

[Abgabe 10.4. in der Vorlesung; Besprechung 13.4. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 1:** (3+4+3=10 Punkte)

- (a) Ein Neutron hat eine Radius von etwa $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$. Welche Energie würde man benötigen, um das Innere dieses Teilchens mit Hilfe von Elektronen zu untersuchen? Welche Geschwindigkeit müssten die Elektronen also mindestens haben?
- (b) Geben Sie (aufgrund von Informationen, die Sie z.B. im Semesterapparat finden) die Formel zur Schwarzkörperstrahlung zusammen mit ihrer Herleitung nach Planck an. Fassen Sie die Herleitungen der entsprechenden Näherungsformeln von Wien und Rayleigh-Jeans zusammen.
- (c) In unserem Universum gibt es eine Schwarzkörperstrahlung (die kosmische Hintergrundstrahlung), welche einer Temperatur von etwa 3 K entspricht. Berechnen Sie die Energie eines Photons, das die zu dem Maximum dieser Strahlungsverteilung zugehörige Wellenlänge besitzt.

Aufgabe 2:

Die elastische Streuung eines Photons an einem Elektron nennt man *Compton-Streuung*. Dabei sei λ die Wellenlänge des einlaufenden Photons, λ' diejenige des auslaufenden Photons, und φ der Streuwinkel (die Ablenkung des Photons von seiner Bahn). Leiten Sie unter Benutzung von Energie- und Impuls-Erhaltung sowie den de Broglie-Beziehungen den Zusammenhang

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos(\varphi))$$

her. In welchem Frequenzbereich sollte die Strahlung sich also befinden, damit man einen erheblichen Effekt beobachten kann?

Aufgabe 3:

Seien $\vec{f}(\vec{k}), \vec{g}(\vec{k})$ die Fourier-Transformierten der beiden komplexwertigen (und quadratintegrierbaren) Funktionen $f(\vec{r}), g(\vec{r})$. Zeigen Sie, dass dann die folgenden Gleichungen gelten:

$$(a) \int d^3\vec{r} f^*(\vec{r}) g(\vec{r}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{f}^*(\vec{k}) \vec{g}(\vec{k})$$

$$(b) \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{f}^*(\vec{k}) \vec{k} \vec{g}(\vec{k}) = \int d^3\vec{r} f^*(\vec{r}) (-i\nabla_r) g(\vec{r})$$

$$(c) \int d^3\vec{r} f^*(\vec{r}) \vec{r} g(\vec{r}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{f}^*(\vec{k}) (i\nabla_k) \vec{g}(\vec{k})$$

- Bitte geben Sie Ihre Lösung der *markierten* *Aufgabe* in der Vorlesung ab (Name oben rechts)
- Bearbeiten Sie die *restlichen* Aufgaben, so dass Sie diese in den Übungen erklären können
- Die Homepage der Vorlesung ist <http://www.physik.uni-bielefeld.de/~yorks/qm12>

[Abgabe 17.4. in der Vorlesung; Besprechung 20.4. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 4:** (1+1+3+2+3=10 Punkte)

Betrachten Sie ein eindimensionales Gauß'sches Wellenpaket $(d, k_0, x_0 \in \mathbb{R})$,

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}, \quad \phi(k) = N e^{-d^2(k-k_0)^2 - ikx_0}.$$

- (a) Löst diese Wellenfunktion die freie Schrödinger-Gleichung?
- (b) Skizzieren Sie $|\phi(k)|^2$. Welche Eigenschaften dieser Kurve werden durch die Konstanten k_0 und d beschrieben?
- (c) Mit $\int dk e^{-k^2} = \sqrt{\pi}$ können Sie das k -Integral sogar exakt lösen. $|\psi(x, t)|^2$ ist wieder eine Gaußkurve, und zwar mit welchem Schwerpunkt und welcher Standardabweichung?
 [Hinweis: Eine Kurve der Form $f(x) \sim e^{-(x-x_0)^2/2b^2}$ nennt man *Gaußkurve* um den Schwerpunkt $x = x_0$ mit Standardabweichung b . Ihre (volle Halbwerts-) Breite beträgt offensichtlich $2\sqrt{2\ln 2} b$.]
- (d) Da die Breite des Wellenpakets zeitabhängig ist, "zerfließt" es. Wie lange dauert es, bis sich die Breite
 - eines Sandkorns ($m \approx 1 \text{ mg}; d \approx 1 \text{ mm}$)
 - eines Alphateilchens ($\frac{1}{2}\text{He}^{++}; m \approx ?; d \approx 10^{-13} \text{ m}$)
 jeweils verdoppelt hat? Vergleichen Sie Ihr Resultat mit dem Alter des Universums.
- (e) Berechnen Sie die Mittelwerte und Varianzen $\langle x \rangle, (\Delta x)^2, \langle p \rangle$ und $(\Delta p)^2$ von $\psi(x, t)$.

Aufgabe 5:

- (a) Verifizieren Sie durch direktes Einsetzen, dass die reellen Funktionen $\psi_1 = N \sin(kx - \omega t)$ und $\psi_2 = N \cos(kx - \omega t)$ keine Lösungen der Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen sind.
- (b) Verifizieren Sie, dass die Wellenfunktion $\psi(x, t) = N e^{i(kx - \omega t)} - N e^{-i(kx + \omega t)}$ (mit $N \in \mathbb{C}$) die freie Schrödinger-Gleichung löst, falls $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$ gilt. Zeigen Sie, dass $\psi(x, t) = 2iN \sin(kx) e^{-i\omega t}$. Was für eine Art Welle ist das?
- (c) In der QM repräsentiert man ein freies Teilchen mit Impuls p und Energie E durch die Wellenfunktion $\psi(x, t) = N e^{i(px - Et)/\hbar}$. Physiker auf einem anderen Planeten könnten die Konvention $\psi(x, t) = N e^{-i(px - Et)/\hbar}$ benutzen. Welche Form hat deren Schrödinger-Gleichung folglich?

Aufgabe 6:

Bestimmen Sie für ein eindimensionales System mit Wellenfunktion $\psi(x) = \frac{N}{x^2 + a^2}$ (mit $a \in \mathbb{R}$)

- die Normierungskonstante N ,
- die Wellenfunktion im Impulsraum $\tilde{\psi}(k)$,
- die Mittelwerte $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle$ und $\langle p^2 \rangle$.

[Abgabe 24.4. in der Vorlesung; Besprechung 27.4. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

$$I(p, c) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-p(t+ic)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \quad \text{für alle } p, c \in \mathbb{C} \quad \text{mit } \operatorname{Re}(p) > 0$$

Das **Gauß-Integral** wird uns in der QM wiederholt über den Weg laufen:

Zum Beweis schreiben wir $c = a + ib$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ und unterscheiden zwei Fälle:

- $b = 0$

Mit Substitution $u = t + a$ ergibt sich zunächst

$$I(p, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-p(t+a)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-pu^2} = I(p, 0).$$

Und dann helfen Polarkoordinaten weiter,

$$[I(p, 0)]^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-px^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-py^2} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr r e^{-pr^2} = 2\pi \left(-\frac{1}{2p} \right) e^{-pr^2} \Big|_0^{\infty} = \frac{\pi}{p},$$

wobei im letzten Schritt $\operatorname{Re}(p) > 0$ gebraucht wurde, damit e^{-pr^2} an der oberen Grenze verschwindet.

- $b \neq 0$

Hier kommt ein Stück komplexe Analysis (oder Funktionentheorie) ins Spiel. Wähle $A \in \mathbb{R}$ mit $A > |a|$. Dann verschwindet (wegen Cauchy's Theorem und weil e^{-p^2} eine ganze (bzw komplex-analytische bzw holomorphe) Funktion ist) das folgende geschlossene Wegintegral:

$$\int_{-A}^A dx e^{-p(x+ib)^2} + \int_0^b dy e^{-p(A+iy)^2} + \int_A^{-A} dx e^{-p(x+ib)^2} + \int_b^0 dy e^{-p(-A+iy)^2} = 0$$

Im Limes $A \rightarrow \infty$ ist aber der erste Term genau $I(p, 0)$, und Term zwei und vier verschwinden wieder wegen $\operatorname{Re}(p) > 0$. Also ist insgesamt (mit Substitution $t = x - a$)

$$I(p, 0) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-p(x+ib)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-p(t+a+ib)^2} = I(p, c),$$

was zu beweisen war.

***Aufgabe* 7: (4+6=10 Punkte)**

Bestimmen Sie die stationären Lösungen der Schrödingergleichung für die folgenden Potentiale. Wieviele Bindungszustände gibt es jeweils? Wie groß sind die dazugehörigen Bindungsenergien?

(a) $V(x) = -\Omega \delta(x)$, $\Omega > 0$

[Hinweis: Erinnern Sie sich daran, dass jede Deltafunktion nach danach *schreit*, überintegriert zu werden?!!]

(b) $V(x) = -\Omega [\delta(x+a) + \delta(x-a)]$, $\Omega, a > 0$

[Diese Form des Potentials könnte als grobes Modell eines Moleküls dienen.]

Aufgabe 8:

In der Vorlesung wurde der Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq L \\ 0 & \text{für } |x| > L \end{cases}$$

behandelt. Für die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände wurden dabei transzendente Gleichungen hergeleitet, die jedoch nicht explizit gelöst werden können.

Sie können allerdings nun die Energien der niedrigsten Bindungszustände analytisch im Grenzfalle $V_0 \rightarrow \infty$ bestimmen, indem Sie entweder von diesen Gleichungen, oder auch direkt von der Schrödinger-Gleichung ausgehen.

Wie lautet insbesondere die Nullpunktenergie $[E_1 - V(0)]$?

Aufgabe 9:

Betrachten Sie, wie schon in Aufgabe 8, wieder die in der Vorlesung hergeleiteten Lösungen für symmetrische sowie antisymmetrische Bindungszustände im Potentialtopf.

Wie groß ist eigentlich die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Teilchen im klassisch verbotenen Bereich aufhält?

[Abgabe 3.5. in der Vorlesung; Besprechung 4.5. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 10:** (1+6+1+2=10 Punkte)

Betrachten Sie ein weiteres spezielles Beispiel eines L -periodischen Potentials:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } nL \leq x < nL + a \\ V_0 & \text{für } nL - b < x \leq nL \end{cases},$$

wobei $a + b = L$ ist, $a, b, L, V_0 > 0$ reelle Konstanten sind und $n \in \mathbb{Z}$ ist.

- (a) Zeichnen Sie den Potentialverlauf.
 (b) Bestimmen Sie die Gleichung, aus der sich die Grenzen der Energiebänder für den Fall $0 < E < V_0$ bestimmen lassen. Gehen Sie dabei wie in der Vorlesung vor: Ansatz, Bloch'scher Satz, Anschlussbedingungen \Rightarrow Lösbarkeitsbedingung.
 [Hinweis: die Abkürzungen $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$ und $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ sind nützlich. Das Endergebnis ist am elegantesten mit \sin/\cos und \sinh/\cosh aufzuschreiben.]
 (c) Wie sieht es im Fall $E > V_0$ aus? Kann man eventuell das Ergebnis von (b) benutzen?
 (d) Als numerisches Beispiel wählen Sie nun $a = b$ und $2mV_0a^2/\hbar^2 = 4$. Welches sind dann die ersten drei Energiebänder? [Lösung graphisch oder numerisch (z.B. mit Mathematica) finden.]

Aufgabe 11:

Für die Streuung an einem Potentialtopf wurde in der Vorlesung ein Ausdruck für den Transmissionskoeffizienten T hergeleitet:

$$T(E) = \left\{ 1 + \left[\left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \frac{\sin(2kL)}{2} \right]^2 \right\}^{-1},$$

wobei $k_0^2 \equiv 2mE/\hbar^2$ und $k^2 \equiv 2m(E + V_0)/\hbar^2$ sind. Ausgehend von den Anschlussbedingungen aus der Vorlesung können Sie nun den entsprechenden Reflexionskoeffizienten $R(E)$ berechnen.

Aufgabe 12:

Die Bedingung $T(E_R) = 1$ definiert die Resonanzenergie E_R . Zeigen Sie, dass sich die in Aufgabe 11 angegebene Funktion in der Umgebung der Resonanzenergie näherungsweise durch die Breit-Wigner Formel

$$T(E) \approx \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

beschreiben lässt, wobei Γ eine Konstante ist. In welchem Energiebereich ist diese Näherung zuverlässig?

[Abgabe 8.5. in der Vorlesung; Besprechung 11.5. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 13:** (2+1+2+4+1=10 Punkte)

Zwei weitere 1D-Probleme:

- (a) Untersuchen Sie den Effekt der Feldemission (wie z.B. für eine Schottky-Diode in der Halbleiterphysik). Dazu verwenden Sie als ein grobes Modell für Elektronen in einem Metall ($x < 0$) mit äußerem elektrischen Feld E_x (im Bereich $x > 0$) das Potential $V(x < 0) = -V_0$ und $V(x \geq 0) = -eE_x x$. Wie groß ist laut Gamow-Formel die Tunnelwahrscheinlichkeit T von Elektronen mit Energien $-V_0 < E_{\text{el}} < 0$?
 (b) Berechnen Sie den Wert von T für $E_{\text{el}} = -4.5 \text{ eV}$ und die Felder $E_x = 5 \times 10^6 \text{ V/cm}$ und $E_x = 5 \times 10^7 \text{ V/cm}$.
 (c) Zeigen Sie, dass das Potential $V(x) = -\frac{\hbar^2 a^2}{m} \frac{1}{[\cosh(ax)]^2}$ einen Bindungszustand mit der Wellenfunktion $\psi_0(x) = A/\cosh(ax)$ hat. Finden Sie dessen Energie E_0 , normieren Sie ψ_0 und skizzieren Sie diese Lösung.
 (d) Lösen Sie die stationäre Schrödinger-Gleichung für das Potential aus (c) für positive Energien $E > 0$. [Hinweis: Dabei können Sie z.B. wie folgt vorgehen: Per Ansatz $\psi(x) = \varphi(\tanh(ax)) e^{ikx}$ mit $k \equiv \sqrt{2mE/\hbar^2}$ verschaffen Sie sich eine Differentialgleichung für $\varphi(t)$ in der Variablen $t \equiv \tanh(ax)$. Mit Potenzreihenansatz und Abbruchbedingung (d.h. die Potenzreihe für $\varphi(t)$ soll nur endlich viele Terme enthalten) erhalten Sie dann eine elementare Lösung.]
 (e) Wie verhält sich Ihre Lösung aus (d) bei $x \rightarrow -\infty$? Was bedeutet das für Transmissions- und Reflexions-Koeffizienten?

Aufgabe 14:

Funktionen von Operatoren werden formal durch ihre Taylorreihe definiert, also z.B.

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n.$$

Zeigen Sie, dass für zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} sowie eine komplexe Zahl $t \in \mathbb{C}$ gilt:

$$e^{t\hat{A}} \hat{B} e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{t^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

Aufgabe 15:

Zwischen den Operatoren \hat{p} (Impulskomponente in x -Richtung) und \hat{x} besteht die Vertauschungsrelation $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$, wie man leicht an der Realisierung $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ nachprüfen kann. Übertragen Sie die klassische Größe px in einen hermiteschen Operator.

[Abgabe 15.5. in der Vorlesung; Besprechung 18.5. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 16:** (6+4=10 Punkte)

(a) Beweisen Sie die allgemeine Unschärferelation aus der Vorlesung (vgl. Skript S.32)

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|,$$

unter den dort genannten Voraussetzungen: \hat{A}, \hat{B} sind Observablen, die Varianzen sind wie üblich als $(\Delta A)^2 \equiv \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle$ definiert, und der Operator $\hat{C} \equiv \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]$. Benutzen Sie dabei die Schwarz'sche Ungleichung $\|\psi\|^2 \|\chi\|^2 \geq |\langle \psi | \chi \rangle|^2$ für Vektoren $|\psi\rangle, |\chi\rangle$ des Hilbertraumes.

(b) Seien \hat{A}, \hat{B} zwei Operatoren, für die $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$ gilt. Beweisen Sie unter dieser Voraussetzung einen Spezialfall der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel, nämlich

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]/2}.$$

Betrachten Sie dazu z.B. die Funktion $\hat{G}(t) = \exp[t\hat{A}] \exp[t\hat{B}]$ und zeigen Sie zunächst, dass diese einer Differentialgleichung der Form $\partial_t \hat{G}(t) = \hat{M}(t) \hat{G}(t)$ genügt. [Hinweis: Sicherlich hilft Aufgabe 14 des letzten Übungsblattes.] Diese Differentialgleichung erster Ordnung (Randbedingung?) können Sie dann leicht lösen.

Aufgabe 17:

Damit wir ebene Wellen als normierte Zustände des Hilbertraums betrachten können, müssen sie *regularisiert* werden. Für die 1D ebenen Wellen $\psi(x) = C \exp(ikx)$ kann man das z.B. durch Einführung eines sehr großen Kastens der Breite L und der Forderung periodischer Randbedingungen $\psi(x+L) = \psi(x)$ erreichen. Welches sind die erlaubten k -Werte in diesem Fall? Bestimmen Sie die Konstante C aus der Normierungsbedingung $\int_{-L/2}^{L/2} dx \psi_k^*(x) \psi_q(x) = \delta_{kq}$.

Aufgabe 18:

(a) Wenn $V(\hat{x})$ ein Polynom in \hat{x} ist, was ist dann $[\hat{p}, V(\hat{x})]$?
 (b) Zeigen Sie, ausgehend vom Ehrenfest-Theorem $i\hbar \partial_t \langle \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$ und dem Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$, dass quantenmechanische Erwartungswerte eine nahezu klassische Gleichung erfüllen: $m \partial_t^2 \langle \hat{x} \rangle = -\langle V'(\hat{x}) \rangle$. Was ist der Unterschied zur klassischen Dynamik?

Aufgabe 19:

Untersuchen Sie die stehenden Wellen $\psi(\vec{r}) = C \sin(k_1 x) \sin(k_2 y) \sin(k_3 z)$ als reelle Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung in einem 3D-Kubus der Kantenlänge L .

(a) Bestimmen Sie die erlaubten Energieniveaus E unter der Randbedingung, dass $\psi(\vec{r})$ an der Oberfläche des Würfels ($0 \leq x, y, z \leq L$) verschwindet, sowie den Normierungsfaktor C .

(b) Ordnen Sie die Energie-Eigenwerte in einer Tabelle nach steigenden Werten von E/ϵ mit $\epsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ an. Gehen Sie bis zu $E = 36\epsilon$, und geben Sie jeweils die Entartung (also die Anzahl der linear unabhängigen Lösungen zu E) an.

[Abgabe 22.5. in der Vorlesung; Besprechung 25.5. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 20:** (2+2+1+2+3=10 Punkte)

(a) Ausgehend von der formalen Lösung $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ der Schrödinger-Gleichung können Sie nun auch die in der Vorlesung hergeleitete Von-Neumann-Gleichung $i\hbar \partial_t \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$ lösen, welche für statistische Operatoren $\hat{\rho}(t)$ (im Schrödinger-Bild) gilt.

(a1) $\hat{\rho}(t) = ?$

(a2) Zeigen Sie, dass $\text{Sp}[\hat{\rho}^2]$ zeitunabhängig ist. [Hinweis: Die Spur ist zyklisch, vgl. Aufgabe 21a.] (Also bleibt ein reiner/gemischter Zustand rein/gemischt!)

(b) Betrachten Sie einen Hilbert-Raum \mathcal{H} , der aus nur zwei Zuständen besteht. Diese seien mit $|0\rangle$ und $|1\rangle$ bezeichnet. Sei $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\alpha}|0\rangle + e^{i\beta}|1\rangle)$ ein reiner Zustand in \mathcal{H} .

(b1) Können Sie die folgende Notation erklären?

$$\hat{\rho}(\psi) \equiv |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{i(\alpha-\beta)} \\ e^{i(\beta-\alpha)} & 1 \end{pmatrix}$$

(b2) Zeigen Sie, dass $\text{Sp}[\hat{\rho}(\psi)] = 1$ und $\text{Sp}[\hat{\rho}^2(\psi)] = 1$.

(b3) Zeigen Sie, dass für

$$\hat{\rho}_{\text{Gemisch}} \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \hat{\rho}(\psi)$$

zwar wieder $\text{Sp}[\hat{\rho}_{\text{Gemisch}}] = 1$, nun aber $\text{Sp}[\hat{\rho}_{\text{Gemisch}}^2] < 1$ gilt.

Aufgabe 21:

Seien ein statistischer Operator $\hat{\rho}$ [also $\hat{\rho} = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ mit $0 \leq p_n \leq 1$ und $\sum_n p_n = 1$] sowie zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} und ein reiner Zustand $|\psi\rangle$ gegeben. Zeigen Sie, dass im Hilbert-Raum gilt:

(a) $\text{Sp}[\hat{A}\hat{B}] = \text{Sp}[\hat{B}\hat{A}]$

(b) $\text{Sp}[|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}] = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

(c) $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

(d) $\text{Sp}[\hat{\rho}] = 1$

Aufgabe 22:

Bestimmen Sie mit Hilfe der Reihenentwicklung aus Aufgabe 14 den Heisenberg-Operator

$$\hat{x}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \hat{x} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right),$$

wobei $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$ der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators ist.

[Abgabe 5.6. in der Vorlesung; Besprechung 8.6. in den Übungen]

[Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 27:** ((2+1)+(1+2+2+1+1))=10 Punkte

(a) Die Komponenten des Bahndrehimpuls-Operators sind $\hat{L}_j = (\hat{n} \times \hat{p})_j = \epsilon_{jkm} \hat{r}_k \hat{p}_m$ [Einstein-Konvention: Summation über $k, m = 1, 2, 3$ impliziert]. Ausgehend von den Vertauschungsrelationen $[\hat{r}_j, \hat{r}_k] = 0 = [\hat{p}_j, \hat{p}_k]$ und $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$ können Sie nun die folgenden Vertauschungsrelationen verifizieren:

(a1) $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkm} \hat{L}_m$ [Einstein-Konvention für m]

(a2) $[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = [\hat{p}^2, \hat{L}_j] = 0$ für $j = 1, 2, 3$.

(b) Betrachten Sie die Ortsdarstellung der Drehimpuls-Eigenzustände in Kugelkoordinaten.

(b1) Wie lautet die normierte Kugelflächenfunktion $Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)$?

(b2) Bestimmen Sie $Y_{1,1}(\vartheta, \varphi)$ mit Hilfe der Gleichung $\hat{L}_+ Y_{1,1}(\vartheta, \varphi) = 0$ (wobei $\hat{L}_+ = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$) und der Normierungsbedingung.

(b3) Ausgehend von $Y_{1,1}(\vartheta, \varphi)$ können Sie nun $\hat{L}_- = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$ benutzen, um $Y_{1,0}(\vartheta, \varphi)$ und $Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi)$ zu erhalten.

(b4) Verifizieren Sie, dass in der Tat $\hat{L}_- Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi) = 0$ ist.

(b5) Wie sehen die zu $Y_{1,\pm 1}$ und $Y_{1,0}$ gehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten aus? [Für Mathematica-Fans: Es gibt dort die Funktion `SphericalHarmonicsY`; eine 3D-Darstellung von Funktionen in Kugelkoordinaten ist z.B. durch `ParametricPlot3D` möglich; ein Beispiel ist auf der Vorl-Homepage.]

Aufgabe 28:

In der Vorlesung waren die drei Matrizen Σ_j mit Komponenten $(\Sigma_j)_{km} \equiv -i\epsilon_{jkm}$, also

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

als Generatoren von infinitesimalen Drehungen $[R(\vec{n}, \alpha) \approx \mathbb{1} - i\alpha \vec{n} \cdot \vec{\Sigma}$ für $|\alpha| \ll 1$] eingeführt wurden.

(a) Zeigen Sie, dass $[\Sigma_j, \Sigma_k] = i\epsilon_{jkm} \Sigma_m$ gilt [Einstein-Konvention: Summation über $m = 1, 2, 3$ impliziert].
 (b) Sei die Drehachse $\vec{n} = (0, 0, 1)$. Zeigen Sie, dass dann für einen beliebigen (also auch großen) Winkel α die Rotation als $R(\vec{n}, \alpha) = \exp(-i\alpha \vec{n} \cdot \vec{\Sigma})$ geschrieben werden kann. [Hinweis: gehen Sie von der Darstellung in Aufgabe 26 aus.]

Aufgabe 29:

Betrachten Sie den Bahndrehimpuls-Operator $\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$ in der Ortsdarstellung, und zwar in Kugelkoordinaten $\vec{r} = r(S_C, S_S, C)$ mit $S = \sin(\vartheta)$, $C = \cos(\vartheta)$ und $s = \sin(\varphi)$, $c = \cos(\varphi)$. Leiten Sie seine kartesischen Komponenten her:

$$\hat{L}_1 = -i\hbar \left(-s \partial_\vartheta - \frac{C}{S} \partial_\varphi \right), \quad \hat{L}_2 = -i\hbar \left(c \partial_\vartheta - \frac{C}{S} \partial_\varphi \right), \quad \hat{L}_3 = -i\hbar \partial_\varphi.$$

[Abgabe 29.5. in der Vorlesung; Besprechung 1.6. in den Übungen]

[Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 23:** (2+2+2+4)=10 Punkte

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator, mit Hamilton-Operator

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2.$$

(a) Seien wie in der Vorlesung $\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p}$ und $\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p}$, und seien $|n\rangle$ die normierten Eigenzustände des Hamilton-Operators \hat{H} mit $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ und $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$. Bestimmen Sie, für den Zustand $|n\rangle$,

- (a1) $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$,
- (a2) $\langle \hat{x}^2 \rangle$, $\langle \hat{p}^2 \rangle$,
- (a3) $\Delta x \Delta p$.

(b) Betrachten Sie den harmonischen Oszillator nun im Heisenberg-Bild: es gelten die Bewegungsgleichungen $i\hbar \partial_t \hat{x}_H = [\hat{x}_H, \hat{H}]$ und $i\hbar \partial_t \hat{p}_H = [\hat{p}_H, \hat{H}]$. Wenn Sie nun \hat{H} mit \hat{x}_H, \hat{p}_H statt \hat{x}, \hat{p} ausdrücken und den Kommutator $[\hat{x}_H(t), \hat{p}_H(t)] = i\hbar$ benutzen, können Sie die Lösung für $\hat{x}_H(t)$ leicht bestimmen. [Die richtige Lösung kennen Sie schon aus Aufgabe 22.]

Aufgabe 24:

Zur Erinnerung: Die Vernichtungs- und Erzeugungs-Operatoren des harmonischen Oszillators genügen $[\hat{a}, \hat{a}] = 0 = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]$ sowie $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, und die Eigenwerte des Operators $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ sind die nicht-negativen ganzen Zahlen.

Betrachten Sie nun die Algebra $\{\hat{b}, \hat{b}\} = 0 = \{\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger\}$, $\{\hat{b}, \hat{b}^\dagger\} = 1$ und definieren $\hat{Q} \equiv \hat{b}^\dagger \hat{b}$.

- (a) Was für ein Spektrum und welche Eigenzustände hat \hat{Q} ?
- (b) Welche Physik könnte dahinterstecken?

[Der Antikommutator ist als $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ definiert.]

Aufgabe 25:

Sei \hat{p} ein Projektionsoperator [also $\hat{p}^2 = \hat{p}$]. Zeigen Sie, dass

- (a) die einzig möglichen Eigenwerte von \hat{p} gleich 0 und 1 sind;
- (b) es nur einen linear unabhängigen Zustand mit Eigenwert 1 gibt (Annahme $\text{Sp}(\hat{p}) = 1$).

Aufgabe 26:

Zeigen Sie, dass für eine Drehung um die Achse \vec{n} mit Drehwinkel α gilt:

$$\vec{r}' = R(\vec{n}, \alpha) \vec{r} = \cos(\alpha) \vec{r} + [1 - \cos(\alpha)] (\vec{n} \cdot \vec{r}) \vec{n} + \sin(\alpha) \vec{n} \times \vec{r}.$$

[Abgabe 12.6. in der Vorlesung; Besprechung 15.6. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 30:** ((3+3)+4=10 Punkte)

(a) Ein Teilchen befinde sich in einem Zustand mit Wellenfunktion $\psi(\vec{r}) = C(x+y+2z)e^{-\alpha r}$, wobei C, α Konstanten sind und $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

- (a1) Ist die Wellenfunktion ψ ein Eigenzustand von \hat{L}^2 ? Wenn ja, zu welchem Eigenwert?
- (a2) Zeigen Sie, dass sich bei Messung der z-Komponente des Drehimpulses die Werte $m\hbar$ mit Wahrscheinlichkeiten $P(m=0) = \frac{2}{3}$ und $P(m = \pm 1) = \frac{1}{6}$ ergeben.

[Hinweis: Die Kugelflächenfunktionen aus Aufgabe 27b könnten hilfreich sein:

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \cos(\theta), \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi} \sqrt{\frac{3}{4}} \sin(\theta).]$$

(b) Betrachten Sie ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, das sich im Zustand $|\psi\rangle = \alpha|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \beta|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ befindet (wobei α, β Konstanten sind). Was ist $\langle \hat{S}_x^2 \rangle$, falls in diesem Zustand $\langle \hat{S}_x \rangle = 0$ gilt?

Aufgabe 31:

Der Hamilton-Operator eines Systems sei

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}).$$

Wie in der Vorlesung erwähnt, nennt man in der Quantenmechanik ein System kugelsymmetrisch, falls \hat{H} mit allen Generatoren der Drehungen vertauscht, also $[\hat{H}, \hat{L}_j] = 0$ für $j \in \{1, 2, 3\}$. Unter welchen Bedingungen ist dies der Fall?

Aufgabe 32:

Betrachten Sie ein System aus zwei Spin-1 Teilchen, mit Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \alpha + \beta \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \gamma (\hat{S}_3 + \hat{S}'_3),$$

wobei α, β, γ Konstanten sind. Finden Sie die Energie-Eigenwerte des Systems. [Hinweis: Bestimmen Sie zuerst die Menge der Operatoren, die mit \hat{H} vertauschen.] Gibt es Entartung (also mehrfach vorkommende Eigenwerte)?

[Abgabe 19.6. in der Vorlesung; Besprechung 22.6. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 33:** ((3+2)+5=10 Punkte)

(a) Die u - und d -Quarks ("up" und "down") haben unter Vernachlässigung von elektromagnetischen Phänomenen fast dieselben Eigenschaften. Diese Tatsache führt zu einer (näherungsweise) SU(2)-Invarianz, welche als Isospin-Symmetrie bezeichnet wird. Wir können u und d als die beiden Zustände $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ und $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ identifizieren, und die Antiquarks \bar{u} und \bar{d} als $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ und $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$. Pionen bestehen aus je einem Quark und Antiquark und besitzen die Isospinidentifikationen $\pi^+ = |1, 1\rangle, \pi^0 = |1, 0\rangle$ sowie $\pi^- = |1, -1\rangle$.

- (a1) Können Sie π^+, π^0 und π^- als Linearkombination von $u\bar{u}, u\bar{d}, d\bar{u}$ und $d\bar{d}$ schreiben?
- (a2) Welchen Isospinwert hat der Zustand $(u\bar{u} + d\bar{d})$?

(b) Betrachten Sie nun Zustände mit zwei Pionen, und zwar $|\pi^+\pi^-\rangle, |\pi^0\pi^+\rangle, |\pi^0\pi^0\rangle, |\pi^+\pi^0\rangle$ und $|0, 0\rangle$. Schreiben Sie diese Zustände als Linearkombinationen der Zustände $|2, m\rangle, |1, m\rangle$ und $|0, 0\rangle$. [Hinweis: Sie dürfen die Tabelle der Clebsch-Gordan-Koeffizienten benutzen.]

Aufgabe 34:

Betrachten Sie den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_1^2}{2I_1} + \frac{\hat{L}_2^2}{2I_2} + \frac{\hat{L}_3^2}{2I_3},$$

wobei die I_j Konstanten sind. Der Operator \hat{H} beschreibt übrigens die Bewegung eines freien starren Körpers mit den Hauptträgheitsmomenten I_j . Unter welchen Umständen ist $\langle \hat{L}_1 \rangle$ zeitunabhängig?

Aufgabe 35:

Beweisen Sie, dass ein Coulomb-Potential $V(\vec{r}) = -c/|\vec{r}|$ ($c \in \mathbb{R}$) zum sogenannten *Virialtheorem*

$$\langle \hat{T} \rangle = -\frac{1}{2} \langle V(\vec{r}) \rangle$$

führt, wobei $\hat{T} = \hat{H} - \hat{V} = \hat{p}^2/2\mu$ der Operator der kinetischen Energie ist. Drücken Sie dazu zunächst die Tatsache, dass im Energie-Eigenzustand Erwartungswerte wie z.B. $\langle \vec{r} \cdot \vec{p} \rangle$ zeitunabhängig sind, durch das Ehrenfestische Theorem (vgl. Aufgabe 18) aus, und berechnen Sie dann den dort auftauchenden Kommutator.

35. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over energy coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation: $J \quad M \quad \dots$
 $m_1 \quad m_2$
Coefficients

$1/2 \times 1/2$ $1 \quad 0$
 $1/2 \times 1/2$ $1/2 \quad 1/2$
 $1/2 \times 1/2$ $1/2 \quad -1/2$
 $1/2 \times 1/2$ $1/2 \quad -1/2$
 $1 \times 1/2$ $3/2 \quad 1/2$
 $1 \times 1/2$ $1/2 \quad 3/2$
 $1 \times 1/2$ $3/2 \quad 1/2$
 $1 \times 1/2$ $1/2 \quad 3/2$
 $1 \times 1/2$ $1/2 \quad -1/2$
 $1 \times 1/2$ $-1/2 \quad 3/2$
 $1 \times 1/2$ $-1/2 \quad -1/2$
 $1 \times 1/2$ $-1/2 \quad -1/2$

Notation: $J \quad M \quad \dots$
Coefficients

$3/2 \times 3/2$ $3 \quad 3$
 $3/2 \times 3/2$ $3 \quad 2$
 $3/2 \times 3/2$ $3 \quad 1$
 $3/2 \times 3/2$ $3 \quad 0$
 $3/2 \times 3/2$ $3 \quad -1$
 $3/2 \times 3/2$ $2 \quad 3$
 $3/2 \times 3/2$ $2 \quad 2$
 $3/2 \times 3/2$ $2 \quad 1$
 $3/2 \times 3/2$ $2 \quad 0$
 $3/2 \times 3/2$ $2 \quad -1$
 $3/2 \times 3/2$ $1 \quad 3$
 $3/2 \times 3/2$ $1 \quad 2$
 $3/2 \times 3/2$ $1 \quad 1$
 $3/2 \times 3/2$ $1 \quad 0$
 $3/2 \times 3/2$ $1 \quad -1$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad 3$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad 2$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad 1$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad 0$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad -1$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad -2$
 $3/2 \times 3/2$ $0 \quad -3$

$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$
 $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos \theta$
 $Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
 $Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$
 $Y_2^1 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
 $Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$

Figure 35.1: The sign convention is that of Wigner (Group Theory, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, New York, 1957), and Cohen (Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.

[Abgabe 3.7. in der Vorlesung; Besprechung 6.7. in den Übungen]
 [Ü: 8-10 (D01-249); 10-12 (D01-112A, D2-240, D3-203); 12-14 (C01-252, D6-135)]

***Aufgabe* 39:** (5+5=10 Punkte)

(a) Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit kleiner ($|\lambda| \ll 1$) Störung,

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad \text{und} \quad \hat{H}_1 \equiv \hat{x}^6.$$

Berechnen Sie die Energieverschiebung $E_n^{(1)}$ des n -ten Zustands in erster Ordnung Störungstheorie, d.h. $E_n = E_{0n} + \lambda E_n^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)$, wobei E_{0n} das Spektrum von \hat{H}_0 ist. [Hinweis: Leiteroperatoren benutzen] Schätzen Sie ab, wie groß λ werden darf, damit die Störungstheorie bis zum n -ten Niveau anwendbar bleibt.

(b) Berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms mit Hilfe des Ritz'schen Variationsverfahrens mit dem Variationsansatz

$$\psi_\gamma(\vec{r}) = C e^{-\gamma r}$$

mit der Normierungskonstanten $C > 0$ und dem Variationsparameter $\gamma > 0$. [Die stationäre Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten lautet (vgl. Vorlesung) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} [\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r] + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) \psi = E\psi$. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem aus Kap.6.2. bekannten exakten Wert von E_1 .

Aufgabe 40:

Ein Teilchen der Masse m befindet sich in einem unendlich tiefen Kastenpotential der Breite a (also im Potential $V(x) = 0$ für $0 < x < a$ und $V(x) = \infty$ sonst) im Grundzustand (vgl. Aufgabe 8). Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im neuen Grundzustand befindet, wenn plötzlich die rechte Wand von a nach $b > a$ verschoben wird. [Hinweis: $2 \sin(\alpha) \sin(\beta) = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$ könnte beim Integrieren hilfreich sein.] Skizzieren Sie Ihr Ergebnis in Abhängigkeit von $z \equiv \frac{a}{b}$, und testen Sie, ob sich für $z \rightarrow 1$ der (welcher?) erwartete Wert ergibt.

Aufgabe 41: Klausurvorbereitung

(a) Beginnen Sie damit, die wichtigsten Aussagen jedes Kapitels der QM-Vorlesung kurz zusammenzufassen. Fangen Sie mit einer DINA4 Seite pro Kapitel an, und kondensieren Sie diese Information während der nächsten drei Wochen auf DINA5, dann DINA6. [Danach wird ein "Spickzettel" fast überflüssig.]

(b) Gehen Sie die Übungsblätter, Ihre entsprechenden Lösungen und Ihre Notizen aus den Tutorien durch, und machen Sie sich jeweils die qualitativ wichtigsten Aspekte klar: "Was war gefragt?" / "Was war zu tun?" / "Was wurde benutzt?"

[Spickzettel bereitlegen : Wecker auf 2 Stunden stellen : Alle Aufgaben lesen, selektiv bearbeiten]
 [Nach 2h Blatt umdrehen, korrigieren : 50 Punkte, bei ≥ 25 hätten Sie bestanden]

Aufgabe 1: (18 Punkte)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in einem dreidimensionalen Potential

$$V(r) = -A \delta(r - a),$$

wobei A, a positive reelle Konstanten sind. Finden Sie die Wellenfunktionen und Energien der gebundenen Zustände für S -Zustände (also $\ell = 0$ und $\ell = 1$).

[Hinweis: Sie müssen die Wellenfunktionen nicht normieren.]

Aufgabe 2: (10 Punkte)

Berechnen Sie die Verschiebung der Grundzustandsenergie eines eindimensionalen harmonischen Oszillators, der jeweils die folgenden kleinen Störungen erfährt (A, B sind Konstanten):

(a) $\hat{H}_1 = A \hat{x}^4,$

(b) $\hat{H}_1 = B \hat{p}^4,$

wobei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ ist.

Aufgabe 3: (10 Punkte)

Sei \hat{L} ein Drehimpulsoperator und $\hat{L}_3 |m\rangle = \hbar m |m\rangle$. Berechnen Sie die folgenden Erwartungswerte:

(a) $\langle m | \hat{L}_1 | m \rangle$ sowie $\langle m | \hat{L}_2 | m \rangle,$

(b) $\langle m | \hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2 | m \rangle,$

(c) $\langle m | \hat{L}_1 \hat{L}_2 + \hat{L}_2 \hat{L}_1 | m \rangle.$

Aufgabe 4: (12 Punkte)

Unter welchen Bedingungen beschreibt die Matrix

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & e \end{pmatrix}$$

den statistischen Operator eines reinen Zustandes?

[Spickzettel bereitlegen : Wecker auf 2 Stunden stellen : Alle Aufgaben lesen, selektiv bearbeiten]
 [Nach 2h Blatt umdrehen, korrigieren]

Aufgabe 1:

Strategie: löse Schrödinger-Glg in Kugelkoord, $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r)\right]\psi = E\psi$, in den Bereichen I ($0 < r < a$) und II ($r > a$); Anschlussbed. bei $r = a$, Delta per Integral!

Ansatz: $\psi(\vec{r}) = \frac{u_{\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ für $\ell = 0$ in SG $\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + V(r)\right]u_{\ell 0}(r) = E u_{\ell 0}(r)$

Bereichs-Lsg: $u_I = B \sinh(\kappa r)$, $u_{II} = C e^{-\kappa r}$ wegen Randbed $u(0) = 0 = u(\infty)$, mit $\kappa \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$, Stetigkeit bei $r = a$: $B \sinh(\kappa a) = C e^{-\kappa a} \Rightarrow C = \frac{B}{2}(e^{2\kappa a} - 1)$

bed. $\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} (SG) : -\frac{\hbar^2}{2m}u'_I(a) + \frac{\hbar^2}{2m}u'_I(a) + \frac{\hbar^2}{2m}u'_I(a) - Au(a) = 0 \Leftrightarrow -\kappa C e^{-\kappa a} - \kappa B \cosh(\kappa a) = -\frac{2m\Delta}{\hbar^2} B \sinh(\kappa a)$

C einsetzen, vereinfachen $\Rightarrow \frac{\hbar^2 \kappa}{2m} \Rightarrow \frac{\hbar^2 \kappa}{2m} (1 - e^{-2\kappa a})$ ist Bedingung an κ alias E (Lsg graphisch über $2\kappa a$ -Achse: lhs=Gerade durch Ursprung, rhs steigt von 0 asymptotisch auf 1; kein Schnittpkt für $\hbar^2 < 2am\Delta$; genau ein Bindungszustand sonst)

insgesamt also $(Y_{00} = \text{const}) : \psi_I = D \frac{\sinh(\kappa r)}{r}$ und $\psi_{II} = D(e^{2\kappa a} - 1) \frac{e^{-\kappa r}}{2r}$ mit D aus Norm, und κ bzw E aus graphischer Lsg von (*)

Aufgabe 2:

benutze Erzeugungs- und Vernichtungs-Op's des harm.Osz, $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p$; $a^\dagger = \dots$, sowie Normierung $\langle n | n \rangle = \sqrt{n} | n - 1 \rangle$; $a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n + 1 \rangle$

(a) $E_0^{(1)} = \langle 0 | H_1 | 0 \rangle = A \langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \frac{A\hbar^2}{4m^2\omega^2} \langle 0 | (a + a^\dagger)^4 | 0 \rangle = \frac{A\hbar^2}{4m^2\omega^2} (0 | a a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger | 0) = \frac{3A\hbar^2}{4m^2\omega^2}$

(b) geht genauso (und stellt eine relativistische Korrektur zur kinetischen Energie dar): $E_0^{(1)} = B \langle 0 | p^4 | 0 \rangle = \frac{Bm^2\omega^2\hbar^2}{4} \langle 0 | (a^\dagger - a)^4 | 0 \rangle = \frac{3Bm^2\omega^2\hbar^2}{4}$

Aufgabe 3:

benutze Leiterop's $L_\pm = L_1 \pm L_2$, wobei $L_\pm | m \rangle \sim | m \pm 1 \rangle$, sowie Orthogonalität $\langle m | m \pm 1 \rangle = 0$

(a) $\langle m | L_1 | m \rangle = \frac{1}{2} \langle m | L_+ + L_- | m \rangle = 0$ und $\langle m | L_2 | m \rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle m | L_+ - L_- | m \rangle = 0$

(b) $= \frac{1}{4} \langle m | (L_+ + L_-)^2 + (L_+ - L_-)^2 | m \rangle = \frac{1}{2} \langle m | L_+^2 - L_-^2 | m \rangle = 0$

(c) $= \frac{1}{4\sqrt{3}} \langle m | (L_+ + L_-)(L_+ - L_-) + (L_+ - L_-)(L_+ + L_-) | m \rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle m | L_+^2 + L_-^2 | m \rangle = 0$

Aufgabe 4:

Bedingungen: (a) $p^\dagger = \rho$ (b) $\text{Sp}(\rho) = 1$ (c) $\rho^2 = \rho$

es folgt (a) a, d, e reell; $c = b^*$ (b) $a + d + e = 1$ (c) $\rho^2 = \begin{pmatrix} a^2 + bc & (a+d)b & 0 \\ (a+d)c & bc + d^2 & 0 \\ 0 & 0 & e^2 \end{pmatrix}$

wegen (c) muss $e \in \{0, 1\}$ sein, zwei Fälle: $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$e = 1$: (b) $\Rightarrow a + d = 0$; (c) $\Rightarrow b = 0 = c, a = 0$, also $\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$e = 0$: (b) $\Rightarrow a + d = 1$; (c) $\Rightarrow a = a^2 + b^*b \Rightarrow a(1 - a) \geq 0 \Rightarrow a \in [0..1]$ und $b^*b = a(1 - a) \Rightarrow b = \sqrt{a(1 - a)} e^{i\varphi}$, also $\rho = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ b^* & 1 - a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ mit $a \in [0..1]$ und $b = \sqrt{a(1 - a)} e^{i\varphi}$, φ bel.

Aufgabe 1: Bindungszustand im eindimensionalen Potential

Weichen Wert muss L haben, damit die Grundzustandsenergie eines Teilchens (m) im Potential

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } a < |x| < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

den Wert Null hat? [Strategie: V-Skizze, Bereiche, Dgl, Ansätze, Lsg, Anschluss, Antwort.]

Aufgabe 2: Drehimpuls

Sei \hat{S} ein Spin-Operator und $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ der Gesamtdrehimpuls.

(a) Drücken Sie den Operator \hat{J}^2 durch $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_3, \hat{S}_3$ sowie die Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$ und $\hat{S}_\pm = \hat{S}_1 \pm i\hat{S}_2$ aus.

(b) Die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2$ und \hat{S}_3 seien $|\ell, m_\ell, s, m_s\rangle$. Zeigen Sie, dass $|\ell, s, s\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{J}^2 ist und geben Sie den zugehörigen Eigenwert an.

[Hinweis: Für die Leiteroperatoren gilt (Condon-Shortley) $\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle$]
 (c) Betrachten Sie nun den Zustand $|\psi\rangle = a_{\ell m} |\ell, m - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + b_{\ell m} |\ell, m + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$. Wie muss das Verhältnis $\frac{b_{\ell m}}{a_{\ell m}}$ sein, damit $|\psi\rangle$ ein \hat{J}^2 -Eigenzustand zum Eigenwert $j = \ell + \frac{1}{2}$ ist?

Aufgabe 3: Rayleigh-Ritz Variationsverfahren

Betrachten Sie den eindimensionalen harmonischen Oszillator $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, und bestimmen Sie eine obere Schranke für dessen Grundzustandsenergie E_0 per Variationsansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} C \left(1 - \frac{|x|}{a}\right) & \text{für } |x| \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei $C > 0$ eine Normierungskonstante und a der Variationsparameter sei.

(a) Bestimmen Sie C per Normierungsbedingung.

(b) Berechnen Sie das notwendige Matrixelement.

(c) Bestimmen Sie das optimale a und vergleichen Sie mit dem exakten Ergebnis für E_0 .

Aufgabe 4: Störungstheorie in zweiter Ordnung

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ mit $|\lambda| \ll 1$. Das ungestörte System \hat{H}_0 sei bereits gelöst: $\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_{0n} |\varphi_n\rangle$. Leiten Sie den Ausdruck für $E_n^{(2)}$ der Entwicklung $E_n = E_{0n} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3)$ her, wobei $\hat{H}_1 |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$ ist. Drücken Sie schliesslich $E_n^{(2)}$ durch die $E_{0n}, |\varphi_n\rangle$ und \hat{H}_1 aus. [Hinweis: In erster Ordnung hatten wir $|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_{0n} - E_{0p}} |\varphi_p\rangle$ erhalten.]

Aufgabe 1:

Aussenbereich, $|x| > L$: $\psi(x) = 0 \Rightarrow \psi(\pm L) = 0$

Bereich I, $a < x < L$: $SG - \partial_x^2 \psi_I = 0 \cdot \psi_I$, Lsg $\psi_I(x) = Ax + B = A(x - L)$

Bereich II, $-a < x < a$: $SG - \partial_x^2 - \kappa^2 \psi_{II} = 0 \cdot \psi_{II}$, Lsg $\psi_{II}(x) = C \cos(\kappa x) + D \sin(\kappa x)$,

$D = 0$ da Grundzustand keine Knoten hat

Anschluss $\psi_I(a) \stackrel{!}{=} \psi_{II}(a) \Rightarrow A(a - L) = C \cos(\kappa a)$

$\psi_I'(a) \stackrel{!}{=} \psi_{II}'(a) \Rightarrow A = -\kappa C \sin(\kappa a)$

Teilen der beiden letzten Gln führt auf $L = a + \frac{\cos(\kappa a)}{\kappa \sin(\kappa a)}$

Aufgabe 2:

- (a) $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{S} \cdot \vec{L}$ wegen $[\vec{S}, \vec{L}] = 0$; und mit $2\vec{S} \cdot \vec{L} = 2S_3L_3 + 2S_1L_1 + 2S_2L_2 = 2S_3L_3 + S_+L_- + S_-L_+$ gilt insgesamt $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2S_3L_3 + S_+L_- + S_-L_+$
- (b) $\vec{J}^2|\ell, \ell; s, s\rangle \stackrel{(a)}{=} \hbar^2 [\ell(\ell+1) + s(s+1) + 2ls + 0 + 0] |\ell, \ell; s, s\rangle = \hbar^2(\ell+s)(\ell+s+1) |\ell, \ell; s, s\rangle$
- (c) $\vec{J}^2|\psi\rangle \stackrel{(a)}{=} \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + (m - \frac{1}{2}) + 0 + \frac{b_{\ell m}}{a_{\ell m}} \sqrt{(\ell+m+\frac{1}{2})(\ell-m+\frac{1}{2})} \right] a_{\ell m} |\ell, m - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} - (m + \frac{1}{2}) + 0 + \frac{a_{\ell m}}{b_{\ell m}} \sqrt{(\ell-m+\frac{1}{2})(\ell+m+\frac{1}{2})} \right] b_{\ell m} |\ell, m + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

Also muss die erste [...] $\stackrel{!}{=} j(j+1) = (\ell+\frac{1}{2})(\ell+\frac{3}{2}) = \ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + \ell$ sein, woraus $\frac{b_{\ell m}}{a_{\ell m}} = \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{\ell+m+\frac{1}{2}}}$

folgt, und mit diesem Wert ist auch die zweite [...] $= \ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + \ell = j(j+1)$.

Aufgabe 3:

- (a) $1 \stackrel{!}{=} \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^2(x) = C^2 2 \int_0^a dx (1 - \frac{x}{a})^2 = C^2 2(a - a + \frac{a}{3}) \Rightarrow C = \sqrt{\frac{3}{2a}}$
- (b) $E_0 \leq \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi(x) \psi''(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 \int dx x^2 \psi^2(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2C^2}{a} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{C^2 a^3}{15}$
 $\Rightarrow E_0 \leq \frac{\hbar \omega}{2} \left[\frac{3}{A} + \frac{A}{10} \right]$ mit $A \equiv \frac{m \omega}{\hbar} a^2$
- (c) $[\gamma]' = -\frac{3}{\gamma^3} + \frac{1}{\gamma} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow A = \pm \sqrt{30}$; $[\gamma]'' = \frac{6}{\gamma^4} > 0 \Rightarrow A = +\sqrt{30}$ ist Minimum
 $\Rightarrow E_0 \leq \frac{\hbar \omega}{2} \sqrt{\frac{6}{5}}$; Schranke ist nur ca 10% über exaktem Ergebnis.

Aufgabe 4:

λ^2 -Koeff-Vergl in SG $(H_0 + \lambda H_1 - E_{0n} - \lambda E_n^{(1)} - \lambda^2 E_n^{(2)} - \dots)(\varphi_n + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots) = 0$ liefert $(H_0 - E_{0n})\psi_n^{(2)} + (H_1 - E_n^{(1)})\psi_n^{(1)} - E_n^{(2)}\varphi_n = 0$. Operiere auf diese Glg v.li. mit $\int dx \varphi_n^\dagger \Rightarrow \langle \varphi_n | H_0 - E_{0n} | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \varphi_n | H_1 - E_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(2)} \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0$

Erste (...) = 0 da H_0 hermitesch, letzte=1 (Norm), $\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle \varphi_n | H_1 | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \varphi_n | \psi_n^{(1)} \rangle$

1. Ordnung $\psi_n^{(1)}$ einsetzen $\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \langle \varphi_n | H_1 | \varphi_p \rangle \frac{\langle \varphi_p | H_1 | \psi_n^{(1)} \rangle}{E_{0n} - E_{0p}} - E_n^{(1)} \cdot 0 = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | H_1 | \varphi_n \rangle^2}{E_{0n} - E_{0p}}$