(n)}(x) - F^{(n)}(x)A$$

Vor allem ist

$$F^{(n)}(0) = [A, B]_n$$

Auch hier benutzen wir wieder Induktion:

Induktionsanfang: Es ist

$$F'(0) = AF(0) - F(0)A = AB - BA = [A, B]_1$$

Induktionsschritt: Sei

$$F^{(n)}(0) = [A, B]_n$$

Dann folgt

$$F^{(n+1)}(0) = AF^{(n)}(0) - F^{(n)}(0)A = A[A, B]_n - [A, B]_n A = [A, [A, B]_n] = [A, B]_{n+1}$$

und damit die Behauptung.

und damit die Taylorentwicklung um die Stelle $x = 0$:

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(0) x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A, B]_n x^n$$

Jetzt lässt sich dies zusammensetzen:

$$e^A B e^{-A} = F(\mathbf{1}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(0) \mathbf{1}^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A, B]_n$$

(b) Wir machen das anders: Definiere die Operatorfunktion

$$F(t) = e^{tA} e^{tB}$$

Für sie gilt:

$$F'(t) = Ae^{tA}e^{tB} + e^{tA}Be^{tB} = (A + e^{tA}Be^{-tA})F(t) = (A + B + t[A, B])F(t)$$

wobei wir im letzten Schritt die Formel aus der (a) benutzt haben. Dies ist eine Differentialgleichung für $F(t)$. Wir machen den Ansatz

$$F(t) = e^{\lambda(t)}$$

und erhalten damit

$$\lambda'(t) = A + B + t[A, B] \implies \lambda(t) = t(A + B) + \frac{t^2}{2}[A, B]$$

Da $(A+B)$ nach Voraussetzung mit $[A, B]$ vertauscht, vertauschen auch die einzelnen Potenzreihen und damit

$$F(t) = e^{t(A+B) + \frac{t^2}{2}[A, B]} = e^{t(A+B)}e^{\frac{t^2}{2}[A, B]}$$

Für $t = 1$ folgt die Behauptung.

8. Übung

Aufgabe 1: Harmonischer Oszillator III

7 Punkte

Gegeben sei der eindimensionale harmonischen Oszillator. Betrachten Sie normierte Eigenzustände zum Absteigeoperator a , $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, $\alpha \in \mathbb{C}$.

- Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie $\langle H \rangle_\alpha$ und die Breite ΔE
- Berechnen Sie die Erwartungswerte des Ortes und Impulses.
- Berechnen Sie die Koeffizienten c_n in der Entwicklung nach Eigenfunktionen des Hamiltonoperators

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$

- Das System befinde sich im Zustand $|\alpha\rangle$. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathcal{P}(n)$, das System in einem Zustand mit Energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ zu finden. Wo liegt das Maximum der Verteilung?
- Berechnen Sie die zeitliche Entwicklung des Orts- und Impulserwartungswertes.

Aufgabe 2: Zweizustandssystem

6 Punkte

Betrachten Sie das Zweizustandssystem mit dem Hamiltonoperator

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & W \\ W & E_2 \end{pmatrix}.$$

Eine Basis für die Zustände des Systems sei durch $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ gegeben.

- Berechnen Sie die Eigenwerte und zugehörigen Eigenzustände in dieser Basis.
- Diskutieren Sie das Verhalten der Eigenwerte und Eigenzustände von H für die Fälle
 - $\frac{E_1}{W}, \frac{E_2}{W} \ll 1$ oder $\frac{E_1}{W}, \frac{E_2}{W} \gg 1$
 - $E_1 \sim E_2$
- Betrachten Sie den Fall $E_1 = E_2$. Das System befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|+\rangle$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit das System zu einem späteren Zustand im Zustand $|-\rangle$ zu finden?

Aufgabe 3: Spin im Magnetfeld

7 Punkte

Ein Teilchen mit Spin $1/2$ und dem magnetischen Moment $\vec{M} = \gamma\vec{S}$ befinde sich in einem Magnetfeld $\vec{B}_0$ mit $B_x = -\omega_x/\gamma$, $B_y = -\omega_y/\gamma$, $B_z = -\omega_z/\gamma$.

a) Zeigen Sie, dass der Zeitentwicklungsoperator $U(t, 0)$ (mit $|\Psi(t)\rangle = U(t, 0)|\Psi(0)\rangle$) durch

$$U(t, 0) = e^{-iMt}$$

gegeben ist, wobei

$$M = \frac{1}{\hbar}[\omega_x S_x + \omega_y S_y + \omega_z S_z]$$

mit $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$, $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ in der Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ der S_z Eigenvektoren (σ_i sind die Pauli-Matrizen). Berechnen Sie die Matrixdarstellung von M in dieser Basis. Zeigen Sie, dass

$$M^2 = \omega_0^2/4 \mathbf{1}, \quad \omega_0 = -\gamma|\vec{B}_0|.$$

Bringen Sie den Operator U in die Form

$$U(t, 0) = \cos\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) - \frac{2i}{\omega_0} M \sin\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right).$$

b) Zur Zeit $t = 0$ befinde sich das System im Zustand $|\Psi(0)\rangle = |+\rangle$. Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}_{++}(t)$, mit der man den Zustand $|+\rangle$ zu einer beliebigen Zeit findet, durch

$$\mathcal{P}_{++}(t) = |\langle +|U(t, 0)|+\rangle|^2$$

gegeben ist und leiten Sie folgende Beziehung her

$$\mathcal{P}_{++}(t) = 1 - \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{\omega_0^2} \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right).$$

21. Aufgabe:

(a) Wir benutzen

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

Dann

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left(\langle \alpha | \frac{1}{2} | \alpha \rangle + \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle \right) = \hbar\omega \left(\alpha^* \alpha + \frac{1}{2} \right)$$

und

$$\langle H^2 \rangle = (\hbar\omega)^2 \left(\langle \alpha | a^\dagger a a^\dagger a | \alpha \rangle + \alpha^* \alpha + \frac{1}{4} \right)$$

Wir benutzen $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ und kommen auf

$$= (\hbar\omega)^2 \left(2\alpha\alpha^* + (\alpha\alpha^*)^2 + \frac{1}{4} \right)$$

Damit ist

$$(\Delta E)^2 = (\hbar\omega)^2 |\alpha|^2$$

(b) Wir benutzen

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad P = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a)$$

und erhalten recht schnell

$$\langle X \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* + \alpha) \quad \langle P \rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\alpha^* - \alpha)$$

(c) Benutze

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

und damit

$$c_n = \langle n | \alpha \rangle = \langle 0 | \frac{a^n}{\sqrt{n!}} | \alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

Die Normierungsbedingung führt auf

$$c_0^2 e^{\alpha^* \alpha} = 1 \implies c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{e^{-(|\alpha|^2)}}$$

(d)

$$P(n) = |\langle n | \alpha \rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-(|\alpha|^2)}$$

Dies ist eine Poissonverteilung und das Maximum liegt bei $[|\alpha|^2]$. Die Gaußklammern sind nötig, da α nicht zwangsläufig ganzzahlig ist.

(e) Für die Entwicklung von $|\alpha\rangle$ gilt:

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= U(t, 0) |\alpha\rangle = \sum_n e^{-\frac{iHt}{\hbar}} c_n |n\rangle \\ &= \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} c_n |n\rangle \\ \langle\alpha(t)| &= \sum_n \langle n| e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} c_n^* \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} X |\alpha(t)\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) |\alpha(t)\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} c_n (\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle) \\ \langle X \rangle (t) &= \langle\alpha(t)| X |\alpha(t)\rangle = \sum_{n,m} e^{\frac{it(E_m - E_n)}{\hbar}} c_n c_m^* \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} \langle m, n+1| + \sqrt{n} \langle m, n-1|) \\ &= \sum_n \left(e^{\frac{it(E_{n+1} - E_n)}{\hbar}} c_n c_{n+1}^* \sqrt{n+1} + e^{-\frac{it(E_n - E_{n+1})}{\hbar}} c_n c_{n-1}^* \sqrt{n} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(e^{it\omega} \sum_n e^{-|\alpha|^2} \alpha^* \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} + e^{-it\omega} \sum_n e^{-|\alpha|^2} \alpha \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (e^{it\omega} \alpha + e^{-it\omega} \alpha^*) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} |\alpha| (e^{it\omega + \varphi} + e^{-it\omega - \varphi}) \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\alpha| \cos(\omega t + \varphi) \end{aligned}$$

wobei $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$. Analog gehen wir auch bei der Rechnung für den Impuls vor.

$$\begin{aligned} \langle P \rangle (t) &= i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} |\alpha| (e^{it\omega + \varphi} - e^{-it\omega - \varphi}) \\ &= -\sqrt{2m\omega\hbar} |\alpha| \sin(\omega t + \varphi) \end{aligned}$$

22. Aufgabe:

(a) Wir bestimmen die Eigenwerte:

$$\det \begin{pmatrix} E_1 - X & W \\ W & E_2 - X \end{pmatrix} = E_1 E_2 - X(E_1 + E_2) + X^2 - W^2 \stackrel{!}{=} 0$$

Für die Eigenwerte ergibt sich also

$$X_{1,2} = \frac{1}{2} \left(E_1 + E_2 \pm \underbrace{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2}}_S \right)$$

Damit können wir die Eigenvektoren berechnen, wir führen dies exemplarisch für X_1 durch:

$$H - X_1 \mathbb{1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}E_1 - \frac{1}{2}E_2 - \frac{1}{2}S & W \\ W & -\frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 - \frac{1}{2}S \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - E_2 - S & 2W \\ 2W & E_2 - E_1 - S \end{pmatrix}$$

Der Eigenvektor ist also

$$v_1 = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2 + \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2}}{2W} \\ 1 \end{pmatrix}$$

und analog

$$v_2 = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2 - \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2}}{2W} \\ 1 \end{pmatrix}$$

(b) (1) Für $\frac{E_1}{W}, \frac{E_2}{W} \ll 1$:

$$X_{1,2} = \frac{1}{2} \left(E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left(E_1 + E_2 \pm W \sqrt{\underbrace{\frac{(E_1 - E_2)^2}{W^2} + 4}_{\approx 0}} \right) = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm W$$

und mit äquivalenter Umformung

$$v_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2}{2W} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle \pm |+\rangle$$

Hier ist die Kopplung so stark, dass die Energien in Relation zur Kopplung nur einen geringen Abstand haben. Die Eigenwerte werden um den Mittelwert der Energien verschoben, sind somit aber nur von W abhängig. Die Eigenvektoren sind nur noch von der Differenz $E_1 - E_2$ und nicht mehr von den Energien selbst abhängig. Die Kopplung führt zu einer Überlagerung von $|+\rangle$ und $|-\rangle$ im Grenzfall.

Für $\frac{E_1}{W}, \frac{E_2}{W} \gg 1$:

$$\begin{aligned} X_{1,2} &= \frac{1}{2} \left(E_1 + E_2 \pm E_1 E_2 \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{(E_1 E_2)^2} + \underbrace{\frac{4W^2}{(E_1 E_2)^2}}_{\approx 0}} \right) \\ &= \frac{1}{2} (E_1 + E_2 \pm |E_1 - E_2|) \\ &= E_{\pm} \end{aligned}$$

wobei $E_+ = \max(E_1, E_2)$ $E_- = \min(E_1, E_2)$

$$v_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2}{2W} \pm \frac{|E_1 - E_2|}{2W} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dafür ergibt sich je nachdem, ob $E_1 > E_2$ oder umgekehrt:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2}{W} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Hier sind die Eigenwerte einfach die Energien selbst, da die Kopplung keinen Einfluss mehr hat. Die Eigenvektoren sind wieder nur von $E_1 - E_2$ abhängig. Im Grenzfall gehen die Eigenvektoren auf

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(2) Für $E_1 \propto E_2$:

$$\begin{aligned} X_{1,2} &= \frac{1}{2} \left(E_1 + E_2 \pm \sqrt{\underbrace{(E_1 - E_2)^2}_{\approx 0} + 4W^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} (E_1 + E_2) \pm W \end{aligned}$$

mit derselben Umformung

$$v_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2}{2} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es ergeben sich dieselben Ergebnisse wie im Fall $E_1 \ll W, E_2 \ll W$, weil es

immer nur auf die Differenz ankommt. Auch hier führt die Kopplung im Grenzfall auf eine Überlagerung von $|+\rangle$ und $|-\rangle$.

(c) $E_1 = E_2 = E$

Eigenwerte: $E \pm W$

Eigenvektoren müssen normiert werden:

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \quad |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)$$

Entwickeln von $|+\rangle, |-\rangle$ nach Energie-Eigenzuständen

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

Zeitentwicklung von $|+\rangle$:

$$|+, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\frac{E+W}{\hbar}t} |\uparrow\rangle + e^{-i\frac{E-W}{\hbar}t} |\downarrow\rangle \right)$$

Die Wahrscheinlichkeit zu einem späteren Zeitpunkt $|-\rangle$ zu messen ist

$$P = |\langle -|U|+\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{Wt}{\hbar}\right)$$

23. Aufgabe:

(a) Es ist

$$H = -\vec{M}\vec{B} = \omega_x S_x + \omega_y S_y + \omega_z S_z$$

nach Definition. Dann

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar} = e^{-iMt}$$

mit

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_z & \omega_x - i\omega_y \\ \omega_x + i\omega_y & -\omega_z \end{pmatrix}$$

und

$$M^2 = \frac{1}{4}\omega_0^2 \mathbb{1}$$

indem man die Definition der S einsetzt. Entwickle die e -Funktion in U in eine Potenzreihe und benutze

$$\sum \frac{1}{(2n)!} ((-i)^2 M^2 t^2)^n = \mathbb{1} \sum \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right)^{2n} = \cos \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \mathbb{1}$$

$$\sum \frac{1}{(2n+1)!} ((-i)^2 M^2 t^2)^n (-i) M t = -\frac{2i}{\omega_0} M \sin \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right)$$

Daraus folgt die Behauptung sofort.

(b) Der Anfangszustand ist $|+\rangle$. Dann ist die Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P_{++} &= |\langle + | U(t, 0) | + \rangle|^2 \\ &= \left| \cos \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) - \frac{2i}{\omega_0} \sin \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \langle + | M | + \rangle \right|^2 \\ &= \left| \cos \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) - i \frac{\omega_z}{\omega_0} \sin \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \right|^2 \\ &= \cos^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) + \frac{\omega_z^2}{\omega_0^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \\ &= 1 - \sin^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \left(1 - \frac{\omega_z^2}{\omega_0^2} \right) \\ &= 1 - \sin^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2 - \omega_z^2}{\omega_0^2} \\ &= 1 - \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{\omega_0^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right) \end{aligned}$$

9. Übung

Aufgabe 1: Drehimpuls I

6 Punkte

Betrachten Sie einen Eigenzustand zu L_z und L^2 mit den Eigenwerten $\hbar m$ und $\hbar^2 l(l+1)$. Alle folgenden Erwartungswerte beziehen sich auf diesen Zustand.

- Zeigen Sie, daß $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$.
- Berechnen Sie $[L_x L_y, L_z]$ und verwenden Sie das Ergebnis, um zu zeigen, daß $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$.
- Berechnen Sie $\langle (\Delta L_x)^2 \rangle$. Kann ΔL_x verschwinden?
- Es sei $\vec{n}$ ein Einheitsvektor und $L_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{L}$ die Drehimpulskomponente in Richtung $\vec{n}$. Berechnen Sie $\langle L_{\vec{n}} \rangle$.

Aufgabe 2: Drehimpuls II

7 Punkte

Es sei eine Wellenfunktion der Form

$$\psi(\vec{x}) = f(r) \left(1 + \frac{x+y}{r} \right)$$

gegeben, wobei $r = |\vec{x}|$ und die Wellenfunktion ψ normiert ist.

Beantworten Sie für diesen Zustand die folgenden Fragen:

- Wie groß sind die Erwartungswerte von L_z und L^2 ?
- Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von L^2 die Werte $0, 2\hbar^2, 6\hbar^2$ zu finden?
- Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von L_z die Werte $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$ zu finden?

Aufgabe 3: Drehungen und Drehimpuls

7 Punkte

Die nachstehende Abbildung $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ stellt für $|\vec{n}|^2 = 1$ eine Drehung um $\vec{n}$ mit Drehwinkel ϕ dar:

$$R(\vec{n}, \phi)\vec{x} = (\vec{n} \cdot \vec{x})\vec{n} - \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{x}) \cos \phi + (\vec{n} \times \vec{x}) \sin \phi$$

- Berechnen Sie $R(\vec{n}, \phi)$ für einen infinitesimalen Winkel ϕ .
- Bestimmen Sie die Erzeugenden A_i

$$A_i = \frac{d}{d\phi} R(\vec{n}^{(i)}, \phi)|_{\phi=0}$$

der Drehung, wobei der Vektor $\vec{n}^{(i)}$ durch $n_j^{(i)} = \delta_{ij}$ gegeben ist.

- Berechnen Sie für die Operatoren $M_i = i\hbar A_i$ die Kommutatoren $[M_i, M_j]$.
- Zeigen Sie, daß

$$1 + \frac{i}{\hbar} \delta \vec{n} \cdot \vec{L}, \quad \vec{L} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

angewendet auf differenzierbare Funktionen $f(\vec{x})$ eine infinitesimale Drehung des Arguments erzeugt.

24. Aufgabe: Drehimpuls I

(a) Es ist zuerst einmal nach Definition der Basisvektoren

$$\langle L_+ \rangle = \langle l, m | L_+ | l, m \rangle = \langle l, m | \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} | l, m+1 \rangle = 0$$

da $m \neq m+1$ und die Vektoren eine ONB bilden. Aus dem selben Grund

$$\langle L_- \rangle = \langle l, m | L_- | l, m \rangle = \langle l, m | \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} | l, m-1 \rangle = 0$$

Damit ist

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2} \langle l, m | L_+ | l, m \rangle + \frac{1}{2} \langle l, m | L_- | l, m \rangle = 0$$

und

$$\langle L_y \rangle = \frac{1}{2i} \langle l, m | L_+ | l, m \rangle - \frac{1}{2} \langle l, m | L_- | l, m \rangle = 0$$

(b) Es ist nach den Regeln der Kommutatoren

$$[L_x L_y, L_z] = L_x [L_y, L_z] + [L_x, L_z] L_y = i\hbar L_x L_x - i\hbar L_y L_y = i\hbar (L_x^2 - L_y^2)$$

Gleichzeitig ist aber

$$L_x L_y = \frac{1}{4i} (L_+ + L_-)(L_+ - L_-) = (L_+^2 + L_- L_+ - L_+ L_- - L_-^2)$$

Die gemischten Produkte wurden schon in der Vorlesung berechnet. Man erhält

$$L_x L_y = \frac{1}{4i} (L_+^2 - L_-^2 + L^2 - L_z^2 - \hbar L_z - L^2 + L_z^2 - \hbar L_z^2 - L_-^2) = \frac{1}{4i} (L_+^2 - L_-^2 - 2\hbar L_z^2)$$

und daraus

$$[L_x L_y, L_z] = \frac{\hbar}{2i} (L_-^2 - L_+^2)$$

wobei die Vertauschungsrelationen von L_+ bzw. L_- mit L_z benutzt wurden. Vor allem ist aber

$$\langle L_+^2 \rangle = \langle l, m | L_+^2 | l, m \rangle = \langle l, m | \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \sqrt{l(l+1) - m(m+2)} | l, m+2 \rangle = 0$$

und für $\langle L_-^2 \rangle = 0$ analog. Damit

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle + \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\langle [L_x L_y, L_z] \rangle}_{=0} = \langle L_y^2 \rangle$$

(c) Mit dem Ergebnis oben ist

$$(\Delta L_x)^2 = \langle L_x^2 \rangle - \langle L_x \rangle^2 = \langle L_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle L_x^2 + L_y^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle)$$

Da der Zustand $|l, m\rangle$ Eigenzustand zu L^2 und L_z ist, ist dieser Erwartungswert jedoch sehr einfach:

$$\langle L^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1) \quad \langle L_z^2 \rangle = \hbar^2 m^2$$

und somit

$$(\Delta L_x)^2 = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2)$$

Fall 1: $m \neq 0$ Für m gilt dann nach Vorlesung

$$|m| \leq l \implies m^2 \leq l^2 < l(l+1)$$

und damit vor allem

$$m^2 \neq l(l+1)$$

Somit kann (ΔL_x) nie verschwinden.

Fall 2: $m = 0$ Für $l = 0$ ist auch $m = 0$ und damit auch $(\Delta L_x) = 0$. Dies ist der einzig mögliche Fall.

(d) Sei $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ vorgegeben. Dann ist

$$\langle L_{\vec{n}} \rangle = \langle n_1 L_x + n_2 L_y + n_3 L_z \rangle = n_1 \underbrace{\langle L_x \rangle}_{=0} + n_2 \underbrace{\langle L_y \rangle}_{=0} + n_3 \langle L_z \rangle = n_3 \langle l, m | L_z | l, m \rangle = n_3 m \hbar$$

25. Aufgabe: Drehimpuls II

Wir wählen als Basis die

$$\psi_{l,m}(\mathbf{r}) = Y_l^m(\theta, \phi)$$

mit ihren bekannten Eigenschaften

$$L^2 \psi_{l,m}(\mathbf{r}) = l(l+1) \hbar^2 \psi_{l,m}(\mathbf{r}) \quad L_z \psi_{l,m}(\mathbf{r}) = m \hbar \psi_{l,m}(\mathbf{r})$$

Wir wollen den gegebenen Zustand ψ nach diesen Basisvektoren entwickeln. Betrachtet man die ersten drei Kugelflächenfunktionen, so erkennt man

$$\psi(\mathbf{r}) = f(r) \left(1 + \frac{x+y}{r} \right) = f(r) \left(\sqrt{4\pi} \psi_{0,0}(\mathbf{r}) + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (1+i) \psi_{1,-1}(\mathbf{r}) - \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (1-i) \psi_{1,1}(\mathbf{r}) \right)$$

Beweis Der erste Teil ist recht simpel:

$$\sqrt{4\pi}\psi_{0,0} = \sqrt{4\pi}Y_0^0(\theta, \psi) = \sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{4\pi}} = 1$$

Für den zweiten Teil ergibt sich:

$$\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+i)\psi_{1,-1}(\mathbf{r}) - \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1-i)\psi_{1,1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sin(\theta) \left((1+i)e^{-i\phi} + (1-i)e^{i\phi} \right)$$

und mit der Exponentialdarstellung von Sinus und Cosinus

$$= \sin(\theta) \left(\frac{1}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) + \frac{1}{2i} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) \right) = \sin(\theta)(\cos(\phi) + \sin(\phi))$$

Dies ist aber gerade (in Kugelkoordinaten)

$$= \frac{\sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi}{r} = \frac{x + y}{r}$$

und damit die Behauptung.

(a) Mit dem Ergebnis von oben

$$\psi(\mathbf{r}) = f(r) \left(\sqrt{4\pi}\psi_{0,0}(\mathbf{r}) + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+i)\psi_{1,-1}(\mathbf{r}) - \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1-i)\psi_{1,1}(\mathbf{r}) \right)$$

erhält man

$$\langle L^2 \rangle = \langle \psi | L^2 | \psi \rangle$$

und da die $\psi_{l,m}$ jeweils orthogonal sind und zusätzlich noch Eigenvektoren zu L^2 mit Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ ergibt sich:

$$\langle L^2 \rangle = \int_0^\infty r^2 |f(r)|^2 \frac{2\pi}{3} (2\hbar^2 + 2\hbar^2) dr = \frac{16\pi}{3} \hbar^2 \int_0^\infty r^2 |f(r)|^2 dr = \frac{16\pi}{3} \hbar^2 \|f\|^2$$

und für L_z analog (diesmal mit den Eigenwerten $m\hbar$)

$$\langle L_z \rangle = \hbar \|f\|^2 \frac{2\pi}{3} (2 - 2) = 0$$

(b) Zu $l=0$ gehört $|f \cdot \psi_{0,0}\rangle$ und damit

$$P_0 = |\langle f \cdot \psi_{0,0} | \psi \rangle|^2 = |\sqrt{4\pi}|^2 \|f\|^2 = 4\pi \|f\|^2$$

Zu $l = 1$ gehört $|f \cdot \psi_{1,0}\rangle$, $|f \cdot \psi_{1,1}\rangle$ und $|f \cdot \psi_{1,-1}\rangle$ und damit

$$P_{2\hbar^2} = \|f\|^2 \frac{2\pi}{3} (2 + 2) = \|f\|^2 \frac{8\pi}{3}$$

Für die Messung von $6\hbar^2$ kämen alle Eigenvektoren mit $l = 3$ in Frage. Diese sind allerdings in ψ überhaupt nicht enthalten. Deshalb

$$P_{6\hbar^2} = 0$$

Nebenbemerkung: Da die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 sein muss, ergibt sich hiermit auch

$$\|f\|^2 = \frac{3}{20\pi}$$

und damit als Erwartungswert für L^2

$$\langle L^2 \rangle = \frac{4}{5} \hbar^2$$

mit den Wahrscheinlichkeiten $P_0 = 3/5$ und $P_{2\hbar^2} = 2/5$.

- (c) Wir gehen vor wie oben. Zu 0 gehört $m = 0$ und damit in unserem Fall nur der Anteil mit $\psi_{0,0}$. Also

$$P_0 = 4\pi \|f\|^2 = \frac{2}{5}$$

Zu $\pm\hbar$ gehören in unserem Fall $\psi_{1,1}$ und $\psi_{1,-1}$, also

$$P_{+\hbar} = \|f\|^2 \frac{4\pi}{3} = \frac{1}{5} = P_{-\hbar}$$

Für $\pm 2\hbar$ gibt es wieder keine dazugehörige Eigenfunktion in ψ , deshalb

$$P_{\pm 2\hbar} = 0$$

26. Aufgabe: Drehungen und Drehimpuls

- (a) Für $\phi \ll 1$ ist

$$\cos \phi \approx 1 \quad \sin \phi \approx \phi$$

und damit

$$R(\vec{n}, \phi) \vec{x} \approx (\vec{n} \cdot \vec{x}) \vec{n} - \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{x}) + (\vec{n} \times \vec{x}) \phi$$

Nach der bac-cab-Regel ist dies

$$= (\vec{n} \cdot \vec{x})\vec{n} - \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + \underbrace{\vec{x}(\vec{n} \cdot \vec{n})}_{=\|\vec{n}\|^2=1} + (\vec{n} \times \vec{x})\phi = \vec{x} + (\vec{n} \times \vec{x})\phi$$

(b) Es ist

$$\frac{d}{d\phi} R(\vec{n}, \phi)\vec{x} = \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{x}) \sin \phi + (\vec{n} \times \vec{x}) \cos \phi$$

und für $\phi = 0$:

$$\left. \frac{d}{d\phi} R(\vec{n}, \phi)\vec{x} \right|_{\phi=0} = \vec{n} \times \vec{x}$$

Also ist die Erzeugende gerade

$$A_i = \vec{n}^{(i)} \times \vec{x} = \sum_{j,k} \varepsilon_{j,i,k} x_k \vec{n}^{(j)}$$

Schreibt man die A_i in eine Matrix, so ergibt sich

$$(A_1|A_2|A_3)\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 & x_3 & -x_2 \\ -x_3 & 0 & x_1 \\ x_2 & -x_1 & 0 \end{pmatrix}$$

(c) Es ist

$$[A_i, A_j]\vec{x} = A_i A_j \vec{x} - A_j A_i \vec{x} = A_i(\vec{n}^{(j)} \times \vec{x}) - A_j(\vec{n}^{(i)} \times \vec{x}) = \vec{n}^{(i)} \times (\vec{n}^{(j)} \times \vec{x}) - \vec{n}^{(j)} \times (\vec{n}^{(i)} \times \vec{x})$$

Das letzte vorkommende Kreuzprodukt vertauschen wir - damit ändert sich auch das Vorzeichen. Dann wenden wir die Jacobi-Identität an:

$$= \vec{n}^{(i)} \times (\vec{n}^{(j)} \times \vec{x}) + \vec{n}^{(j)} \times (\vec{x} \times \vec{n}^{(i)}) = -\vec{x} \times (\vec{n}^{(i)} \times \vec{n}^{(j)}) = -\varepsilon_{ijk} \vec{x} \times \vec{n}^{(k)}$$

da die $\vec{n}^{(i)}$ trivialerweise eine Basis bilden. Dies ist aber gerade

$$= \varepsilon_{ijk} \vec{n}^{(k)} \times \vec{x} = \varepsilon_{ijk} A_k$$

und damit

$$[M_i, M_j] = (i\hbar)^2 [A_i, A_j] = (i\hbar)(i\hbar)\varepsilon_{ijk} A_k = \varepsilon_{ijk} i\hbar M_k$$

(d) Wenden wir

$$D = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \vec{n} \cdot \vec{L} = 1 + \delta \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla})$$

auf eine Funktion $f(\vec{x})$ an, so erhalten wir

$$Df(\vec{x}) = f(\vec{x}) + \delta \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \text{grad } f(\vec{x}))$$

Wenn wir das Argument jedoch direkt drehen, erhalten wir (da δ klein genug ist):

$$f(R(\vec{n}, \delta)\vec{x}) = f(\vec{x} + (\vec{n} \times \vec{x})\delta)$$

und nach einer Taylorentwicklung um $\phi = 0$:

$$f(R\vec{x}) \approx f(\vec{x}) + \text{grad } f(\vec{x}) \cdot (\vec{n} \times \vec{x})\delta = f(\vec{x}) + \delta \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \text{grad } f(\vec{x}))$$

und damit die Behauptung.

10. Übung

Informationen:

- Melden Sie sich im Studierendenportal für die Vorleistungen an.
- Die Klausur findet am 21.07.2012 von 13:00 Uhr bis 16:00 Uhr im Audimax und im Gaede-Hörsaal statt.
- Die Anmeldung zur Klausur ist am 18. und 19.07.2012 über das Studierendenportal möglich.
- Falls Sie sich nicht über das Studierendenportal anmelden können, melden Sie sich per E-Mail an peter.marquard@kit.edu für die Klausur an.

Aufgabe 1: Zweidimensionaler harmonischer Operator

10 Punkte

Betrachten Sie den zweidimensionalen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_x + H_y, \quad H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad H_y = \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2$$

- a) Geben Sie die Eigenwerte und Eigenfunktionen an. Geben Sie den Grad der Entartung der Zustände an. Bilden $\{H\}$ oder $\{H_x, H_y\}$ vollständige Sätze kommutierender Operatoren?
- b) Betrachten Sie nun zusätzlich Eigenzustände zum Drehimpulsoperator $L_z = XP_y - YP_x$. Zeigen Sie, dass sich L_z mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren wie folgt schreiben lässt:

$$L_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y).$$

Wie lässt sich H durch Auf- und Absteigeoperatoren ausdrücken? Kommutieren H und L_z ?

- c) Betrachten Sie nun die Operatoren

$$a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y),$$

$$a_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y).$$

Wie wirken a_d und a_g auf einen Eigenzustand $|n_x, n_y\rangle$.

Drücken Sie H und L_z durch diese Operatoren aus.

Hinweis: Verwenden Sie die Teilchenzahloperatoren $N_d = a_d^\dagger a_d$ und $N_g = a_g^\dagger a_g$.

- d) Benutzen Sie nun die Basis, die von den Eigenzuständen zu N_d und N_g aufgespannt wird. Analog zu a_x und a_y gilt:

$$|n_d, n_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_d! n_g!}} (a_d^\dagger)^{n_d} (a_g^\dagger)^{n_g} |0, 0\rangle.$$

Bildet $\{N_d, N_g\}$ einen vollständigen Satz kommutierender Observablen? Wie lassen sich diese Zustände durch die Energie- und Drehimpulsquantenzahlen n und m beschreiben. Bilden H und L_x einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren?

Aufgabe 2: Der starre Rotator

5 Punkte

Der Hamiltonoperator eines starren Rotators ist gegeben durch

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}.$$

Hier bezeichnet $\vec{L}$ den Drehimpulsoperator und I das Trägheitsmoment.

- Geben Sie die Energieeigenwerte und Eigenzustände des Rotators an.
- Der starre Rotator befinde sich zu einem bestimmten Zeitpunkt in einem Zustand, der durch die Wellenfunktion

$$u(\theta, \phi) = N(\sin \theta \sin \phi + \sin \theta \cos \phi + \sqrt{3} \cos \theta) \quad (1)$$

beschrieben wird, wobei N ein Normierungsfaktor sei. Bestimmen Sie N .

Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Drehimpulsquadrates $\vec{L}^2$ den Wert $2\hbar^2$ und gleichzeitig für die z -Komponente des Drehimpulses den Wert Null zu finden?

- Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie im Zustand $u(\theta, \phi)$.

Aufgabe 3: Bessel- und Neumannfunktionen

5 Punkte

Mit Hilfe der dimensionslosen Variablen $\rho = kr$, $\hbar^2 k^2 = 2mE$ lautet die radiale Schrödingergleichung für ein freies Teilchen

$$T_l R_l(\rho) = \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0.$$

Ihre Lösungen lauten

$$j_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad n_l = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right).$$

- Prüfen Sie nach, dass diese Funktionen die Gleichung lösen.
Hinweis: Benutzen Sie vollständige Induktion. Versuchen Sie in $T_l j_l$ bzw. $T_l n_l$ den Faktor $\rho^{-1} d/d\rho$ nach links durchzukommutieren und auf den Ausdruck $[(l-1)\rho^{-1} - d/d\rho] T_{l-1} j_{l-1}(\rho)$ (bzw. $[(l-1)\rho^{-1} - d/d\rho] T_{l-1} n_{l-1}(\rho)$) zu kommen.
- Untersuchen Sie das Verhalten der Funktionen j_l und n_l für sehr kleine und sehr große Werte von ρ .

27. Aufgabe: Zweidimensionaler harmonischer Operator

- (a) In einer Dimension hatten wir die Gleichung schon in der Vorlesung gelöst. Die Eigenfunktionen waren in x -Richtung

$$|\phi_x\rangle \quad \phi_x(X) = \frac{N_0}{\sqrt{n!2^n}} H_n(\hat{X}) e^{-\hat{X}^2/2}$$

mit den Eigenwerten

$$E_x = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

und analog in y -Richtung:

$$|\phi_y\rangle \quad \phi_y(Y) = \frac{N_0}{\sqrt{n!2^n}} H_n(\hat{Y}) e^{-\hat{Y}^2/2} \quad E_y = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Der Zustand $|\phi_{xy}\rangle$ mit

$$\phi_{xy}(X, Y) = \phi_x(X) \cdot \phi_y(Y)$$

erfüllt jetzt die gewünschten Bedingungen, denn

$$H |\phi_{xy}\rangle = (H_x + H_y) |\phi_{xy}\rangle = |\phi_y\rangle H_x |\phi_x\rangle + |\phi_x\rangle H_y |\phi_y\rangle$$

Da P_x und X mit Y vertauscht und auch P_y und Y mit X . Dies ist aber gerade

$$= E_x |\phi_x\rangle |\phi_y\rangle + E_y |\phi_x\rangle |\phi_y\rangle = (E_x + E_y) |\phi_{xy}\rangle$$

Also sind die Eigenfunktionen $|\phi_{xy}\rangle$ mit

$$|\phi_{xy}\rangle = |\phi_x\rangle |\phi_y\rangle$$

mit den dazugehörigen Eigenwerten

$$E = E_x + E_y = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

Wir können ein neues n definieren, mit $n = n_x + n_y$ und dann schreiben

$$E_m = \hbar\omega(n + 1)$$

Zu einem gegebenen n gibt es mehrere Möglichkeiten, n_x und n_y zu wählen. Halte dazu n fest. Dann gibt es für n_x alle Werte $0 \leq n_x \leq n - 1$ zu erreichen (n

Möglichkeiten). Damit die Summe jedoch n ergibt, muss damit

$$n_y = n - n_x$$

sein und damit gibt es nur noch eine Möglichkeit. Zu gegebenen n gibt es also n Möglichkeiten. Der Grad der Entartung ist n . Damit kann H keinen vSkO bilden. H_x und H_y jedoch schon (dass sie kommutieren ist trivial), da ein Zustand durch seine Energiewerte in x - und y -Richtung eindeutig festgelegt wird.

(b) Es ist

$$a_x^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X - \frac{i}{m\omega} P_x \right) \quad a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X + \frac{i}{m\omega} P_x \right)$$

und für y analog. Dann

$$a_x a_y^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(XY + \frac{i}{m\omega} X P_y - \frac{i}{m\omega} Y P_x + \frac{1}{m^2 \omega^2} P_x P_y \right)$$

Da die Operatoren von x mit denen von y vertauschen und

$$a_x^\dagger a_y = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(XY - \frac{i}{m\omega} X P_y + \frac{i}{m\omega} Y P_x + \frac{1}{m^2 \omega^2} P_x P_y \right)$$

und damit

$$a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y = \frac{i}{2\hbar} (2X P_y - 2Y P_x)$$

und so die Behauptung. Wie wir aus der Vorlesung wissen gilt in einer Dimension

$$H_x = \hbar\omega \left(a_x^\dagger a_x + \frac{1}{2} \right) \quad H_y = \hbar\omega \left(a_y^\dagger a_y + \frac{1}{2} \right)$$

und damit

$$H = H_x + H_y = \hbar\omega (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1)$$

Es ist

$$[a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y, a_x a_y^\dagger] = a_x^\dagger a_x a_x a_y^\dagger + a_y^\dagger a_y a_x a_y^\dagger - a_x a_y^\dagger a_x^\dagger a_x - a_x a_y^\dagger a_y^\dagger a_y$$

und da a_x mit a_y vertauscht

$$= [a_x^\dagger, a_x] a_x a_y^\dagger + a_x a_y^\dagger [a_y, a_y^\dagger] = -a_x a_y^\dagger + a_y a_y^\dagger = 0$$

und analog

$$[a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y, a_x^\dagger a_y] = a_x a_y^\dagger - a_y a_y^\dagger = 0$$

Somit gilt auch

$$[L_z, H] = 0$$

(c) Aus den Definitionen von a_d und a_g folgt sofort

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_d + a_g) \quad a_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_d - a_g)$$

Sei $|n_x, n_y\rangle$ ein Eigenzustand. Dann ist

$$a_d |n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y) |n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n_x} |n_x - 1, n_y\rangle - i\sqrt{n_y} |n_x, n_y - 1\rangle)$$

und analog

$$a_g |n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n_x} |n_x - 1, n_y\rangle + i\sqrt{n_y} |n_x, n_y - 1\rangle)$$

Es ergeben sich also (in Analogie zu a_x und a_y) stationäre Zustände, deren Energie um einen Quant $\hbar\omega$ verringert sind. Aus der Definition von a_d und a_g folgt:

$$a_d^\dagger a_d = \frac{1}{2} (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y - ia_x^\dagger a_y + ia_x a_y^\dagger)$$

$$a_g^\dagger a_g = \frac{1}{2} (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + ia_x^\dagger a_y - ia_x a_y^\dagger)$$

Damit lässt sich H und L_z sofort darstellen mit

$$H = \hbar\omega(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) = \hbar\omega(a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + 1)$$

und

$$L_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y) = \hbar(a_d^\dagger a_d - a_g^\dagger a_g)$$

oder mit den Besetzungszahloperatoren

$$H = \hbar\omega(N_d + N_g + 1) \quad L_z = \hbar(N_d - N_g)$$

(d) Offensichtlich lässt sich allein durch Angabe eines Paares (n_d, n_g) der Zustand komplett und eindeutig charakterisieren. Also bilden $\{N_d, N_g\}$ ein v.S.k.O. (die Kommutation ist trivial; betrachte einfach die a_g und a_d die trivialerweise kommutieren). Betrachte

$$H |n_d, n_g\rangle = \hbar\omega(N_d + N_g + 1) |n_d, n_g\rangle = \hbar\omega(n_d + n_g + 1) |n_d, n_g\rangle$$

und

$$L_z |n_d, n_g\rangle = \hbar(N_d - N_g) |n_d, n_g\rangle = \hbar(n_d - n_g) |n_d, n_g\rangle$$

Setzen wir also

$$n = n_d + n_g \quad m = n_d - n_g$$

dann gilt

$$H |n_d, n_g\rangle = \hbar\omega(n + 1) |n_d, n_g\rangle \quad L_z |n_d, n_g\rangle = \hbar m |n_d, n_g\rangle$$

Somit sind die $|n_d, n_g\rangle$ auch Eigenzustände zu H und L_z mit den Quantenzahlen n und m . Betrachtet man umgekehrt ein System mit den Quantenzahlen n und m , so ist die (bis auf einen Faktor natürlich) eindeutig festgelegt, denn aus n und m lassen sich eindeutig über

$$n_d = \frac{n + m}{2} \quad n_g = \frac{n - m}{2}$$

die Besetzungszahlen n_d und n_g bestimmen und damit dann eindeutig der Zustand mit der Formel auf dem ÜB. Somit bilden H und L_z ein vSkO.

28. Aufgabe: Der starre Rotator

- (a) Wie wir aus der Vorlesung wissen sind die Eigenwerte des Drehimpulsvektors im Quadrat gegeben durch

$$\vec{L}^2 \psi_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) \psi_l$$

mit den Eigenfunktionen

$$\psi_{l,m} = Y_l^m(\theta, \phi) \leftrightarrow |l, m\rangle$$

wenn $Y_{l,m}$ die Kugelflächenfunktionen sind ($|l, m\rangle$ ist die algebraische Darstellung). Da die Multiplikation mit dem Faktor $1/2I$ daran nichts ändert, sind die Y_l^m auch Eigenfunktionen von H , denn

$$HY_l^m = \frac{1}{2I} \vec{L}^2 Y_l^m = \frac{1}{2I} \hbar^2 l(l+1) Y_l^m$$

Damit sind die Y_l^m auch Eigenfunktion zu H , jetzt jedoch mit den Eigenwerten

$$\lambda_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

- (b) Wir entwickeln die Funktion wieder in Kugelflächenfunktionen. Diese Entwicklung

ist gegeben durch

$$u(\theta, \phi) = N\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left((i-1)Y_1^1(\theta, \phi) + (i+1)Y_1^{-1}(\theta, \phi) \right) + N\sqrt{4\pi}Y_1^0(\theta, \phi)$$

Den ersten Teil kennen wir schon aus Übungsblatt 9, der zweiten Teil ergibt sich einfach durch Einsetzen von Y_1^0 . Wir definieren

$$a_{10} = \sqrt{4\pi} \quad a_{11} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i-1) \quad a_{1,-1} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)$$

Dann ist

$$u = N(a_{10}Y_1^0 + a_{11}Y_1^1 + a_{1,-1}Y_1^{-1})$$

Da die Kugelflächenfunktionen nach Definition orthonormiert sind, ist

$$\|u\|^2 = \langle u|u \rangle = N^2 (|a_{10}|^2 + |a_{11}|^2 + |a_{1,-1}|^2) = N^2 \left(\frac{2\pi}{3}2 + \frac{2\pi}{3}2 + 4\pi \right) = \frac{20\pi}{3}N^2$$

Damit dies 1 ergibt, muss also

$$N = \sqrt{\frac{3}{20\pi}}$$

gelten. Bei einer Messung von $2\hbar^2$ für $\vec{L}^2$ und 0 für L_z ist das System im Zustand

$$l = 1, m = 0$$

Dies entspricht der Kugelflächenfunktion Y_1^0 . Also ist die Wahrscheinlichkeit, diese Messergebnisse zu erhalten, gegeben durch

$$P_{2\hbar^2,0} = |\langle Y_1^0|u \rangle|^2 = N^2|a_{10}|^2 = 4\pi N^2 = \frac{3}{5}$$

(c) Der einzige auftretende Eigenwert der Energie ist

$$\lambda_1 = \frac{2\hbar^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{I}$$

Das ist demnach auch der Energieeigenwert

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{I}$$

29. Aufgabe: Bessel- und Neumannfunktionen

$$T_l R_l(\rho) = \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0$$

Vollständige Induktion über l *Induktionsanfang*: Für $l=0$ erhalten wir $j_0(\rho) = \frac{\sin(\rho)}{\rho}$, $\frac{dj_0}{d\rho}(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} - \frac{\sin^2 \rho}{\rho^2}$, $\frac{d^2 j_0}{d\rho^2}(\rho) = -\frac{\sin \rho}{\rho} + \frac{2 \cos \rho}{\rho^2} + \frac{2 \sin \rho}{\rho^3}$

Also

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 \right] j_0(\rho) = 0$$

$n_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho}$, $\frac{dn_0}{d\rho}(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} + \frac{\cos \rho}{\rho^2}$, $\frac{d^2 n_0}{d\rho^2} = \frac{\cos \rho}{\rho} - \frac{2 \sin \rho}{\rho^2} + \frac{2 \cos \rho}{\rho^3}$ Also

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 \right] n_0(\rho) = 0$$

Induktionsannahme Die Annahme gilt für ein beliebig aber festes $l \in \mathbb{N}$

Induktionsschritt

$$\begin{aligned}
T_{l+1}j_{l+1} &= \left[T_l - \frac{2(l+1)}{\rho^2} \right] (-\rho)^{l+1} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l+1} \frac{\sin \rho}{\rho} \\
j_{l+1} &= (-\rho)^{l+1} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \frac{(-\rho)^l}{(-\rho)^l} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \\
&= (-\rho)^{l+1} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \frac{1}{(-\rho)^l} j_l(\rho) \\
&= -\rho^l \frac{d}{d\rho} \frac{1}{\rho^l} j_l(\rho) \\
&= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] j_l(\rho) \\
T_{l+1} \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] &= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] T_{l+1} + \left[T_{l+1}, -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] \\
\left[T_{l+1}, -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] &= \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2} + 1, -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] \\
&= \left[\frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2}, -\frac{d}{d\rho} \right] + \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho}, \frac{l}{\rho} \right] \\
\left[\frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2}, -\frac{d}{d\rho} \right] &= \frac{d}{d\rho} \left(\frac{2}{\rho} \right) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} \left(\frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2} \right) \\
&= -\frac{2}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} + \frac{2(l+1)(l+2)}{\rho^3} \\
\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho}, \frac{l}{\rho} \right] &= \left[\left(\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{d\rho} \right)^2, \frac{l}{\rho} \right] \\
&= \left[\frac{1}{\rho} \frac{d^2 \rho}{d\rho^2}, \frac{l}{\rho} \right] \\
&= l \left[\frac{1}{\rho} \frac{d^2 \rho}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2 \rho}{d\rho^2} \right] \\
&= l \left[\frac{1}{l} \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \right] \\
&= -\frac{2l}{\rho^2} \frac{d}{d\rho}
\end{aligned}$$

Zurück zur Vertauschung

$$\begin{aligned}
T_{l+1} \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] &= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] \left[T_l - \frac{2(l+1)}{\rho^2} \right] - \frac{2}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} + \frac{2(l+1)(l+2)}{\rho^3} - \frac{2l}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \\
&= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] T_l + 2(l+1) \left(-\frac{2}{\rho^3} + \frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{2l(l+1)}{\rho^3} - \frac{2(l+1)}{\rho^2} \frac{d\rho}{d\rho} \frac{(l+1)(l+2)}{\rho^3} \\
&= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] T_l \frac{2}{\rho^3} (-2(l+1) - l(l+1) + (l+1)(l+2)) \\
&= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] T_l
\end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned}
T_{l+1} j_{l+1} &= \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] T_l j_l(\rho) \\
&\stackrel{IA}{=} \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right] \cdot 0 \\
&= 0
\end{aligned}$$

Der Beweis für n geht gleich.

Nun zu kleinen und großen ρ

$\rho \ll 1$

$$\begin{aligned}
j_l(\rho) &= (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \\
&= (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \rho^{2n} \\
&= (-\rho)^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2n+1}}{(2n+1)!} \prod_{k=n-l+1}^n (2k) \rho^{2(n-l)} \\
\Rightarrow j_l(\rho) &\stackrel{\rho \ll 1}{=} (-\rho)^l \left[\frac{(-1)^l}{(2l+1)!} \prod_{k=1}^l (2k) + O(\rho^2) \right] \\
&= \frac{\exp(\rho)}{(2l+1)!!}
\end{aligned}$$

$$n_\rho \approx -(2\rho - 1)!! \exp(-\rho - 1)$$

Nun $\rho \gg 1$

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-\rho)^l \frac{1}{\rho^{l+1}} \frac{d^l}{d\rho^l} \sin(\rho) + O(\rho^{-1}) \\ &= \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \\ n_l(\rho) &\approx \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

11. Übung

Aufgabe 1: Wasserstoffradialwellenfunktion

6 Punkte

Der Radialanteil $R_{nl}(r)$ der Wellenfunktion $\langle \vec{r} | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega)$ für das Wasserstoffatom ist durch

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{((n+l)!)^3}} a_0^{-3/2} F_{nl}\left(\frac{2r}{na_0}\right),$$

$$F_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

gegeben. Dabei lauten für $p, k \in \mathbb{N}_0$ die Laguerre-Polynome

$$L_p^k(\rho) = \frac{(p+k)!}{p!} \frac{e^\rho}{\rho^k} \frac{d^p}{d\rho^p} (\rho^{p+k} e^{-\rho})$$

und erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\frac{p!}{[(p+k)!]^3} \int_0^\infty d\rho \rho^k e^{-\rho} L_p^k(\rho) L_{p'}^k(\rho) = \delta_{p,p'}$$

a) Berechnen Sie den Erwartungswert des Operators $1/R$ für die Zustände $|n, l, m\rangle$.

b) Verifizieren Sie den Virialsatz

$$2\langle E_{kin} \rangle = -\langle V \rangle$$

unter Verwendung Ihres Ergebnisses aus a).

Aufgabe 2: Korrespondenzprinzip

8 Punkte

Wir wollen das Korrespondenzprinzip am Beispiel des Wasserstoffatoms veranschaulichen. Dazu betrachten wir die Summe aus Zentrifugal- und Coulombpotential für $l = n - 1$ mit $l \neq 0$:

$$V(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

a) Für welchen Wert r_m nimmt $V(r)$ sein Minimum an? Vergleichen Sie diesen Wert mit dem Erwartungswert des Operators R und ebenso $1/r_m$ mit dem Erwartungswert des Operators $1/R$. Bilden Sie den Limes großer n .

b) Vergleichen Sie $V(r_m)$ mit dem exakten Wert $\langle V \rangle$ für die Bindungsenergie.

Aufgabe 3: Potentialtopf

6 Punkte

Ein Teilchen befinde sich in einem kugelförmigen Potentialtopf vom Radius a mit der Form

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r \geq a \end{cases}$$

Die Radialanteile der Eigenzustände sind die (bei $r = 0$ regulären) sphärischen Besselfunktionen $j_l(k_{nl}r)$, wobei die k_{nl} auf einfache Weise mit den Energiewerten E_{nl} zusammenhängen.

Aus welcher Gleichung entnimmt man die k_{nl} , bzw. die E_{nl} ? Welchen Wert haben die E_{nl} für $l = 0$? Welches ist der niedrigste Eigenwert für $l = 1$ bzw. $l = 2$?

30. Aufgabe: Wasserstoffradialwellenfunktion

(a) Es ist

$$\langle 1/R \rangle = \int d\Omega r^2 dr Y_{lm}(\Omega)^* Y_{lm}(\Omega) R_{nl}(r) 1/r R_{nl}(r)$$

Die Kugelflächenfunktionen sind schon normiert, weshalb sich das Integral vereinfacht auf:

$$= \int r R_{nl}^2(r) = \frac{4}{n^2} \left(\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \right) a_0^{-3} \int r \rho^{2l} e^{-\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) dr$$

Wie setzen zur Abkürzung

$$k = 2l + 1 \quad p = n - l - 1$$

und setzen die Definition von ρ in r ein:

$$r = \frac{\rho}{2} n a_0 \quad dr = d\rho \frac{1}{2} n a_0$$

Damit erhält man

$$= \frac{4}{n^2} \left(\frac{p!}{[(k+p)!]^3} \right) a_0^{-3} \left(\frac{n a_0}{2} \right)^2 \int \rho \rho^{2l} e^{-\rho} L_p^k(\rho) L_p^k(\rho) d\rho$$

Wie man erkennt ist dies genau die Orthogonalitätsbedingung auf dem Übungsblatt, also

$$\langle 1/R \rangle = \frac{4}{n^2} a_0^{-3} \left(\frac{n a_0}{2} \right)^2 \delta_{kk} = \frac{1}{a_0 n^2}$$

(b) Mit dem Ergebnis von der Aufgabe davor, ist

$$\langle V \rangle = -e^2 \langle 1/R \rangle = -\frac{e^2}{a_0 n^2} = -\frac{2E_I}{n^2}$$

Die Gesamtenergie beträgt (als Eigenwert des Hamiltonoperators)

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}$$

Da die Summe aus kinetischer Energie und potentieller Energie natürlich die Gesamtenergie ist

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle + \langle V \rangle = \langle E \rangle = -\frac{E_I}{n^2}$$

gilt

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{E_I}{n^2}$$

und daraus folgt die Behauptung

$$2\langle E_{\text{kin}} \rangle = -\langle V \rangle$$

31. Aufgabe: Korrespondenzprinzip

(a) Es ist

$$\frac{dV}{dr} = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2}$$

Damit dies Null ergibt, muss für r gelten:

$$-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} + e^2 r = 0 \iff r = r_m = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{me^2} = a_0 l(l+1)$$

Dass dies ein Minimum ist, erkennt man aufgrund der einfachen Form der Ableitung. Für den gegebenen Wert für $l = n - 1$ ist dies

$$\begin{aligned} r_m &= a_0 n(n-1) \\ \implies \frac{1}{r_m} &= \frac{1}{a_0 n(n-1)} \end{aligned}$$

Wir berechnen den Erwartungswert von R

Betrachte R_{nl} für $n-1 = l$ also $R_{n,n-1}$

$\implies$ es geht ein $F_{n,n-1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) = \rho^{n-1} e^{-\frac{\rho}{2}} L_0^{2n-1}$

$$L_0^{2n-1}(\rho) = (2n-1)! \frac{e^\rho}{\rho^{2n-1}} \rho^{2n-1} e^{-\rho} = (2n-1)!$$

$$\begin{aligned} \langle nlm | R | nlm \rangle &= \int_0^\infty \frac{4}{n^4 (2n-1)!^3} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^{2(n-1)} e^{-\frac{2r}{na_0}} (2n-1)!^2 r^3 dr \\ &= \frac{4}{n^4 (2n-1)!} a_0^{-3} \left(\frac{2}{na_0} \right)^{2(n-1)} \int_0^\infty r^{2n+1} e^{-\frac{2r}{na_0}} dr \\ &= \frac{4}{n^4 (2n-1)!} a_0^{-3} \left(\frac{2}{na_0} \right)^{2(n-1)} (2n+1)! \left(\frac{2r}{na_0} \right)^{-2n-2} \\ &= \frac{4}{n^4} a_0^{-3} (2n+1) 2n \left(\frac{na_0}{2} \right)^4 \\ &= a_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) n \end{aligned}$$

$$\left\langle \frac{1}{R} \right\rangle = \frac{1}{a_0 n^2}$$

Für große n :

$$r_n \simeq a_0 n^2 \simeq \langle R \rangle$$

$$\frac{1}{r_m} \simeq \frac{1}{a_0 n^2} \simeq \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle$$

(b)

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle - e^2 \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle$$

mit

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle = \frac{1}{a_0^2 n^3 (n - \frac{1}{2})}$$

$$\langle V \rangle = \frac{e^2}{2} a_0 (n-1) n \frac{1}{a_0^2 n^3 (n - \frac{1}{2})} - \frac{e^2}{a_0 n^2}$$

$$= -\frac{e^2}{a_0 n (2n-1)} = -\frac{mc^4}{\hbar^2 n (2n-1)}$$

$$V(r_m) = -\frac{e^2}{2a_0 (n-1)n}$$

für $n \gg 1$

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \simeq V(r_m)$$

32. Aufgabe: Potentialtopf

Das Potential ist gegeben durch

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r < a \\ \infty & \text{für } r \geq a \end{cases}$$

Wir stellen die Schrödingergleichung in sphärischen Koordinaten auf:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r)$$

Wir führen die Größen k, ρ ein, so dass $\rho = kr$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Innerhalb der Kugel

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) \tilde{R}(\rho) = 0$$

$$\tilde{R}(\rho) = R(r(\rho))$$

Die Lösungen waren auf dem vorherigen Übungsblatt

Die Lösungen erfüllen $\rho \tilde{R}(\rho) \rightarrow 0$ für $\rho \rightarrow 0$

$\tilde{R}(\rho)$ sind die Funktion $j_l(\rho)$

Quantisierung aus der Randbedingung $\tilde{R}(a) = 0$

$$\implies j_l(ka) = 0$$

α_{nl} sei n -te Nullstelle von j_l , $j_l(\alpha_{nl}) = 0$, dann $k_{nl}a = \alpha_{nl}$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \alpha_{nl}^2}{2ma^2}$$

Für $l = 0$:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \alpha_{n0} = n\pi, n = 1, 2, \dots$$

$$E_{n0} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

$$E_{l0} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = 4.93 \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Für $l = 1$: niedrigster Eigenwert für $\alpha_{11} = 4.49$

$$E_{11} = 10.08 \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Für $l = 2$: $\alpha_{12} = 5.76$

$$E_{12} = 16.59 \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

12. Übung

Aufgabe 1: Addition von Drehimpulsen

6 Punkte

Betrachten Sie den Produktraum von zwei Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen

$$\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\} \quad (1)$$

und die Drehimpulsoperatoren $\vec{L}_1^2, \vec{L}_2^2, L_{1,z}, L_{2,z}$ mit

$$\vec{L}_1^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \vec{L}_2^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle,$$

$$L_{1,z}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_1\frac{\hbar}{2}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle, \quad L_{2,z}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_2\frac{\hbar}{2}|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle.$$

Betrachten Sie nun den Gesamtdrehimpuls des Systems

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2.$$

a) Berechnen Sie die Kommutatoren

$$[\vec{L}^2, \vec{L}_i^2], [\vec{L}^2, L_{i,z}], [L_z, \vec{L}_i^2] \text{ und } [L_z, L_{i,z}] \quad \text{für } i = 1, 2.$$

b) Berechnen Sie die Matrixdarstellung von $\vec{L}^2$ und L_z in der Basis (1).

c) Finden Sie eine Basis, in der $\vec{L}^2$ und L_z diagonal sind und geben Sie die Eigenzustände und ihre Entartung an.

Aufgabe 2: Streuung an einer harten Kugel

6 Punkte

Eine harte Kugel wird durch $V(r) = \infty$ für $r \leq R$ und $V(r) = 0$ für $r > R$ beschrieben.

Der Lösungsansatz im Bereich $r > R$ für P -Wellen-Streuung lautet

$$u_{k,l=1}(r) = C \left[\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) + a \left(\frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr) \right) \right]$$

(C = Normierungskonstante).

a) Bestimmen Sie a .

b) Berechnen Sie die Streuphase δ_1 für P -Wellen-Streuung.

c) Zeigen Sie, dass für $k \rightarrow 0$ die Streuphase $\sim (kR)^3$ ist.

Aufgabe 3: Streuung am kugelsymmetrischen Potentialtopf

8 Punkte

Wir wollen gebundene Zustände für S -Wellen ($l = 0$) an einem kugelsymmetrischen Potentialtopf $V(r \leq R) = -V_0, V(r > R) = 0$ untersuchen. Dazu verwenden wir die Notation $k_0^2 = 2\mu V_0/\hbar^2, K^2 = 2\mu(V_0 + E)/\hbar^2, \kappa^2 = -2\mu E/\hbar^2$. Es sei $E < 0$. Begründen Sie die folgende Form für die Lösung der Radialgleichung (für beliebiges l)

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_{nl}j_l(K_{nl}r) & r \leq R \\ B_{nl}H_l^{(+)}(i\kappa_{nl}r) & r > R \end{cases},$$

wobei $H_{nl}^{(\pm)}(\rho) = -n_l(\rho) \pm i j_l(\rho)$ und

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right).$$

Gewinnen Sie (im Fall $l = 0$) durch Aufstellen der Anschlußbedingungen bei $r = R$ eine Bedingung für V_0 und R , die erfüllt sein muss, damit es N gebundene S -Zustände gibt.

33. Aufgabe: Addition von Drehimpulsen

Wir benutzen in der ganzen Aufgabe, dass die Operatoren auf dem Produktraum 1 natürlich mit denen auf dem zweiten Produktraum vertauschen. Außerdem die kanonischen Vertauschungsrelationen für die Drehimpulse. Zur Übersichtlichkeit vernachlässigen wir die Vektorpfeile (es treten sowieso nur Produkte von zwei Vektoren auf).

(a) Für $i = 1$ ergibt sich

$$[L^2, L_1^2] = [L_1^2 + L_2^2 + 2L_1L_2, L_1^2] = [L_1^2, L_1^2] + [L_1L_2, L_1^2] + [L_2^2, L_1^2] = 0$$

und offensichtlich analog auch für $i = 2$. Wieder zuerst für $i = 1$:

$$[L^2, L_{1z}] = [L_1^2 + L_2^2 + 2L_1L_2, L_{1z}] = 2[L_1L_2, L_{1z}] = 2[L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} + L_{1z}L_{2z}, L_{1z}]$$

Der Kommutator der z -Komponenten verschwindet wieder. Für den Rest benutzen wir die Produktregel und die kanonischen Vertauschungsrelationen:

$$= 2(L_{1x}[L_{2x}, L_{1z}] + [L_{1x}, L_{1z}]L_{2x} + L_{1y}[L_{2y}, L_{1z}] + [L_{1y}, L_{1z}]L_{2y}) = 2i\hbar(L_{1x}L_{2y} - L_{1y}L_{2x})$$

Erinnern wir uns wieder an die Vektorschreibweise, so ist dies

$$[L^2, L_{1z}] = 2i\hbar(L_1 \times L_2)_z$$

und für $i = 2$ natürlich gerade vertauscht:

$$[L^2, L_{2z}] = 2i\hbar(L_2 \times L_1)_z = -2i\hbar(L_1 \times L_2)_z$$

Damit erhält man dann auch die wichtige Vertauschung

$$[L^2, L_z] = [L^2, L_{1z}] + [L^2, L_{2z}] = 0$$

Weiterhin ist

$$[L_z, L_1^2] = [L_{1z} + L_{2z}, L_{1x}^2 + L_{1y}^2 + L_{1z}^2] = L_{1x}[L_{1z}, L_{1x}] + [L_{1z}, L_{1x}]L_{1x} + L_{1y}[L_{1z}, L_{1y}] + [L_{1z}, L_{1y}]L_{1y}$$

und das ist

$$= i\hbar(L_{1x}L_{1y} + L_{1y}L_{1x} - L_{1x}L_{1y} - L_{1y}L_{1x}) = 0$$

und analog

$$[L_z, L_2^2] = i\hbar(L_{2x}L_{2y} + L_{2y}L_{2x} - L_{2x}L_{2y} - L_{2y}L_{2x}) = 0$$

Schließlich ist noch offensichtlich

$$[L_z, L_{1z}] = [L_{1z} + L_{2z}, L_{1z}] = 0 = [L_z, L_{2z}]$$

(b) Wähle $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon'_1, \epsilon'_2 \in \{+, -\}$. Dann ist:

$$\langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | L_z | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle = \langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | L_{1z} + L_{2z} | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle = \langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | \left(\epsilon_1 \frac{\hbar}{2} + \epsilon_2 \frac{\hbar}{2} \right) | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle$$

nach Definition und da die Vektoren offensichtlich eine ONB bilden,

$$= \frac{\hbar}{2} (\epsilon_1 + \epsilon_2) \delta_{\epsilon_1 \epsilon'_1} \delta_{\epsilon_2 \epsilon'_2}$$

Somit ist die Darstellung von L_z in dieser Basis:

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Weiterhin ist mit $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + 2L_1L_2$ nach Definition:

$$\langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | L^2 | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle = \langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | \left(\frac{3}{4} \hbar^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + 2(L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} + L_{1z}L_{2z}) \right) | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle$$

und da die Vektoren wieder eine ONB sind

$$= \left(\frac{3}{2} \hbar^2 + \epsilon_1 \epsilon_2 \frac{\hbar^2}{2} \right) \delta_{\epsilon_1 \epsilon'_1} \delta_{\epsilon_2 \epsilon'_2} + 2 \langle \epsilon'_1, \epsilon'_2 | L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle$$

Um den letzten Ausdruck berechnen zu können, betrachten wir noch einmal die Wirkung der Operatoren in ihrem eigenen Produktraum:

$$L_{1x} |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad L_{1x} |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad L_{1y} |+\rangle = i \frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad L_{1y} |-\rangle = -i \frac{\hbar}{2} |+\rangle$$

Wir definieren deshalb $\bar{\epsilon}$ als den Wert, der gerade nicht ϵ ist und können damit schreiben:

$$L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} | \bar{\epsilon}_1, \bar{\epsilon}_2 \rangle - \frac{\hbar^2}{4} \epsilon_1 \epsilon_2 | \bar{\epsilon}_1, \bar{\epsilon}_2 \rangle$$

Insgesamt erhalten wir damit die Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2} \left((3 + \epsilon_1 \epsilon_2) \delta_{\epsilon_1 \epsilon'_1} \delta_{\epsilon_2 \epsilon'_2} + (1 - \epsilon_1 \epsilon_2) \delta_{\bar{\epsilon}_1 \epsilon'_1} \delta_{\bar{\epsilon}_2 \epsilon'_2} \right)$$

und damit die Darstellung:

$$L^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

- (c) Wie man an den Basisdarstellungen sieht, sind $|++\rangle$ und $|--\rangle$ schon Eigenvektoren zu L_z und L^2 . Die beiden restlichen Vektoren müssen Linearkombinationen von $|+-\rangle$ und $| -+\rangle$ sein. Zu diesen ist L_z auch auf jeden Fall diagonal (mit Eigenwert 0). Wir betrachten also nur den mittleren Teil von L^2 :

$$M = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Dieser hat offensichtlich die Eigenwerte 0 und 2 und die Eigenvektoren

$$|+-\rangle + |-+\rangle \quad |+-\rangle - |-+\rangle$$

Wir wählen also die normierte Basis:

$$|++\rangle, |--\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle], \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle]$$

In dieser haben die beiden Operatoren die Darstellung

$$L^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Wie in der Literatur wählen wir zwei Variablen M und S , welche die Vektoren der Basis in der Form $|S, M\rangle$ darstellen sollen. Damit weiterhin die Beziehungen

$$L^2 |S, M\rangle = \hbar^2 S(S+1) |S, M\rangle \quad L_z |S, M\rangle = \hbar M |S, M\rangle$$

gelten, setzen wir

$$|1, 1\rangle = |++\rangle, |1, -1\rangle = |--\rangle, |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle], |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle]$$

mit

$$S = 0, 1 \quad M = 0, \pm 1$$

Das bedeutet vor allem, dass der Eigenwert $M = 0$ zu L_z 2-fach entartet ist, während $M = \pm 1$ (also $\pm \hbar$) nicht entartet ist. Bei L^2 ist der Eigenwert zu $S = 0$ nicht entartet, während der Eigenwert $2\hbar^2$ (also $S = 1$) dreifach entartet ist. L_z und L^2 bilden ein vSkO.

34. Aufgabe: Streuung an einer harten Kugel

- (a) An die Funktion u ist natürlich die Bedingung geknüpft, dass sie an der Stelle $r = R$ stetig ist. Da für $r < R$ das Potential unendlich ist, muss also vor allem

$$u_{k,1}(R) = 0 \iff \frac{\sin(kR)}{kR} - \cos(kR) + a \left(\frac{\cos(kR)}{kR} + \sin(kR) \right) = 0$$

gelten. Stellen wir dies nach a um erhalten wir:

$$a = - \frac{\frac{\sin(kR)}{kR} - \cos(kR)}{\frac{\cos(kR)}{kR} + \sin(kR)} = \frac{kR \cos(kR) - \sin(kR)}{kR \sin(kR) + \cos(kR)}$$

- (b) Es ist:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{k,1}(r) = C \left(\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr)}{kr} - \lim_{r \rightarrow \infty} \cos(kr) + a \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\cos(kr)}{kr} + a \lim_{r \rightarrow \infty} \sin(kr) \right)$$

Die Terme $\sin(kr)$ und $\cos(kr)$ sind betragsmäßig durch Eins beschränkt, weshalb

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr)}{kr} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\cos(kr)}{kr} = 0$$

Es bleibt

$$u_{k,1}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} C(a \sin(kr) - \cos(kr))$$

Nach Definition muss dies gleich

$$u_{\sim} = \tilde{C} \sin \left(kr - \frac{\pi}{2} + \delta_1 \right)$$

sein. Wir benutzen die Additionstheoreme:

$$u_{\sim} = \tilde{C} (\sin(kr) \cos \left(\delta_1 - \frac{\pi}{2} \right) + \cos(kr) \sin \left(\delta_1 - \frac{\pi}{2} \right))$$

$$\tilde{C} \cos \delta_1 = C$$

$$\tilde{C} \sin \delta_l = Ca$$

$$\implies a = \tan \delta_l \quad \delta_l = \arctan a$$

(c) Setze

$$F(x) = \arctan(x) \quad G(x) = \frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x \sin(x) + \cos(x)}$$

Dann ist

$$G(0) = 0 \quad F(G(0)) = F(0) = 0$$

$$G'(x) = -\frac{x^2}{(x \sin(x) + \cos(x))^2} \implies G'(0) = 0$$

$$G''(x) = \frac{2x((x^2 - 1)\cos(x) - x\sin(x))}{(x \sin(x) + \cos(x))^3} \implies G''(0) = 0$$

Somit ist vor allem nach einer Taylorentwicklung um $x = kR = 0$

$$\delta_1 = \arctan(a) = F(G(kR))$$

$$\approx \underbrace{F(G(0))}_{=0} + kR \underbrace{G'(0)}_{=0} F'(G(0)) + \frac{1}{2}(kR)^2 [\underbrace{G'(0)^2}_{=0} F''(G(0)) + \underbrace{G''(0)}_{=0} F'(G(0))] + O((kR)^3)$$

und damit ist

$$\delta_1 \sim (kR)^3$$

35. Aufgabe: Streuung an einem kugelsymmetrischen Potentialtopf

$r < R$: gebundene Zustände: $E < 0$

Radialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu^2} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - (V_0 + E) \right] R_{kl}(r) = 0$$

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + K^2 \right] R_{kl}(r) = 0$$

mit $\rho = Kr$

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] \tilde{R}_{kl}(\rho) = 0$$

Lösung: $\tilde{R}_{kl}(\rho) = A_{kl}j_l(\rho) + B_{kl}n_l(\rho)$

$R_{kl}(r) = A_{kl}j_l(Kr) + B_{kl}n_l(Kr)$

Bedingung: Lösung ist regulär im Ursprung

$$\implies B_{Kl} = 0$$

$$R_{Kl}(r) = A_{Kl} j_l(Kr)$$

$r > R$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E \right) R_{Kl}(r) = 0$$

$$\kappa^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} - \kappa^2 \right] R_{Kl}(r) = 0$$

mit $\rho = i\kappa r$

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] \tilde{R}_{Kl}(\rho)$$

Lösung:

$$\tilde{R}_{Kl}(\rho) = C_{Kl} j_l(\rho) + D_{Kl} n_l(\rho)$$

$$R_{Kl}(r) = C_{Kl} j_l(i\kappa r) + D_{Kl} n_l(i\kappa r)$$

Bedingung: Verhalten für $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} i\kappa r R_{Kl}(r) &= C_{Kl} \sin\left(i\omega - \frac{l\pi}{2}\right) - D_{Kl} \cos\left(i\kappa r - \frac{l\pi}{2}\right) \\ &= C_{Kl} \frac{1}{2i} \left(e^{-\kappa r} e^{-i\frac{l\pi}{2}} - e^{\kappa r} e^{i\frac{l\pi}{2}} \right) - D_{Kl} \frac{i}{2} \left(e^{-\kappa r} e^{-i\frac{l\pi}{2}} + e^{\kappa r} e^{i\frac{l\pi}{2}} \right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-\frac{i l \pi}{2}} e^{-\kappa r} \left(\frac{C_{Kl}}{i} - D_{Kl} \right) - \frac{1}{2} e^{\frac{i l \pi}{2}} e^{\kappa r} \left(\frac{C_{Kl}}{i} - D_{Kl} \right) \end{aligned}$$

Der zweite Teil des Terms muss wegen Integrierbarkeit verschwinden.

$$\implies \frac{C_{Kl}}{i} + D_{Kl} = 0, \quad C_{Kl} = -i D_{Kl}$$

und damit

$$R_{Kl} = D_{Kl} (-i j_l(\kappa r) + n_l(\kappa r)) = -D_{Kl} H_l^+(i\kappa r)$$

Gesamtlösung:

Für $r < R$: $R_{nl}(r) = A_{nl} j_l(K_n r)$

Für $r > R$: $R_{nl}(r) = B_{nl} H_l^+(K_n r)$

Anschlussbedingung für $l = 0$ (S-Wellen)

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$H_0^+(\rho) = i \frac{\sin \rho}{\rho} + \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$R_{nl}^{r < R}(r = R) = R_{nl}^{r > R}(r = R)$$

Für die Ableitungen gilt dasselbe

also

$$A_{n0} \frac{\sin(K_{n0}R)}{K_{n0}R} = B_{n0} \frac{e^{-\kappa_{n0}R}}{iK_{n0}R}$$

$$A_{n0} \left(\frac{K_{n0} \cos K_{n0}R}{K_{n0}R} - \frac{\sin K_{n0}R}{K_{n0}R} \right)$$

$$= B_{n0} \left(-\frac{K_{n0}}{i\kappa_{n0}R} - \frac{1}{i\kappa_{n0}R^2} \right) e^{-\kappa_{n0}R}$$

$$A_{n0} \frac{K_{n0}R \cos K_{n0}R - \sin K_{n0}R}{K_{n0}R^2} = B_{n0} \frac{e^{-\kappa_{n0}R}}{i\kappa_{n0}R} \left(-\kappa_{n0} - \frac{1}{R} \right)$$

zusammen:

$$-K_{n0}R \cot(K_{n0}R) = \kappa_{n0}R$$

$$K_{n0}^2 = \frac{2m}{\hbar} (V_0 + E_{n0}) = k_0^2 - \kappa_{n0}^2$$

Dies lösen wir grafisch: Bei größerem Potential wird auch der Kreis größer und es gibt

Bild

mehr Lösungen.

N gebundene Zustände, falls

$$\left(N - \frac{1}{2}\right)\pi \leq k_0R < \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi$$

äquivalent zu

$$\left(N - \frac{1}{2}\right)\pi \leq \sqrt{2mV_0} \frac{R}{\hbar} < \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi$$

Je tiefer oder breiter der Potentialtopf ist, desto mehr gebundene Zustände existieren.

13. Übung

Aufgabe 1: Bornsche Näherung für Yukawa-Potential

10 Punkte

Für eine in z -Richtung einlaufende Welle, die an einem Potential $V(\vec{r})$ gestreut wird, lautet die Wellenfunktion der stationären Streuzustände

$$\psi_k^+(\vec{r}) = e^{i k z} + \int d^3 r' G_+(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

mit

$$G_+(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i k r}}{r} \quad \text{und} \quad U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}).$$

- a) Entwickeln Sie die Wellenfunktion für $r \gg r'$ und bestimmen Sie die Streuamplitude $f(\theta, \varphi)$ in

$$\psi_k^+(\vec{r}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i k z} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i k r}}{r}.$$

Geben Sie anschließend die Bornsche Näherung für ψ_k^+ und $f(\theta, \varphi)$ an.

- b) Wir betrachten nun das Yukawa-Potential ($\alpha > 0$)

$$V(\vec{r}) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}.$$

Berechnen Sie die Streuamplitude $f(\theta, \varphi)$ in der Bornschen Näherung. Geben Sie den differentiellen Streuquerschnitt $\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$ an.

Hinweis:

$$\int_0^\infty dr e^{-a r} \sin(b r) = \frac{b}{a^2 + b^2} \quad (a, b > 0).$$

Aufgabe 2: Gestörter harmonischer Oszillator

10 Punkte

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator mit Störterm $H = H_0 + \varepsilon W$ mit

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad \text{und} \quad W = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2,$$

wobei $\varepsilon \ll 1$.

- a) Entwickeln Sie die Eigenwertgleichung

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \tag{1}$$

in ε bis zur zweiten Ordnung, indem Sie die entwickelten Eigenwerte $E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots$ und Zustände $|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + \varepsilon |n\rangle^{(1)} + \dots$ einsetzen. Entwickeln Sie zusätzlich die Normierungsbedingung

$$\langle n|n\rangle = 1 \tag{2}$$

bis zur ersten Ordnung in ε .

b) Zeigen Sie, dass wenn man Gleichung (1) zur ersten Ordnung in ε mit $|n\rangle^{(0)}$ projiziert, man

$$E_n^{(1)} = {}^{(0)}\langle n|W|n\rangle^{(0)} \quad (3)$$

und mit der Projektion mit $|q\rangle^{(0)} \neq |n\rangle^{(0)}$

$$|n\rangle^{(1)} = \sum_{q \neq n} |q\rangle^{(0)} \frac{{}^{(0)}\langle q|W|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \quad (4)$$

erhält (für Gleichung (4) muss man zusätzlich noch die Normierungsbedingung (2) verwenden). Analog kann man zur nächsten Ordnung vorgehen und bekommt (dies muss nicht gezeigt werden)

$$E_n^{(2)} = \sum_{q \neq n} \frac{|{}^{(0)}\langle q|W|n\rangle^{(0)}|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}. \quad (5)$$

Berechnen Sie den gestörten **Grundzustand** in erster und dessen Energieeigenwert in zweiter Ordnung.

c) Sie können das Problem auch exakt lösen. Geben Sie den Energieeigenwert für den Grundzustand an, entwickeln Sie diesen in $\varepsilon \ll 1$ und vergleichen das Ergebnis mit dem aus Aufgabenteil b).

Aufgabe 3: Gestörter harmonischer Oszillator: Advanced

(freiwillig)

Berechnen Sie den gestörten **Grundzustand** in zweiter und dessen Energieeigenwert in dritter Ordnung der zeitunabhängigen Störungsrechnung. Lösen Sie hierzu schrittweise die Eigenwertgleichung (1) für den Grundzustand in den Ordnungen in ε . Vergleichen Sie erneut den Energieeigenwert mit dem exakten Ergebnis.

Teilergebnis: Mit der Notation des gestörten Grundzustands $|0\rangle = |0\rangle^{(0)} + \varepsilon |0\rangle^{(1)} + \varepsilon^2 |0\rangle^{(2)} + \dots$ erhält man für die zweite Ordnung

$$|0\rangle^{(2)} = -\frac{1}{64} |0\rangle^{(0)} + \frac{\sqrt{2}}{16} |2\rangle^{(0)} + \frac{\sqrt{6}}{64} |4\rangle^{(0)}.$$

36. Aufgabe: Bornsche Näherung für Yukawa-Potential

(a) Wir benutzen die Näherungen

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = |\vec{r}'| \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{|\vec{r}'|^2} \right)$$

und

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{|\vec{r}'|}$$

Mit der Definition $\vec{k}'$ als dem auslaufenden Wellenvektor erhalten wir dann

$$-4\pi G_+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^{i\vec{k}r - i\vec{k}'\vec{r}'}}{r}$$

Somit muss

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \psi_k^+(\vec{r}') U(\vec{r}')$$

In der Bornschen Näherung ist

$$\psi_k^+(\vec{r}') = e^{i\vec{k}\vec{r}'}$$

und damit (nach Umbenennung von r' in r)

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} U(\vec{r})$$

(b) Wir setzen zuerst

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Die Integration über das Raumelement transformieren wir in Kugelkoordinaten. Die Integration über φ ist dabei besonders einfach:

$$\int d^3r e^{i\vec{K}\vec{r}} U(\vec{r}) = 2\pi \int dr r^2 U(\vec{r}) \int d\theta \sin\theta e^{i\vec{K}\vec{r}}$$

Da θ der Winkel zwischen $\vec{K}$ und $\vec{r}$ ist, erhalten wir

$$\int \sin\theta d\theta e^{iKr \cos\theta} = \frac{1}{iKr} (e^{iKr} - e^{-iKr}) = \frac{2}{Kr} \sin(Kr)$$

Damit

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{2mV_0}{K\hbar^2} \int dr e^{-\alpha r} \sin(Kr)$$

und mit der Formel auf den Übungsblatt

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + K^2}$$

mit

$$K = 2k \sin \theta/2$$

kommt man auf

$$\sigma = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{[\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \theta/2]^2}$$

37. Aufgabe: Gestörter harmonischer Oszillator

(a) Die Näherung eingesetzt ergibt:

$$(H_0 + \varepsilon W)(|n\rangle^{(0)} + \varepsilon |n\rangle^{(1)} + \varepsilon^2 |n\rangle^{(2)}) = (E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)})(|n\rangle^{(0)} + \varepsilon |n\rangle^{(1)} + \varepsilon^2 |n\rangle^{(2)})$$

Vernachlässigen wir alle Terme in $O(\varepsilon^3)$ so kommt man (getrennt nach Potenzen von ε):

$$H_0 |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(0)} \quad (3)$$

$$H_0 |n\rangle^{(1)} + W |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)} |n\rangle^{(0)} \quad (4)$$

$$H_0 |n\rangle^{(2)} + W |n\rangle^{(1)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(2)} + E_n^{(1)} |n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)} |n\rangle^{(0)} \quad (5)$$

Die Normierungsbedingung führt auf

$$\langle n|n\rangle = \left(\langle n|^{(0)} + \varepsilon \langle n|^{(1)} + \varepsilon^2 \langle n|^{(2)} \right) \left(|n\rangle^{(0)} + \varepsilon |n\rangle^{(1)} + \varepsilon^2 |n\rangle^{(2)} \right)$$

und dies wiederum Entwickelt bis zu ersten Ordnung führt auf (wieder getrennt nach Potenzen von ε):

$$\langle n|^{(0)} |n\rangle^{(0)} + \varepsilon \left(\langle n|^{(0)} |n\rangle^{(1)} + \langle n|^{(1)} |n\rangle^{(0)} \right) = 1$$

Da $|n\rangle^{(0)}$ als Lösung des ungestörten Hamiltonoperators schon normiert ist und wir oBdA $\langle n|^{(1)} |n\rangle^{(0)}$ als reell wählen können, gilt

$$\langle n|^{(1)} |n\rangle^{(0)} = \langle n|^{(0)} |n\rangle^{(1)} = 0$$

(b) Wir projizieren (4) auf $|n\rangle^{(0)}$ und erhalten

$$\langle n|^{(0)} H_0 |n\rangle^{(1)} + \langle n|^{(0)} W |n\rangle^{(0)} = \langle n|^{(0)} E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} + \langle n|^{(0)} E_n^{(1)} |n\rangle^{(0)}$$

Da $|n\rangle^{(0)}$ ein Eigenzustand zu H_0 ist erhält man im ersten Summanden

$$\langle n|^{(0)} H_0 |n\rangle^{(1)} = \langle n|^{(0)} E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} = 0$$

nach der Normierungsbedingung von oben. Weiter ist deshalb auch

$$\langle n|^{(0)} E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} = 0$$

und da $|n\rangle^{(0)}$ schon normiert ist

$$\langle n|^{(0)} E_n^{(1)} |n\rangle^{(0)} = E_n^{(1)}$$

Schließlich erhält man die behauptete Gleichung

$$E_n^{(1)} = \langle n|^{(0)} W |n\rangle^{(0)}$$

Nun projizieren wir (4) mit $|q\rangle^{(0)}$ für $q \neq n$ und erhalten

$$\langle q|^{(0)} H_0 |n\rangle^{(1)} + \langle q|^{(0)} W |n\rangle^{(0)} = \langle q|^{(0)} E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} + \langle q|^{(0)} E_n^{(1)} |n\rangle^{(0)}$$

Die $|q\rangle^{(0)}$ bilden ein Orthonormalsystem, weshalb

$$\langle q|^{(0)} |n\rangle^{(0)} = 0$$

Da auch die $|q\rangle^{(0)}$ offensichtlich Eigenvektoren zu H_0 sind, gilt

$$\langle q|^{(0)} H_0 |n\rangle^{(1)} = E_q^{(0)} \langle q|^{(0)} |n\rangle^{(1)}$$

Dies führt auch

$$\langle q|^{(0)} |n\rangle^{(1)} = \frac{\langle q|^{(0)} W |n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}$$

Für $q = n$ erhielten wir schon oben:

$$\langle q|^{(0)} |n\rangle^{(1)} = \langle n|^{(0)} |n\rangle^{(1)} = 0$$

Wir können also die Gleichung von links mit $|q\rangle^{(0)}$ multiplizieren und über alle q

summieren. Da die $|q\rangle^{(0)}$ vollständig sind, erhält man die Behauptung:

$$|n\rangle^{(1)} = \sum_{q \neq n} |q\rangle^{(0)} \frac{\langle q|^{(0)} W |n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}$$

Weiterhin ist (siehe Übungsblatt)

$$E_n^{(2)} = \sum_{q \neq n} \frac{|\langle q|^{(0)} W |n\rangle^{(0)}|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}$$

Harmonischer Oszillator Wir benutzen

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \implies X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} ((a^\dagger)^2 + a^2 + 2a^\dagger a + 1)$$

wenn man noch die Kommutatorrelation

$$[a, a^\dagger] = 1$$

einsetzt. Damit ist

$$W = \frac{\omega\hbar}{4} ((a^\dagger)^2 + a^2 + 2a^\dagger a + 1)$$

und vor allem

$$W |n\rangle^{(0)} = \frac{\omega\hbar}{4} \left(\sqrt{n+1}\sqrt{n+2} |n+2\rangle^{(0)} + \sqrt{n}\sqrt{n-1} |n-2\rangle^{(0)} + 2n |n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(0)} \right)$$

Das bedeutet, es bleiben nur zwei Terme in der Summe stehen (jetzt setzen wir $n = 0$ ein). Der Term mit $n - 2$ ergibt keinen Wert (da dieser Zustand nicht existiert):

$$\langle 0|^{(0)} W |0\rangle^{(0)} = \frac{\omega\hbar}{4} (2 \cdot 0 \cdot + |0\rangle^{(0)}) = \frac{\omega\hbar}{4}$$

$$\langle 2|^{(0)} W |0\rangle^{(0)} = \frac{\omega\hbar}{4} (\sqrt{1}\sqrt{2}) = \frac{\omega\hbar}{4}\sqrt{2}$$

Somit erhält man

$$E_0^{(1)} = \frac{\omega\hbar}{4} = \frac{E_0^{(0)}}{2}$$

und

$$E_0^{(2)} = \left(\frac{\omega\hbar}{4}\sqrt{2} \right)^2 \frac{2}{\hbar\omega - 5\hbar\omega} = -\frac{\hbar\omega}{16} = -\frac{E_0^{(0)}}{8}$$

Für den ersten gestörten Grundzustand erhält man dann

$$|0\rangle^{(1)} = |2\rangle^{(0)} \frac{\omega \hbar}{4} \sqrt{2} \frac{2}{-4\hbar\omega} = -\frac{\sqrt{2}}{8} |2\rangle^{(0)}$$

(c) Es ist

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \varepsilon \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega^2 + \varepsilon\omega^2) X^2$$

Setze also

$$\omega' = \sqrt{\omega^2 + \varepsilon\omega^2} = \omega\sqrt{1 + \varepsilon}$$

Es handelt sich also um einen ganz normalen harmonischen Oszillator mit Kreisfrequenz ω' . Davon kennen wir schon die Lösung für die Energieeigenwerte:

$$E'_n = \hbar\omega' \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Dies entwickelt nach ε mit

$$\sqrt{1 + \varepsilon} \approx 1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8}$$

ergibt

$$E'_n = E_n^{(0)} \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8} \right)$$

und damit das selbe Ergebnis wie oben!

38. Aufgabe: Gestörter harmonischer Oszillator: Advanced

2. Ordnung gibt

$$\begin{aligned}
 0 &= (H_0 - E_n^{(0)}) |n\rangle^{(2)} + (W - E_n^{(1)}) |n\rangle^{(1)} - E_n^{(2)} |n\rangle^{(0)} \\
 {}^{(0)}\langle q|n\rangle^{(2)} &\stackrel{q \neq n}{=} \frac{{}^{(0)}\langle q|W|n\rangle^{(1)} - E_n^{(1)} {}^{(0)}\langle q|n\rangle^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \\
 &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \left(\sum_{p \neq n} \frac{{}^{(0)}\langle q|W|p\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle p|W|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} - {}^{(0)}\langle n|W|n\rangle^{(0)} \sum_{p \neq n} \frac{{}^{(0)}\langle p|W|n\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle q|n\rangle^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \right) \\
 \Rightarrow {}^{(0)}\langle q|n\rangle^{(2)} &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \left(\sum_{p \neq n} \frac{{}^{(0)}\langle q|W|p\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle p|W|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} - \frac{{}^{(0)}\langle n|W|n\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle q|W|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \right) \\
 {}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(2)} &= \frac{1}{2} {}^{(1)}\langle n|n\rangle^{(1)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{p \neq n} \frac{|{}^{(0)}\langle p|W|n\rangle^{(0)}|^2}{|E_n^{(0)} - E_p^{(0)}|^2} \\
 \Rightarrow |n\rangle^{(2)} &= \sum_q {}^{(0)}\langle q|n\rangle^{(2)} |q\rangle^{(0)} \\
 \Rightarrow |0\rangle^{(2)} &= -\frac{1}{64} |0\rangle^{(0)} + \frac{\sqrt{2}}{16} |2\rangle^{(0)} + \frac{\sqrt{6}}{64} |4\rangle^{(0)} + \dots
 \end{aligned}$$

Nun dritte Ordnung

$$\begin{aligned}
 (H_0 - E_n^{(0)}) |n\rangle^{(3)} + (W - E_n^{(1)}) |n\rangle^{(2)} - E_n^{(2)} |n\rangle^{(1)} - E_n^{(3)} |n\rangle^{(0)} &= 0 \\
 {}^{(0)}\langle q| \rightarrow q = n : {}^{(0)}\langle n|W - E_n^{(1)}|n\rangle^{(2)} - E_n^{(2)} {}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} - E_n^{(3)} {}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(0)} &= 0 \\
 &\Rightarrow E_n^{(3)} = {}^{(0)}\langle n|W - E_n^{(1)}|n\rangle^{(2)} \\
 &\Rightarrow E_0^{(3)} = \frac{1}{32} \hbar\omega
 \end{aligned}$$

Dieses Skript wurde heruntergeladen von
ugroup.hostzi.com

Alle Rechte verbleiben beim lesenden Dozenten.
Keine Garantie auf Richtigkeit oder Vollständigkeit.