

Verständnisfragen Quantenmechanik

Robert Klas

26. September 2012

Für Korrekturvorschläge bin ich stets dankbar
klas@rhrk.uni-kl.de

Inhaltsverzeichnis

1	Mathematische Grundlagen	3
2	Einfache Beispiele und Propagator	14
3	Das Konzept der Ortsbasis	19
4	Die Unschärferelation	24
5	Symmetrien und Erhaltungsgrößen	27
6	Das Ehrenfesttheorem	30
7	Einfache Beispiele in einer Dimension	32
8	Der harmonische Oszillator	40
9	Produktzustände	50
10	Der Drehimpulsoperator	55
11	Rotationsinvariante Probleme	65
12	Das Wasserstoffatom	75
13	Elektromagnetische Felder in der Quantenmechanik	80
14	Paulimatrizen	87
15	Die WKB-Methode	91
16	Addition von Drehimpulsen	95
17	Die Variationsmethode	99
18	Störungstheorie	101

1 Mathematische Grundlagen

1. Nenne die Grundlegenden Postulate der Quantenmechanik.

- Der Zustand eines Teilchens/ Systems wird durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem Hilbertraum ausgedrückt.
- Messgrößen $(\vec{x}, \vec{p}, \vec{l}, E, \dots)$ werden mit Operatoren $(\vec{X}, \vec{P}, \vec{L}, H, \dots)$ beschrieben.
Es soll gelten:

$$E(\vec{x}, \vec{p}) \rightarrow H(\vec{X}, \vec{P})$$

- Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödingergleichung beschrieben:

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$$

Wobei $H \equiv \text{Hamiltonoperator}$

- Eine Messung einer Größe entsprechend dem Operator Λ Kann nur Eigenwerte λ von Λ annehmen.

$$\Lambda|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (\text{Eigenwertgleichung})$$

Die Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch das innere Produkt:

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

mit $|a\rangle \equiv \text{Anfangszustand}$

Danach ist das System im Zustand $|\psi\rangle$ „Kollaps der Wellenfunktion“.

2. Definiere das Konzept des „Linearen Vektorraums“.

Ein linearer Vektorraum besteht aus einer nicht-leeren Menge V sowie zwei zweistelligen Operationen:

$$\begin{aligned} + : V \times V &\rightarrow V : (|x\rangle, |y\rangle) \mapsto |x\rangle + |y\rangle \\ \cdot : K \times V &\rightarrow V : (\lambda, |x\rangle) \mapsto \lambda \cdot |x\rangle \end{aligned}$$

Die sogenannte Vektorraumaddition und Skalarmultiplikation, so dass die folgenden Gesetze gelten:

- a) $(V, +)$ ist eine abelsche Gruppe.
- b) für $\lambda, \mu \in K$ und $|x\rangle, |y\rangle \in V$ gelten

- i. $(\lambda + \mu) \cdot |x\rangle = \lambda \cdot |x\rangle + \mu \cdot |x\rangle$
- ii. $\lambda \cdot (|x\rangle + |y\rangle) = \lambda \cdot |x\rangle + \lambda \cdot |y\rangle$
- iii. $(\lambda \cdot \mu) \cdot |x\rangle = \lambda \cdot (\mu \cdot |x\rangle)$
- iv. $1 \cdot |x\rangle = |x\rangle$

3. **Was bedeutet es wenn Vektoren „linear unabhängig“ sind?**

Eine Menge $\{|a_i\rangle | i = 1, \dots, n\} \subseteq V$ heißt linear unabhängig, falls gilt:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i |a_i\rangle = 0 \implies \alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$$

4. **Was ist eine Basis und die Dimension eines Vektorraums? Zeige, dass die Darstellung eines beliebigen Vektors in einer Basis eindeutig ist.**

Ein Vektorraum ist n-dimensional falls es maximal n linear unabhängige Vektoren gibt. Diese n linear unabhängigen Vektoren nennt man die Basis.

Sei $\{|a_i\rangle | i = 1, \dots, n\}$ eine Basis eines Vektorraums und seien

$$|b\rangle = \sum_{i=1}^n \beta_i |a_i\rangle$$

$$|c\rangle = \sum_{i=1}^n \gamma_i |a_i\rangle$$

dann folgt für $|b\rangle = |c\rangle$:

$$0 = |b\rangle - |c\rangle = \sum_{i=1}^n \beta_i |a_i\rangle - \sum_{i=1}^n \gamma_i |a_i\rangle = \sum_{i=1}^n (\beta_i - \gamma_i) |a_i\rangle$$

\Rightarrow da die $|a_i\rangle$ linear unabhängig sind :

$$\beta_i - \gamma_i = 0$$

$$\beta_i = \gamma_i$$

Also ist die Darstellung eines beliebigen Vektors in einer Basis eindeutig.

5. **Definiere das Konzept des „Inneren Produktes“. Wann sind zwei Vektoren orthogonal? Wann ist ein Vektor normiert?**

Das innere Produkt $\langle a|b\rangle$ ist eine Verknüpfung mit folgenden Eigenschaften:

- a) $\langle a|a\rangle \geq 0 \quad \forall |a\rangle$
 $\langle a|a\rangle = 0 \iff |a\rangle = 0$
- b) $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$
- c) $\langle c|(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\langle c|a\rangle + \beta\langle c|b\rangle$

Zwei Vektoren sind orthogonal falls:

$$\langle a|b\rangle = 0$$

Ein Vektor ist normiert falls

$$\left| |a\rangle \right| := \sqrt{\langle a|a\rangle} = 1$$

6. **Zeige wie die Darstellung von Vektoren mit Koeffizienten in einer orthonormalen Basis zur Bestimmung des inneren Produktes dienen kann. Umgekehrt, wie kann die Darstellung mit Hilfe des inneren Produktes bestimmt werden?**

Seien:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle \quad \langle b| = (\beta_1^* \ \cdots \ \beta_n^*) = \sum_{i=1}^n \beta_i^* \langle e_i|$$

Dann gilt mit der Matrixmultiplikation:

$$\begin{aligned} \langle b|a\rangle &= (\beta_1^* \ \cdots \ \beta_n^*) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \beta_i^* \langle e_i| \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j |e_j\rangle \right) \\ &= \sum_{i,j} \alpha_j \beta_i^* \underbrace{\langle e_i|e_j\rangle}_{=\delta_{ij}} \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \beta_i^* \end{aligned}$$

Also kann man über die Matrixmultiplikation von Vektoren in einer orthonormalen Basis das innere Produkt definieren.

Umgekehrt kann man einen beliebigen Vektor $|a\rangle$ in einer orthonormalen Basis über eine Projektion auf die Basis Vektoren darstellen. Es gilt dann für die Koeffizienten:

$$\langle e_i|a\rangle = \langle e_i| \sum_j \alpha_j |e_j\rangle = \sum_j \alpha_j \langle e_i|e_j\rangle = \alpha_i$$

7. **Was ist die Dreiecks- und Schwarzsche Ungleichung?**

Mit $||a\rangle| := \sqrt{\langle a|a\rangle}$ gilt die Dreiecksungleichung:

$$||a\rangle| + ||b\rangle| \geq ||a\rangle + |b\rangle|$$

Sowie die Schwarzsche Ungleichung:

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \\ \Rightarrow \cos^2(\theta) = \frac{|\langle a|b\rangle|^2}{\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle}$$

8. **Wozu dient die Gram-Schmidt Methode? Beschreibe sie.**

Die Gram-Schmidt Methode dient zur Orthonormalisierung einer nicht orthonormalen Basis. Sei nun $\{|a_i\rangle | i = 1, \dots, n\}$ eine nicht orthonormale Basis. Führe nun nacheinander für $i=1, \dots, n$ folgende Schritte aus:

- a) Berechne die Summe $|y_i\rangle = |a_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} \langle e_j|a_i\rangle |e_j\rangle$
- b) Berechne $|e_i\rangle = \frac{|y_i\rangle}{||y_i\rangle|}$

9. **Definiere „Lineare Abbildung“ (Operatoren).**

Ein Operator Λ entspricht einer linearen Abbildung $f : V \rightarrow V : |a\rangle \mapsto |b\rangle$.

Also:

$$\Lambda|a\rangle = f(|a\rangle) = |b\rangle \\ f(\alpha|a\rangle + \beta|c\rangle) = \alpha f(|a\rangle) + \beta f(|c\rangle) \\ \Lambda(\alpha|a\rangle + \beta|c\rangle) = \alpha\Lambda|a\rangle + \beta\Lambda|c\rangle$$

10. **Zeige, dass eine lineare Abbildung eindeutig durch ihre Wirkung auf die Basis definiert werden kann. Welche Koeffizienten müssen konkret berechnet werden um die Abbildung zu definieren? Zeige, warum eine Anordnung der Koeffizienten als Matrix sinnvoll ist.**

Im Fall der Basisdarstellung $|a\rangle = \sum_j \alpha_j |e_j\rangle$ gilt:

$$\Lambda|a\rangle = \Lambda \sum_j \alpha_j |e_j\rangle = \sum_j \alpha_j \Lambda|e_j\rangle$$

Sei nun $\Lambda|e_j\rangle = |\omega_j\rangle$ bekannt:

$$\Lambda|a\rangle = \sum_j \alpha_j |\omega_j\rangle$$

Nun gilt aber auch für die Entwicklung der $|\omega_j\rangle$ in der Basis:

$$|\omega_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \omega_j \rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \Lambda | e_j \rangle$$

mit den Koeffizienten:

$$\Lambda_{ij} = \langle e_i | \Lambda | e_j \rangle$$

Λ_{ij} heißt Matrixelement von Λ in einer gegebenen Basis. Also gilt mit $\beta_i = \sum_j \Lambda_{ij} \alpha_j$:

$$\Lambda | a \rangle = \sum_j \alpha_j |\omega_j\rangle = \sum_j \alpha_j \sum_i \Lambda_{ij} | e_i \rangle = \sum_i \beta_i | e_i \rangle$$

Und dies ist eine Matrixmultiplikation:

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \cdots & \Lambda_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{n1} & \cdots & \Lambda_{nm} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}$$

11. **Beschreibe wie man aus der Matrixdarstellung in einer orthonormalen Basis den zugehörigen Operator definieren kann.**

Wenn man alle Λ_{ij} kennt dann gilt für den zugehörigen Operator:

$$\Lambda = \sum_{i,j} \Lambda_{ij} | e_i \rangle \langle e_j |$$

12. **Was ist ein äußeres Produkt von Vektoren? Was ist die Vollständigkeitsrelation?**

Das äußere Produkt von Vektoren ist ein Operator, denn es gilt:

$$| a \rangle \langle b | = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} (\beta_1^* \cdots \beta_n^*) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \beta_1^* & \cdots & \alpha_1 \beta_n^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_n \beta_1^* & \cdots & \alpha_n \beta_n^* \end{pmatrix}$$

Die Vollständigkeitsrelation ist die Entwicklung:

$$I = \sum_{i,j} \delta_{ij} | e_i \rangle \langle e_j | = \sum_i | e_i \rangle \langle e_i |$$

13. **Zeige, dass die Matrix eines Operatorprodukts durch die Multiplikation der Matrizen gegeben ist.**

Für die Anwendung von 2 Operatoren Λ, Ω gilt:

$$\begin{aligned}
 \Omega\Lambda|a\rangle &= \Omega \sum_{i,j} \Lambda_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|a\rangle \\
 &= \sum_{k,l} \sum_{i,j} \Omega_{kl} \Lambda_{ij} |e_k\rangle \underbrace{\langle e_l|e_i\rangle}_{=\delta_{li}} \langle e_j|a\rangle \\
 &= \sum_{k,j} \underbrace{\sum_l \Omega_{kl} \Lambda_{lj}}_{=(\Omega\Lambda)_{kj}} |e_k\rangle \langle e_j|a\rangle \\
 \Rightarrow \Omega\Lambda &= \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \cdots & \Omega_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Omega_{n1} & \cdots & \Omega_{nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \cdots & \Lambda_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{n1} & \cdots & \Lambda_{nm} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

14. **Was ist ein Kommutator**

Ein Kommutator zweier Operatoren ist gegeben durch:

$$[\Omega, \Lambda] = \Omega\Lambda - \Lambda\Omega$$

15. **Was versteht man unter einem dualen Vektor? Was ist ein adjungierter Operator? Wie erhalte ich aus einem beliebigen Ausdruck die äquivalente Schreibweise im dualen Raum?**

Zu jedem Vektor

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \in V$$

existiert ein dualer Vektor

$$\langle a| = (\alpha_1^* \cdots \alpha_n^*) \in \bar{V}$$

Ein Adjungierter Operator Λ^\dagger zu Λ entspricht der komplex Konjugierten und transponierten Matrix von Λ

$$(\Lambda^\dagger)_{ij} = (\Lambda^T)_{ij}^* = \Lambda_{ji}^*$$

Nun gilt:

$$\Lambda|a\rangle = |b\rangle \Leftrightarrow \langle b| = \langle a|\Lambda^\dagger$$

16. Definiere a) hermitesch b) unitär c) umkehrbar d) Projektion. Diskutiere, ob das Produkt von jeweils zwei hermiteschen, unitären, umkehrbaren oder Projektions-Operatoren wiederum im allgemeinen die gleiche Definition erfüllt. Welche Abbildung erfüllt alle vier Definitionen gleichzeitig?

- a) Ein Operator heißt hermitesch falls gilt

$$\Lambda = \Lambda^\dagger$$

Das Produkt zweier hermitescher Operatoren ist im Allgemeinen nicht hermitisch, sondern nur wenn $[\Lambda, \Omega] = 0$, denn:

$$(\Omega\Lambda)^\dagger = \Lambda^\dagger\Omega^\dagger = \Lambda\Omega \neq \Omega\Lambda$$

- b) Ein Operator heißt unitär falls

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I_n$$

das heißt

$$U^{-1} = U^\dagger$$

Das Produkt zweier unitärer Operatoren ist unitär, denn:

$$(U_1 U_2)^\dagger (U_1 U_2) = U_2^\dagger \underbrace{U_1^\dagger U_1}_{=I_n} U_2 = U_2^\dagger U_2 = I_n$$

- c) Ein Operator heißt umkehrbar, falls ein Λ^{-1} existiert sodass

$$\Lambda \Lambda^{-1} = \Lambda^{-1} \Lambda = I_n$$

ist.

Das Produkt zweier umkehrbarer Operatoren ist wieder umkehrbar, denn:

$$(\Lambda\Omega)^{-1}(\Lambda\Omega) = \Omega^{-1} \underbrace{\Lambda^{-1}\Lambda}_{=I_n} \Omega = \Omega^{-1}\Omega = I_n$$

- d) Ein Operator heißt Projektion, falls gilt

$$P^2 = P$$

Das Produkt zweier Projektionen ist im Allgemeinen keine Projektion, denn:

$$(P_1 P_2)^2 = P_1 P_2 P_1 P_2 \neq P_1 P_1 P_2 P_2 = P_1 P_2$$

Ein Beispiel für einen Operator der alle vier Definitionen gleichzeitig erfüllt ist die Identität.

17. **Zeige, dass unitäre Transformationen das innere Produkt erhalten.**
Sei

$$|a'\rangle = U|a\rangle \qquad |b'\rangle = U|b\rangle$$

dann gilt:

$$\langle a'|b'\rangle = \langle a|U^\dagger U|b\rangle = \langle a|b\rangle$$

Insbesondere gilt mit $|e'_j\rangle = U|e_j\rangle$

$$\Rightarrow \langle e'_i|e'_j\rangle = \langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$$

Das heißt die Basis $\{|e'_1\rangle, \dots, |e'_n\rangle\} = \{U|e_1\rangle, \dots, U|e_n\rangle\}$ ist wiederum eine Orthonormalbasis.

18. **Was versteht man unter einer aktiven und einer passiven Transformation? Was passiert in den jeweiligen Fällen mit den Koeffizienten eines Vektors und den Operatoren?**

Es gilt: $|a'\rangle = U|a\rangle = \sum_i \alpha'_i |e_i\rangle = U \sum_i \alpha_i |e_i\rangle = \sum_i \alpha_i |e'_i\rangle$

- a) Bei der aktiven Transformation ändert die unitäre Transformation die Koeffizienten $\alpha'_i = \sum_j U_{ij} \alpha_j$ aller Vektoren in der gleichen Basis mit gleichen Operatoren.
- b) Bei der passiven Transformation ändert eine unitäre Transformation die Basisvektoren $|e'_j\rangle = U|e_j\rangle$ mit gleichbleibenden Koeffizienten. Entsprechend müssen aber alle Matrixelemente aller Operatoren geändert werden.

$$\langle e'_i|\Lambda|e'_j\rangle = \langle e_i|U^\dagger \Lambda U|e_j\rangle$$

Das heißt $\Lambda \rightarrow U^\dagger \Lambda U$ für alle Operatoren.

19. **Was ist eine Eigenwertgleichung für Operatoren? Was sind einfache Beispiele von Eigenwerten/ Eigenvektoren der Projektion, der Identität und der ?**

Eine Eigenwertgleichung ist: $\Lambda|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$.

- a) Bei der Projektion gilt $P^2 = P$. Hieraus folgt mit der Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} P|u\rangle &= p|u\rangle \\ \Rightarrow p &= 1 && \text{oder} && p = 0 \end{aligned}$$

Die Eigenvektoren sind leicht zu überlegen, es sind einmal die Vektoren, die den Unterraum aufspannen in den projiziert wird, und die Vektoren, die im orthogonalen Komplement zu diesem Unterraum liegen.

- b) Bei der Identität gibt es nur den Eigenwert 1 und jeder Vektor ist ein Eigenvektor, da die Identität jeden Vektor reproduziert.
c) Bei Drehung im Raum ist der Eigenwert 1, wobei der zugehöriger Eigenvektor auf der Drehachse liegt.

20. **Zeige, dass es eine charakteristische Gleichung gibt, die eine notwendige Bedingung für die Existenz eines nicht-trivialen Eigenwerts darstellt.**

Es muss gelten

$$\begin{aligned} \Lambda|\lambda\rangle &= \lambda|\lambda\rangle = \lambda I|\lambda\rangle \\ \Rightarrow \Lambda|\lambda\rangle - \lambda I|\lambda\rangle &= (\Lambda - \lambda I)|\lambda\rangle = 0 \end{aligned}$$

Falls nun $(\Lambda - \lambda I)$ umkehrbar

$$\begin{aligned} \Rightarrow (\Lambda - \lambda I)^{-1}(\Lambda - \lambda I)|\lambda\rangle &= |\lambda\rangle = (\Lambda - \lambda I)^{-1}0 = 0 \\ \Rightarrow |\lambda\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Also existiert nur die triviale Lösung $|\lambda\rangle = 0$. Also muss man fordern das $(\Lambda - \lambda I)$ nicht umkehrbar ist.

$$\Rightarrow \chi_\Lambda := \det(\Lambda - \lambda I) = 0$$

21. **Formuliere und löse das Eigenwertproblem für eine Drehung um $\frac{\pi}{2}$ um eine Achse im drei-dimensionalen Raum.**

Der Operator

$$D = (|e_z\rangle\langle e_z| + |e_y\rangle\langle e_x| - |e_x\rangle\langle e_y|)$$

beschreibt die Rotation um $\frac{\pi}{2}$ um die z-Achse. Wenn man D als Matrix schreibt gilt:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \chi_D = (1 - \lambda)(\lambda^2 + 1) = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = 1; \lambda_2 = i; \lambda_3 = -i$$

Nun folgen mittels Gauss-Algorithmus:

$$|\lambda_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; |\lambda_2\rangle = \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |\lambda_3\rangle = \begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

22. **Zeige, dass hermitesche Operatoren reelle Eigenwerte besitzen und dass die Eigenvektoren orthogonal sind, falls die Eigenwerte verschieden sind. Was versteht man unter einer Eigenbasis? Was ist eine Spektraldarstellung eines Operators?**

- Es gilt:

$$\Lambda|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\langle\lambda|\Lambda^\dagger = \lambda^*\langle\lambda| = \langle\lambda|\Lambda$$

$$\Rightarrow \langle\lambda|\Lambda|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$$

$$\Rightarrow \lambda = \lambda^*$$

also λ ist reell.

- Für die Eigenvektoren zu λ und λ' gilt:

$$\Lambda|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\Lambda|\lambda'\rangle = \lambda'|\lambda'\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\lambda'|\Lambda^\dagger = \langle\lambda'|\Lambda = \lambda'\langle\lambda'|$$

$$\Rightarrow \langle\lambda'|\Lambda|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda'|\lambda\rangle = \lambda'\langle\lambda'|\lambda\rangle$$

$$\Rightarrow (\lambda - \lambda')\langle\lambda'|\lambda\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \lambda' \text{ oder } \langle\lambda'|\lambda\rangle = 0$$

- Eine Eigenbasis ist eine Basis die nur aus Eigenvektoren besteht, bei hermiteschen Operatoren gibt es sogar immer eine orthonormale Eigenbasis
- Die Spektraldarstellung ist die Darstellung von einem Operator in der Eigenbasis, bei hermiteschen Operatoren hat die Spektraldarstellung Diagonalgestalt.

2 Einfache Beispiele und Propagator

23. Gebe die Form der relevanten Operatoren an für das Beispiel des zwei-Zustands-Systems von einem Spin-1/2 Teilchen. Was passiert beim Stern-Gerlach Experiment? Wo findet die Messung statt? Was passiert bei einer zweiten Messung, die orthogonal zur ersten ist.

Bei einem Spin-1/2 Teilchen können zwei Zustände mit den zugehörigen Messgrößen auftreten:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\rightarrow +\frac{\hbar}{2} \\ |\downarrow\rangle &\rightarrow -\frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Der zugehörige Messoperator lautet damit:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Messung findet auf dem Schirm statt, wo dann die Wellenfunktion kollabiert. Wenn man nun eine zweite Messung orthogonal zur ersten macht gilt für den Messoperator in x-Richtung:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|)$$

Für die Eigenwerte dieses Operators gilt mithin: $s_x = \pm \frac{\hbar}{2}$

Hieraus folgen dann die Eigenvektoren:

$$\begin{aligned} |s_x = +\frac{\hbar}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ |s_x = -\frac{\hbar}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \end{aligned}$$

24. Beschreibe allgemein wie man durch Lösen der zeitunabhängigen Schrödinger Gleichung die zeitabhängige Schrödinger Gleichung für einen beliebigen Anfangszustand lösen kann. Was versteht man unter dem Zeitentwicklungsoperator (Propagator)?

Die Zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet:

$$H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$$

Hieraus folgt die Eigenbasis: $\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle\}$

Sowie das Spektrum: E_1, \dots, E_j

Die Eigenwertgleichung für H lautet:

$$\begin{aligned} H|\psi_j\rangle &= E_j|\psi_j\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_j\rangle \\ \Rightarrow |\psi_j(t)\rangle &= e^{-i \frac{E_j t}{\hbar}} |\psi_j(0)\rangle \end{aligned}$$

Wenn man nun jeden beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ in der Eigenbasis entwickelt gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j | \psi \rangle = \sum_j e^{-i \frac{E_j t}{\hbar}} |\psi_j(0)\rangle \langle \psi_j | \psi \rangle = U(t) |\psi\rangle$$

Mit dem wie folgt definierten Operator $U(t)$ der auch Propagator genannt wird:

$$U(t) = \sum_j e^{-i \frac{E_j t}{\hbar}} |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$$

25. **Was versteht man unter einer Operatorfunktion? Zeige, dass die Transformation, die einen hermiteschen Operator diagonalisiert im Allgemeinen auch die Operatorfunktion diagonalisiert.**

Eine Operatorfunktion $f(B)$ ist eine Funktion mit Operatoren im Argument, und diese ist wiederum ein Operator. Eine Operatorfunktion lässt sich meist in eine Taylorreihe entwickeln. Also:

$$f(B) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n f(C)}{\partial C^n} \right|_{C=0} B^n$$

Wenn nun der Operator V , B diagonalisiert, gilt:

$$\begin{aligned} f(V^{-1}BV) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n f(C)}{\partial C^n} \right|_{C=0} (V^{-1}BV)^n \\ &= V^{-1} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n f(C)}{\partial C^n} \right|_{C=0} B^n \right) V \\ &= V^{-1} f(B) V \end{aligned}$$

Also diagonalisiert V auch $f(B)$

26. Beschreibe die Zeitentwicklung eines Spin-1/2 in z-Richtung in einem Feld in x- Richtung. Berechne die zeitabhängigen Wahrscheinlichkeiten den Spin in z-Richtung nach oben und unten zu messen und den Erwartungswert des Spin-z Operators.

Mit dem B-Feld $\vec{B} = B_x \hat{e}_x$ gilt:

$$H = \vec{\mu} \vec{B} = g \frac{e}{2mc} S_x B_x = \hbar \omega_B \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=S_x}$$

H hat die Eigenwerte: $E_{\pm} = \pm \hbar \omega_B$ mit:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \\ \Rightarrow U(t) &= \sum_j e^{-i \frac{E_j t}{\hbar}} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\omega_B t} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) (\langle\uparrow| + \langle\downarrow|) + \frac{1}{2} e^{i\omega_B t} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) (\langle\uparrow| - \langle\downarrow|) \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\omega_B t} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle \langle\downarrow| + |\downarrow\rangle \langle\uparrow| + |\uparrow\rangle \langle\downarrow|) \\ &\quad + \frac{1}{2} e^{i\omega_B t} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle \langle\downarrow| - |\downarrow\rangle \langle\uparrow| - |\uparrow\rangle \langle\downarrow|) \\ &= \cos(\omega_B t) (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle \langle\downarrow|) - i \sin(\omega_B t) (|\downarrow\rangle \langle\uparrow| + |\uparrow\rangle \langle\downarrow|) \end{aligned}$$

Für $|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle$ gilt:

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle = \cos(\omega_B t) |\uparrow\rangle - i \sin(\omega_B t) |\downarrow\rangle$$

Hieraus folgt also für die Wahrscheinlichkeiten:

$$\begin{aligned} P_{\uparrow} &= |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2(\omega_B t) \\ P_{\downarrow} &= |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2(\omega_B t) \end{aligned}$$

27. **Wie ist der Erwartungswert einer Messung $\langle O \rangle$ durch Wahrscheinlichkeiten definiert? Zeige, dass für einen Anfangszustand $|\psi\rangle$ gilt $\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle$. Was ist der Endzustand nach der Messung?**

Der Erwartungswert ist der mit den Wahrscheinlichkeiten gewichtete Mittelwert von den Eigenwerten einer Messung. Es gilt:

$$\begin{aligned}\langle \Lambda \rangle &= \sum_j \lambda_j P(\lambda_j) \\ &= \sum_j \lambda_j |\langle \psi | \lambda_j \rangle|^2 \\ &= \sum_j \lambda_j \langle \psi | \lambda_j \rangle \langle \psi | \lambda_j \rangle^* \\ &= \sum_j \lambda_j \langle \psi | \lambda_j \rangle \langle \lambda_j | \psi \rangle \\ &= \sum_j \langle \psi | \Lambda | \lambda_j \rangle \langle \lambda_j | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \Lambda | \psi \rangle\end{aligned}$$

Der Endzustand der Messung ist ein Eigenzustand.

28. **Zeige, wie man aus der Lösung des Eigenwertproblems eine unitäre Transformation konstruieren kann, die den Operator „diagonalisiert“.**

Sei Λ ein Operator mit den Eigenwerten λ_i und den Eigenvektoren $|\lambda_i\rangle$. Dann macht ein Operator

$$U = \sum_j |\lambda_j\rangle \langle e_j|$$

eine Basistransformation und U ist unitär, da mit

$$U^\dagger = \sum_j |e_j\rangle \langle \lambda_j|$$

gilt:

$$UU^\dagger = \sum_{i,j} |\lambda_i\rangle \underbrace{\langle e_i | e_j \rangle}_{=\delta_{ij}} \langle \lambda_j| = \sum_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| = I$$

Für die Matrixelemente gilt:

$$U_{kl} = \langle e_k | U | e_l \rangle = \sum_j \langle e_k | \lambda_j \rangle \underbrace{\langle e_j | e_l \rangle}_{=\delta_{jl}} = \langle e_k | \lambda_l \rangle$$

Also gilt für die Eigenvektoren:

$$|\lambda_l\rangle = \sum_k U_{kl} |e_k\rangle$$

Also sind die Spaltenvektoren von U gerade die Eigenvektoren von Λ :

$$U = (|\lambda_1\rangle|\lambda_2\rangle\ldots|\lambda_n\rangle)$$

Nun gilt für die passive Basistransformation:

$$\begin{aligned} U^+ \Lambda U &= \sum_{kl} |e_k\rangle \langle \lambda_k | \Lambda | \lambda_l \rangle \langle e_l| \\ &= \sum_{kl} \lambda_l |e_k\rangle \underbrace{\langle \lambda_k | \lambda_l \rangle}_{=\delta_{kl}} \langle e_l| \\ &= \sum_l \lambda_l |e_l\rangle \langle e_l| \end{aligned}$$

Also gilt:

$$U^+ \Lambda U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

3 Das Konzept der Ortsbasis

29. **Beschreibe das Konzept der Ortsbasis. Stelle die Vollständigkeitsrelation und das Skalarprodukt in der Ortsbasis dar. Was ist eine Wellenfunktion?**

Man kann Teilchen an jedem Ort \vec{x} messen. Für jede Position x_j gibt es einen Eigenvektor $|x_j\rangle$ mit dem zugehörigen Ortsoperator:

$$X = \sum_j x_j |x_j\rangle \langle x_j|$$

Nun gilt:

- Detektoren sind diskret mit einer Auflösung Δx , aber theoretisch gilt $\Delta x \rightarrow 0$
- Jeder Detektor x_j stellt eigentlich einen unabhängigen Messoperator dar, der anzeigt ob ein Teilchen angekommen ist.
 \Rightarrow output: ja/nein oder 0/1
 $P_{x_j} = |x_j\rangle \langle x_j|$

Für die Ortsbasis gilt:

- $\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$
- Vollständigkeit: $\sum_j |x_j\rangle \langle x_j| = I$

Die Wellenfunktion des Zustandes $|\psi\rangle$ ist gegeben durch $\psi(x_j) = \langle x_j | \psi \rangle$.

Für $\Delta x \rightarrow 0$ werden die x_j kontinuierlich:

- $\sum_j f(x_j) \Delta x \rightarrow \int f(x) dx$
- $|x\rangle \rightarrow \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} |x_j\rangle$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \langle x_i | x'_j \rangle &\rightarrow \Delta \langle x | x' \rangle \\ \langle x | x' \rangle &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \langle x_i | x'_j \rangle = \delta(x - x') \\ |\psi\rangle &= \int \psi(x) |x\rangle dx = \int |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx \\ I &= \int |x\rangle \langle x| dx \\ X &= \int x |x\rangle \langle x| dx \end{aligned}$$

30. **Wie ist die Delta-Funktion $\delta(x)$ definiert?**

Es gilt:

$$\begin{aligned}\delta(x - x') &= 0 & x &\neq x' \\ \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) dx &= 1 & \forall \epsilon > 0\end{aligned}$$

31. **Was versteht man unter dem Differentialoperator D ? Zeige, dass die Abbildung linear ist. Berechne das Matricelement $\langle x|D|x'\rangle$. Zeige, dass D antihermitesch ist.**

Für den Differentialoperator gilt:

$$D|\psi\rangle = \int \frac{d}{dx} \psi(x) |x\rangle dx$$

D ist linear da gilt:

$$\begin{aligned}\Rightarrow D(\alpha|\psi\rangle + \beta|\theta\rangle) &= \int \frac{d}{dx} (\alpha\psi(x)|x\rangle + \beta\theta(x)|x\rangle) dx \\ &= \alpha \int \frac{d}{dx} \psi(x) |x\rangle dx + \beta \int \frac{d}{dx} \theta(x) |x\rangle dx \\ &= \alpha D|\psi\rangle + \beta D|\theta\rangle\end{aligned}$$

Für die Entwicklung von $|x\rangle$ in der Ortsbasis gilt:

$$\begin{aligned}|x\rangle &= \int |x'\rangle \langle x'|x\rangle dx' = \int \delta(x' - x) |x'\rangle dx' \\ \Rightarrow D|x\rangle &= \int \frac{d}{dx'} \delta(x' - x) |x'\rangle dx' \\ \Rightarrow \langle x'|D|x\rangle &= \frac{d}{dx'} \delta(x' - x)\end{aligned}$$

Nun gilt weiter, dass D antihermitesch ist, denn:

$$\langle x'|D|x\rangle = \frac{d}{dx'} \delta(x' - x) = -\frac{d}{dx} \delta(x - x') = -\langle x|D|x'\rangle$$

32. **Wie ist der Impuls als Funktion des Differentialoperators definiert? Argumentiere dass dies konsistent mit der klassischen Zeitentwicklung des Impulses im Hamiltonformalismus ist. Erläutere den Zusammenhang mit der De-Broglie Gleichung.**

Für den Impuls P gilt:

$$P = -i\hbar D$$

Klassisch gilt:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

Und mit der Quantenmechanik folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P|\psi\rangle = -DH|\psi\rangle = -i\hbar D \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$$

Wenn man nun über die Zeit integriert gilt:

$$P|\psi\rangle = -i\hbar D|\psi\rangle$$

Bei der De Broglie Wellenlänge gilt

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x} \\ \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x} &= \frac{2\pi\hbar}{\lambda} e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x} = p e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x} \\ \Rightarrow p &= \frac{h}{\lambda} \end{aligned}$$

33. Löse das Eigenwertproblem des Impulsoperators in der Ortsbasis. Leite die Darstellung der orthonormalen Impulszustände in der Ortsbasis her. Was ist die Umkehrung der Transformation in die Ortsbasis?

Mit der Eigenwertgleichung

$$P|p\rangle = p|p\rangle$$

und der Entwicklung von $|p\rangle$ in der Ortsbasis

$$\begin{aligned} |p\rangle &= \int dx |x\rangle \langle x|p\rangle \\ &= \int dx \psi_p(x) |x\rangle \\ \Rightarrow P|p\rangle &= -i\hbar D|p\rangle \\ &= -i\hbar \int dx \frac{d}{dx} \psi_p(x) |x\rangle \\ &= p \int dx \psi_p(x) |x\rangle \\ \Rightarrow \langle x'|P|p\rangle &= -i\hbar \int dx \frac{d}{dx} \psi_p(x) \langle x'|x\rangle \\ &= p \int dx \psi_p(x) \langle x'|x\rangle \\ \Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \psi_p(x) &= p \psi_p(x) \\ \Rightarrow \frac{d}{dx} \psi_p(x) &= \frac{ip}{\hbar} \psi_p(x) \end{aligned}$$

Sodass die Wellenfunktion Normiert ist, muss gelten:

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

Für die Entwicklung des Zustandes in der Eigenbasis gilt:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx \psi(x) |x\rangle \\ &= \int \int dx dp \psi(x) |p\rangle \langle p|x\rangle \\ &= \int \left(\int dx \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \right) |p\rangle dp = \\ &= \int \hat{\psi}(p) |p\rangle dp \end{aligned}$$

mit

$$\hat{\psi}(p) = \int \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

mit der Umkehrung

$$\psi(x) = \int \widehat{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$$

gilt:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dp \widehat{\psi}(p) |p\rangle \\ &= \int \int dx dp \widehat{\psi}(p) |x\rangle \langle x|p\rangle \\ &= \int dx \psi(x) |x\rangle \end{aligned}$$

4 Die Unschärferelation

34. Zeige, dass die Eigenzustände zweier hermitescher Operatoren gleich gewählt werden können, falls $[\Lambda, \Omega] = 0$. Was passiert wenn einer oder beide der Operatoren entartet sind?

Mit

$$\Lambda|\lambda_j\rangle = \lambda_j|\lambda_j\rangle$$

gilt:

$$\Lambda\Omega|\lambda_j\rangle = \Omega\Lambda|\lambda_j\rangle = \Omega\lambda_j|\lambda_j\rangle = \lambda_j\Omega|\lambda_j\rangle$$

Also ist $\Omega|\lambda_j\rangle$ wiederum ein Eigenvektor von Λ mit Eigenwert λ_j . Für verschiedene Eigenwerte sind die Eigenvektoren $|\lambda_j\rangle$ orthogonal, d.h. eindeutig. Also gilt:

$$\Omega|\lambda_j\rangle = \omega_j|\lambda_j\rangle$$

Also sind die $|\lambda_j\rangle$ Eigenvektoren von Ω

Für entartete Eigenwerte $|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle$ mit $\lambda_1 = \lambda_2$ gilt insbesondere:

$$\Omega|\lambda_1\rangle = \omega_{11}|\lambda_1\rangle + \omega_{12}|\lambda_2\rangle$$

$$\Omega|\lambda_2\rangle = \omega_{21}|\lambda_1\rangle + \omega_{22}|\lambda_2\rangle$$

Also agiert Ω nur innerhalb des entarteten Unterraums.

Finde also eine lineare Abbildung die Ω diagonalisiert:

$$|\lambda\rangle = \alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle$$

$$|\lambda'\rangle = \alpha'|\lambda_1\rangle + \beta'|\lambda_2\rangle$$

Sodass gilt:

$$\Omega|\lambda\rangle = \omega|\lambda\rangle$$

$$\Omega|\lambda'\rangle = \omega|\lambda'\rangle$$

Nun gilt aber weiterhin:

$$\Lambda|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\Lambda|\lambda'\rangle = \lambda|\lambda'\rangle$$

35. **Zeige, dass $[A, B] = 0$, falls alle Eigenzustände der zwei Operatoren gleich sind.**

Wenn eine gemeinsame Eigenbasis existiert gilt:

$$\begin{aligned}\Lambda|\lambda_j\rangle &= \lambda_j|\lambda_j\rangle \\ \Omega|\lambda_j\rangle &= \omega_j|\lambda_j\rangle \\ \Rightarrow \langle\lambda_i|\Omega\Lambda|\lambda_j\rangle &= \omega_i\lambda_j\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \omega_i\lambda_j\delta_{ij} \\ \Rightarrow \langle\lambda_i|\Lambda\Omega|\lambda_j\rangle &= \lambda_i\omega_j\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \lambda_i\omega_j\delta_{ij}\end{aligned}$$

Also haben $\Omega\Lambda$ und $\Lambda\Omega$ die gleichen Matrixelemente.

$$\Rightarrow [\Omega, \Lambda] = \Omega\Lambda - \Lambda\Omega = 0$$

36. **Zeige, dass $[X, P] = i\hbar I$.**

X und P sind nicht kompatibel, denn es gilt:

$$\begin{aligned}[X, P]|\psi\rangle &= -i\hbar(XD - DX) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)|x\rangle \\ &= -i\hbar \left(X \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} \psi(x)|x\rangle - D \int_{-\infty}^{\infty} dx x \psi(x)|x\rangle \right) \\ &= -i\hbar \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx x \frac{d}{dx} \psi(x)|x\rangle - \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) + x \frac{d}{dx} \psi(x)|x\rangle \right) \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)|x\rangle \\ &= i\hbar|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \\ \Rightarrow [X, P] &= i\hbar I\end{aligned}$$

37. **Was versteht man unter einer Unschärfe und der Unschärferelation? Leite allgemein eine Unschärferelation zwischen zwei nicht kommutierenden, hermiteschen Operatoren her. Was ergibt sich im Fall von X und P?**

Unter Unschärfe versteht man die mittlere Abweichung eines Operators in einem beliebigen Zustand $|\psi\rangle$. Es gilt:

$$\begin{aligned}\text{Abweichung : } \Delta\Omega &= \Omega - \langle\Omega\rangle \\ \text{Mittlere Abweichung : } \Delta\omega &= \sqrt{\langle(\Delta\Omega)^2\rangle} \\ &= \sqrt{\langle\Omega^2 - 2\Omega\langle\Omega\rangle + \langle\Omega\rangle^2\rangle} \\ &= \sqrt{\langle\Omega^2\rangle - \langle\Omega\rangle^2} \\ \text{Unschärferelation : } \Delta\omega \cdot \Delta\lambda &\geq \frac{|\langle[\Omega, \Lambda]\rangle|}{2}\end{aligned}$$

Beweis

Mit $|a\rangle = \Delta\Omega|\psi\rangle$ und $|b\rangle = \Delta\Lambda|\psi\rangle$ gilt:

$$\begin{aligned}\Delta\omega^2 \cdot \Delta\lambda^2 &= \langle\psi|\Delta\Omega\Delta\Omega|\psi\rangle\langle\psi|\Delta\Lambda\Delta\Lambda|\psi\rangle \\ &= \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \\ &\stackrel{CSU}{\geq} |\langle a|b\rangle|^2 \\ &= |\langle\psi|\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda|\psi\rangle|^2\end{aligned}$$

Nun gilt aber:

$$\begin{aligned}\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda &= \frac{\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda - \Delta\Lambda \cdot \Delta\Omega}{2} + \frac{\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda + \Delta\Lambda \cdot \Delta\Omega}{2} \\ &= \frac{1}{2}[\Delta\Omega, \Delta\Lambda] + \frac{1}{2}\{\Delta\Omega, \Delta\Lambda\}\end{aligned}$$

Mit dem hermiteschen Antikommutator $\{\Delta\Omega, \Delta\Lambda\} = \Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda + \Delta\Lambda \cdot \Delta\Omega$

und dem antihermiteschen Kommutator $[\Delta\Omega, \Delta\Lambda] = \Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda - \Delta\Lambda \cdot \Delta\Omega$.

Die Erwartungswerte eines antihermiteschen Operators sind rein imaginär und die eines hermiteschen Operators sind reell.

$$\begin{aligned}\Rightarrow \Delta\omega^2 \cdot \Delta\lambda^2 &\geq |\langle\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle[\Delta\Omega, \Delta\Lambda]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta\Omega, \Delta\Lambda\}\rangle|^2 \\ &\geq \frac{1}{4}|\langle[\Delta\Omega, \Delta\Lambda]\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle[\Omega - \langle\Omega\rangle, \Lambda - \langle\Lambda\rangle]\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle[\Omega, \Lambda] - \underbrace{[\Omega, \langle\Lambda\rangle]}_{=0} - \underbrace{[\langle\Omega\rangle, \Lambda]}_{=0} + \underbrace{[\langle\Omega\rangle, \langle\Lambda\rangle]}_{=0}\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle[\Omega, \Lambda]\rangle|^2 \\ \Rightarrow \Delta\omega \cdot \Delta\lambda &\geq \frac{|\langle[\Omega, \Lambda]\rangle|}{2}\end{aligned}$$

Nun gilt für den Fall von X, P:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{|\langle X, P\rangle|}{2} = \frac{|\langle i\hbar I\rangle|}{2} = \frac{\hbar}{2}$$

5 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

38. **Was versteht man unter Symmetrien in der Quantenmechanik? Erläutere den Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungsgrößen?** Physikalische Transformationen T sind z.B. Spiegelungen, Drehungen, Verschiebungen, usw. In der Quantenmechanik entspricht eine physikalische Transformation einem unitären Operator $U(T)$. Falls nun die Transformationen eine Gruppe bilden, dann bilden die unitären Operatoren eine Darstellung der Gruppe und es gilt:

$$U(T_1 T_2) = U(T_1) U(T_2)$$

Ein Operator ist invariant unter der Transformation T , falls gilt:

$$\begin{aligned} [\Lambda, U(T)] &= 0 \\ d.h. U^\dagger(T) \Lambda U(T) &= \Lambda \end{aligned}$$

Der Operator hat dann die Symmetrie T .

Im Falle, dass der Hamiltonoperator eine Symmetrie T besitzt gilt:

$$[H, U(T)] = 0$$

\Rightarrow Es existiert eine gemeinsame Eigenbasis mit:

$$\begin{aligned} H|\varepsilon\rangle &= \varepsilon|\varepsilon\rangle & U(T)|\varepsilon\rangle &= t|\varepsilon\rangle \\ \Rightarrow [U(T), \exp(-\frac{iHt}{\hbar})] &= 0 \end{aligned}$$

Das heißt die Symmetrie bleibt zeitlich erhalten und der Generator $i\hbar \frac{\partial}{\partial a} U(T)|_{a=0}$ heißt Erhaltungsgröße.

39. **Wie ist der Translationsoperator definiert? Zeige, wie man den Translationsoperator als Funktion des Differentialoperators schreiben kann und umgekehrt.**

Der Translationsoperator T_a ist die Verschiebung um $x = a$ nach rechts. Das heißt:

$$U(T_a)|x\rangle = |x + a\rangle$$

Betrachte nun ein infinitesimales ε , dann gilt:

$$\begin{aligned} U(T_\varepsilon)|\psi\rangle &= U(T_\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)|x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)|x + \varepsilon\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x - \varepsilon)|x\rangle \\ &\stackrel{Taylor}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot (\psi(x) - \varepsilon \frac{d}{dx} \psi(x))|x\rangle \\ &= (I - \varepsilon D) \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x)|x\rangle \\ &\Rightarrow U(T_\varepsilon) = I - \varepsilon D = I - \frac{i\varepsilon P}{\hbar} \end{aligned}$$

Mit $a = \lim_{N \rightarrow \infty} \varepsilon N$ oder $\varepsilon = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{a}{N}$ gilt nun unter der Benutzung der Gruppeneigenschaft der Transformation:

$$\begin{aligned} U(T_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} U(T_\varepsilon^N) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} U(T_\varepsilon)^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} (I - \frac{i\varepsilon P}{\hbar})^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} (I - \frac{iaP}{N\hbar})^N \\ &= \exp(-i\frac{aP}{\hbar}) \end{aligned}$$

Umgekehrt gilt nun:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a} \exp(-i\frac{aP}{\hbar}) &= -i\frac{P}{\hbar} \exp(-i\frac{aP}{\hbar}) \\ &\Rightarrow P = i\hbar \frac{\partial}{\partial a} U(T_a)|_{a=0} \end{aligned}$$

Dies ist der Generator der Translation um a .

40. Diskutiere das Eigenwertproblem für ein freies Teilchen ($V(x)=0$). Was ist der Hamiltonoperator? Was sind die Eigenzustände? Gibt es eine Entartung? Welche Symmetrien gibt es? Beschreibe die Zeitentwicklung der Eigenzustände.

Für das freie Teilchen lautet der Hamiltonoperator:

$$H = \frac{P^2}{2m}$$

Offensichtlich gilt hier:

$$[H, P] = [H, U(T_a)] = 0$$

also hat der Hamiltonoperator eine Translationssymmetrie und P ist eine Erhaltungsgröße, das heißt es existiert eine gemeinsame Eigenbasis mit:

$$\begin{aligned} P|p\rangle &= p|p\rangle \\ H|p\rangle &= \frac{p^2}{2m}|p\rangle = E_p|p\rangle \end{aligned}$$

Nun existiert aber eine Entartung mit $E_p = E_{-p}$. Das heißt

$$|\psi_E\rangle = \alpha|p\rangle + \beta|-p\rangle$$

ist ebenfalls ein Eigenzustand und es gilt $\langle P \rangle \neq 0$ sowie $\langle (\Delta p)^2 \rangle \neq 0$. Für die Zeitentwicklung des Eigenzustands gilt:

$$|\psi_E(t)\rangle = \exp(-i\frac{Ht}{\hbar})|\psi_E\rangle = \exp(-i\frac{p^2t}{2m\hbar})|\psi_E\rangle$$

6 Das Ehrenfesttheorem

neue Frage

41. **Zeige, dass Erwartungswerte in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators sich nicht zeitlich ändern.**

Für einen beliebigen Operator K gilt für die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators:

$$\begin{aligned}\langle K(t) \rangle &= \langle \psi_E(t) | K | \psi_E(t) \rangle \\ &= \langle \psi_E | \exp(-i \frac{Et}{2m\hbar}) K \exp(i \frac{Et}{2m\hbar}) | \psi_E \rangle \\ &= \langle \psi_E | K | \psi_E \rangle \\ &= \langle K(0) \rangle\end{aligned}$$

42. **Was ist das Ehrenfest Theorem? Leite es her! Was folgt für die Zeitableitung des Ortserwartungswertes in einer Dimension?**

Das Ehrenfesttheorem besagt das für die Zeitentwicklung eines Operators gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle O(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [O, H] \rangle$$

Beweis

Es gilt mit dem Propagator:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \exp(-i \frac{Ht}{\hbar}) |\psi\rangle \\ \Rightarrow |\dot{\psi}(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \exp(-i \frac{Ht}{\hbar}) |\psi\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} H \exp(-i \frac{Ht}{\hbar}) |\psi\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} H |\psi(t)\rangle \\ \stackrel{analog}{\Rightarrow} \langle \dot{\psi}(t) | &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle O(t) \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \dot{\psi} | O | \psi \rangle + \langle \psi | O | \dot{\psi} \rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | HO | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | OH | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [O, H] | \psi \rangle\end{aligned}$$

□

Nun gilt für $O = X$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \langle X \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [X, H] | \psi \rangle \\
 &= \frac{1}{i2m\hbar} \langle [X, P^2] \rangle + \frac{1}{i\hbar} \underbrace{[X, V(X)]}_{=0} \\
 &= \frac{1}{i2m\hbar} \underbrace{\langle [X, P] 2P \rangle}_{=i\hbar} \\
 \Rightarrow \langle \dot{X} \rangle &= \frac{\langle P \rangle}{m}
 \end{aligned}$$

7 Einfache Beispiele in einer Dimension

43. **Was ist der Hamiltonoperator für ein Teilchen in einem allgemeinen eindimensionalen Potential? Benutze eine Entwicklung in der Ortsbasis, um die entsprechende Differentialgleichung für die Wellenfunktion herzuleiten.**

Die stationäre Schrödingergleichung $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ kann als Differentialgleichung im Ortsraum geschrieben werden. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \langle x|H|\psi\rangle &= \langle x|\left(-\frac{\hbar^2 D^2}{2m} + V(X)\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x')|x'\rangle\right) \\
 &= \langle x|\int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x') + V(x')\right)|x'\rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x') + V(x')\right)\underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} \\
 &= E \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x')\underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} \\
 \Rightarrow E\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)
 \end{aligned}$$

44. **Was passiert mit der Wellenfunktion an Stellen an denen das Potential $V(x)$ eine Unstetigkeit besitzt?**

Sei $\psi_A(x)$ die Funktion links von der Unstetigkeit und $\psi_B(x)$ diejenige rechts davon. Nun muss an Stellen an denen $V(x)$ eine Unstetigkeit besitzt 2 Bedingungen erfüllt sein:

Sei x' eine solche Stelle.

- $\psi(x)$ muss stetig sein, d.h. $\psi_A(x') = \psi_B(x')$
- Für die 2. Ableitung muss gelten:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\psi_A(x') - \psi_B(x')) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)|_{x < x'} \psi_B(x') - V(x)|_{x > x'} \psi_A(x'))$$

45. Betrachte ein Stufenpotential $V(x) = 0$ für $x < 0$ und $V(x) = V_0$ für $x \geq 0$. Zeige ausführlich wie man die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung herleiten kann jeweils für den Fall $E < V_0$ und für $E > V_0$. Was gilt für den Reflexionskoeffizienten?

a) $E > V_0$

Für $x < 0$ gilt $V(x) = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_A(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_A(x) \\ \Rightarrow \psi_A(x) &= a e^{ik_1 x} + b e^{-ik_1 x} \end{aligned} \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Für $x > 0$ gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_A(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_A(x) \\ \Rightarrow \psi_B(x) &= c e^{ik_2 x} + d e^{-ik_2 x} \end{aligned} \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

An der Stelle $x=0$ müssen nun die Stetigkeitsbedingung erfüllt sein, sowie die 1. Ableitung muss stetig sein:

$$\begin{aligned} \Rightarrow a + b &= c + d \\ ik_1(a - b) &= ik_2(c - d) \\ \Rightarrow a &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) c + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) d \\ b &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) c + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) d \end{aligned}$$

Es existieren also 2 Gleichungen und 4 unbekannte, also eine zusätzliche Freiheit, weitere Parameter der Wellenfunktion zu wählen. Wir setzen $d=0$, da es keine einlaufende Welle von rechts gibt und eine einlaufende Welle von links teilt sich auf in eine auslaufende nach rechts und eine auslaufende nach links.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{b}{a} &= \frac{1 - \frac{k_2}{k_1}}{1 + \frac{k_2}{k_1}} \\ \Rightarrow R &= \frac{|b|^2}{|a|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}$$

b) $E < V_0$

Hier gilt nun mit dem gleichen Ansatz wie beim ersten Teil:

$$\begin{aligned}\psi_A(x) &= ae^{ikx} + be^{-ikx} & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E \\ \psi_B(x) &= ce^{\kappa x} + de^{-\kappa x} & \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\end{aligned}$$

Für $c \neq 0$ ist aber $\psi_B(x)$ teilweise exponentiell wachsend und kann damit nicht mehr normiert werden. Aus diesem Grund muss $c=0$ sein. Es gilt wiederum die Stetigkeit der Funktion und der 1. Ableitung:

$$\begin{aligned}a + b &= c \\ ik(a - b) &= -\kappa c \\ \Rightarrow a + b &= c = -\frac{ik}{\kappa}(a - b) \\ \Rightarrow a\left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) &= -b\left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) \\ \Rightarrow a &= \frac{ik - \kappa}{ik + \kappa}b \\ \Rightarrow |a| &= |b|\end{aligned}$$

Also es gibt eine vollständige Reflexion trotz einer endlichen Eindringtiefe der Welle.

46. Was ist der Messoperator für einen Detektor an einem Ort x ? Was ist die entsprechende Wahrscheinlichkeit ein Teilchen an einem Ort x zu finden? Leite eine Kontinuitätsgleichung für die Zeitableitung der Wahrscheinlichkeit her und argumentiere, dass ein Wahrscheinlichkeitsstrom durch einen geeigneten Ausdruck definiert werden kann. Was ist der Wahrscheinlichkeitsstrom für eine Überlagerung von zwei ebenen Wellen mit entgegengesetzten Impulsen?

Der Messoperator für einen Detektor am Ort x ist: $O = |x\rangle\langle x|$

Für die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen am Ort x zu finden gilt:

$$\begin{aligned}|\psi(x, t)|^2 &= \langle\psi(t)|x\rangle\langle x|\psi(t)\rangle \\ &= \langle\psi(t)|O|\psi(t)\rangle \\ &= \langle O(t)\rangle\end{aligned}$$

Nun gilt für die Zeitableitung der Wahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned}
OX &= |x\rangle\langle x|x = x|x\rangle\langle x| = XO \\
\Rightarrow [O, X] &= 0 \\
\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\langle O(t) \rangle &= \frac{\partial}{\partial t}|\psi(x, t)|^2 \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle [O, H] \rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle \psi(t) | [O, P^2] | \psi(t) \rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle \psi(t) | x \rangle \langle x | P^2 | \psi(t) \rangle - \frac{1}{2mi\hbar}\langle \psi(t) | P^2 | x \rangle \langle x | \psi(t) \rangle
\end{aligned}$$

Nun gilt mit

$$\begin{aligned}
\langle x | P^2 | \psi(t) \rangle &= -\hbar^2 \langle x | D^2 | \psi(t) \rangle = -\hbar^2 \psi''(x) \\
\langle \psi(t) | P^2 | x \rangle &= -\hbar^2 \langle \psi(t) | D^2 | x \rangle = -\hbar^2 (\psi''(x))^* \\
\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}|\psi(x, t)|^2 &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \psi'' - \psi''^* \psi) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \psi'' + \psi'^* \psi' - \psi'^* \psi' - \psi''^* \psi) \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x}(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^*)
\end{aligned}$$

Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x, t)|^2 = -\frac{\partial}{\partial x}j(x, t)$$

mit:

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{i2m} \frac{\partial}{\partial x}(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^*)$$

Für die Überlagerung von zwei ebenen Wellen mit entgegengesetzten Impulsen $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ gilt:

$$\begin{aligned}
j(x) &= \frac{\hbar}{i2m}(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx})(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}) \\
&\quad - \frac{\hbar}{i2m}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})(-ikA^* e^{-ikx} + ikB^* e^{ikx}) \\
&= \frac{\hbar k}{2m}(|A|^2 - (-|A|^2) - |B|^2 - |B|^2) \\
&= \frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) \\
&= \frac{p}{m}(|A|^2 - |B|^2)
\end{aligned}$$

47. Was versteht man unter gebundenen Zuständen? Was gilt im Allgemeinen für die Energie-Eigenwerte (im Gegensatz zu ungebundenen Zuständen)?

In einem Potentialtopf muss für gebundene Zustände immer $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$ gelten.

Das Integrieren von beliebigen Anfangswerten gibt aber im Allgemeinen divergente Funktionen. Also sind nur spezielle Energien möglich. Für ein endliches Potential $V(x) < 0$ mit $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$ gibt es immer einen sogenannten "gebundenen Zustand" mit $E < 0$.

48. Zeige, dass gebundene Zustände in einer Dimension nicht entartet sind.

Seien ψ_1, ψ_2 zwei Funktionen die die Schrödingergleichung für eine Energie lösen.

Zeige: $\psi_1(x) = \alpha \psi_2(x)$

Es gilt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_1(x) = E \psi_1(x) \quad (1)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_2(x) = E \psi_2(x) \quad (2)$$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi_1(x) \psi_2(x) = \psi_2(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x) \quad (3)$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi_2(x) \psi_1(x) = \psi_1(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x) \quad (4)$$

$$\stackrel{(3)-(4)}{\Rightarrow} \psi_2(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x) - \psi_1(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x) = 0 \quad (5)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) - \psi_1(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \right) = 0 \quad (6)$$

$$\Rightarrow \psi_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) - \psi_1(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) = \text{const.} \quad \forall x \quad (7)$$

da nun aber ψ_1, ψ_2 gebundene Zustände sind, gilt:

$$\begin{aligned} & \psi_1, \psi_2 \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0 \\ \Rightarrow & \text{const.} = 0 \\ \Rightarrow & \psi_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) = \psi_1(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \\ \Rightarrow & \int dx \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) = \int dx \frac{1}{\psi_2(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \\ \Rightarrow & \ln|\psi_1(x)| + c = \ln|\psi_2(x)| \\ \Rightarrow & \psi_1(x) = e^c \psi_2(x) \end{aligned}$$

□

Es sind also keine weiteren Operatoren Λ mit $[H, \Lambda] = 0$ notwendig um die Entartung mit zusätzlichen Quantenzahlen λ zu bestimmen.

49. **Zeige, dass Energie-Eigenfunktionen im Ortsraum reell gewählt werden können.**

Falls die Gleichung

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

eine Lösung ψ hat, dann ist auch ψ^* eine Lösung derselben Energie mit

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi^*(x) &= E \psi^*(x) \\ \Rightarrow \operatorname{Re}\psi &= \frac{\psi^* + \psi}{2} \\ \operatorname{Im}\psi &= \frac{\psi^* - \psi}{2} \end{aligned}$$

sind reelle Lösungen, die im Allgemeinen nicht gleich sein müssen.

50. **Betrachte das Kastenpotential $V(x) = V_0$ für $|x| \geq \frac{L}{2}$ und $V(x) = 0$ sonst. Welche Lösungen für die Differentialgleichung gibt es in den verschiedenen Bereichen? Leite einen Ausdruck für die Eigenzustände und Eigenenergien im Grenzwert $V_0 \rightarrow \infty$ her.**

Es gilt:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \alpha e^{\kappa x} \\ \psi_2(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E \\ \psi_3(x) &= \beta e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \rightarrow \infty \\ \Rightarrow \psi_1(x) &= \psi_2(x) = 0 & \forall x \end{aligned}$$

Mit der Stetigkeitsbedingung gilt:

$$\begin{aligned} \psi_2\left(\frac{L}{2}\right) &= \psi_3\left(\frac{L}{2}\right) = 0 \\ \psi_2\left(-\frac{L}{2}\right) &= \psi_1\left(-\frac{L}{2}\right) = 0 \\ \Rightarrow A e^{ik\frac{L}{2}} + B e^{-ik\frac{L}{2}} &= 0 \\ A e^{-ik\frac{L}{2}} + B e^{ik\frac{L}{2}} &= 0 \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} e^{ik\frac{L}{2}} & e^{-ik\frac{L}{2}} \\ e^{-ik\frac{L}{2}} & e^{ik\frac{L}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem hat nur dann eine nicht triviale Lösung, wenn die Determinante verschwindet, also

$$\begin{aligned} e^{ikL} - e^{-ikL} &= 0 \\ \Rightarrow \sin(kL) &= 0 \\ \Rightarrow k &= \frac{n\pi}{L} \quad n \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

Dies ist eine Quantisierungsbedingung für k . Nun gilt mit $e^{in\pi} = (-1)^n$:

$$\begin{aligned} Ae^{i\frac{n\pi}{L}L} + B &= 0 \\ Ae^{-i\frac{n\pi}{L}L} + B &= 0 \\ \Rightarrow A(-1)^n &= B \\ \Rightarrow \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n \text{ gerade} \\ \Rightarrow \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n \text{ ungerade} \end{aligned}$$

Im Inneren des Topfes gilt nun:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) &= E_n(x) \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) \\ \Rightarrow E_n &= \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \end{aligned}$$

$\psi_0 = 0$ ist keine sinnvolle Lösung und $\psi_{-n} = (-1)^{n+1} \psi_{n+1}$ sind linear abhängig von den ψ_n mit $n > 0$. Also sind nur Lösungen mit $n > 0$ sinnvoll.

51. Was versteht man unter einer Lokalisierungsenergie? Leite eine untere Grenze zur Abschätzung dieser Energie her.

Mit der in Frage 50 gefundenen Lösung kann man nun $\psi(x, t)$ berechnen.

Mit der vollständigen Basis

$$|n\rangle = \int dx \psi(x) |n\rangle \langle n|x\rangle$$

gilt:

$$\begin{aligned} |\psi(x)\rangle &= \int dx \psi(x) |x\rangle \\ &= \sum_n \int dx \psi(x) |n\rangle \underbrace{\langle n|x\rangle}_{=\psi^*(x)} \\ &= \sum_n \alpha_n |n\rangle \quad \alpha_n = \int dx \psi^*(x) \psi(x) \end{aligned}$$

nun gilt

$$|\psi(x, t)\rangle = \sum_n \alpha_n(t) |n\rangle$$

wobei gilt

$$\begin{aligned} \alpha_n(t) &= \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}) \alpha_n = \exp(-i n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} \frac{t}{\hbar}) \alpha_n \\ \psi(x, t) &= \langle x | \psi(x, t) \rangle = \sum_n \alpha_n(t) \psi_n(x) \end{aligned}$$

Die Grundzustandsenergie ist $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} > 0$ obwohl $V(x) = 0$ da das Teilchen lokalisiert ist. Nun gilt das jedes Teilchen eine endliche kinetische Lokalisierungsenergie besitzt.

Mit $\Delta x = \frac{L}{2}$ gilt wegen der Unschärferelation:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2 \Delta x} = \frac{\hbar}{L}$$

Für einen gebundenen Zustand mit $\langle P \rangle = 0$ gilt:

$$\begin{aligned} \langle \frac{P^2}{2m} \rangle &= \frac{1}{2m} \left(\langle (\Delta P)^2 \rangle + \langle P \rangle^2 \right) \\ &= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 \\ &\geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

Dieser letzte Term ist also die minimale Lokalisierungsenergie die ein Teilchen in einem Potentialtopf annehmen kann.

8 Der harmonische Oszillator

52. Stelle die Differentialgleichung für die Wellenfunktion im Ortsraum in einem harmonischen Potential auf. Leite die entsprechende Differentialgleichung im Impulsraum her. Zeige, dass durch eine geeignete Reskalierung der Variablen beide Gleichungen dieselbe Form annehmen.

Der Standard Hamiltonoperator für den harmonischen Oszillator ist:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

klassische gilt nun:

$$\begin{aligned} F &= -V'(x) = -m\omega^2 x \\ \Rightarrow D &= m\omega^2 \\ \Rightarrow \omega &= \sqrt{\frac{D}{m}} \end{aligned}$$

1. Lösungsansatz im Ortsraum
mit

$$P^2 = -\hbar^2 D^2$$

folgt die DGL im Ortsraum

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (8)$$

2. Lösungsansatz im Impulsraum
Mit

$$X^2 = -\hbar^2 D_p^2$$

folgt die DGL im Impulsraum

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) \hat{\psi}(p) = E\hat{\psi}(p) \quad (9)$$

Mit der Reskalierung:

$$\begin{aligned} y &:= \sqrt{m\omega} x & \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= m\omega \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\ q &:= \frac{1}{\sqrt{m\omega}} p & \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial p^2} &= \frac{1}{m\omega} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \end{aligned}$$

$$\stackrel{(8)}{\Rightarrow} \left(-\frac{\hbar^2 \omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\omega}{2} y^2 \right) \psi(y) = E\psi(y)$$

$$\stackrel{(9)}{\Rightarrow} \left(\frac{\omega}{2} q^2 - \frac{\hbar^2 \omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) \hat{\psi}(q) = E\hat{\psi}(q)$$

Also ist gezeigt, dass beide Gleichungen dieselbe Form haben.

53. **Was versteht man unter einer kanonischen Transformation?**

Eine Transformation oder Redefinition zu neuen hermiteschen Operatoren

$$Y = f(X, P)$$

$$Q = g(X, P)$$

die die Kommutatorregel erhält, also:

$$[X, P] = i\hbar$$

$$\Rightarrow [Y, Q] = i\hbar$$

heißt kanonisch.

54. **Zeige, dass eine Gauß-funktion ψ_0 die Differentialgleichung für das harmonische Potential erfüllt. Was gilt für die Energie?**

Die Gaussfunktion erfüllt die Gleichung für das harmonische Potential, denn mit

$$\begin{aligned}\psi_0(y) &= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2\hbar}} \\ \xrightarrow{\text{Fourier}} \widehat{\psi_0}(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{qy}{\hbar}} \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2\hbar}} \\ &= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{q^2}{2\hbar}}\end{aligned}$$

Also es gilt, dass die Gaußfunktion Forminvariant unter der Fouriertransformation ist und somit die Differentialgleichung für das harmonische Potential erfüllt.

Für die Energien gilt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial y} \psi_0(y) &= -\frac{y}{\hbar} \psi_0(y) \\ \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_0(y) &= -\frac{1}{\hbar} \psi_0(y) + \frac{y^2}{\hbar^2} \psi_0(y) \\ \xrightarrow{SDGL} \left(-\frac{\hbar^2\omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\omega}{2} y^2\right) \psi_0(y) &= \left(-\frac{\hbar^2\omega}{2} \left(-\frac{1}{\hbar} + \frac{y^2}{\hbar^2}\right) + \frac{\omega}{2} y^2\right) \psi_0(y) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \psi_0(y) \\ &= E_0 \psi_0(y) \\ \Rightarrow E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}\end{aligned}$$

55. **Zeige, welche Kommutatorrelation für einen Operator a gelten muss, der die Energie verschiebt?**

Wenn für einen Kommutator

$$[H, a] = -\varepsilon a$$

gilt, dann verschiebt a den Eigenwert von H , denn

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= E_n|n\rangle \\ \Rightarrow H(a|n\rangle) &= ((Ha - aH) + aH)|n\rangle \\ &= ([H, a] + aE_n)|n\rangle \\ &= (E_n - \varepsilon)a|n\rangle \end{aligned}$$

Also ist $a|n\rangle$ ein Eigenzustand mit der Energie $E_n - \varepsilon$

56. **Drücke den Hamilton Operator für den harmonischen Oszillator durch geeignete kanonisch reskalierte Variablen aus und finde einen allgemeinen Ausdruck für einen Operator a für den gilt $[a, H] = -\varepsilon a$.**

Konstruiere

$$a = \alpha Y + \beta Q$$

mit

$$\begin{aligned} Y &:= \sqrt{m\omega} X \\ Q &:= \frac{1}{\sqrt{m\omega}} P \\ \Rightarrow H &= \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} \\ &= \frac{\omega}{2} (Y^2 + Q^2) \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} [H, a] &= \frac{\omega}{2} (\beta[Y^2, Q] + \alpha[Q^2, Y]) \\ &= \frac{\omega}{2} (2\beta Y[Y, Q] + 2\alpha Q[Q, Y]) \\ &\stackrel{[Y, Q] = i\hbar}{=} i\omega\beta Y\hbar - i\alpha\omega Q\hbar \\ &\stackrel{!}{=} -\varepsilon(\alpha Y + \beta Q) \\ \Rightarrow \quad \alpha &= -i\beta \\ \beta &= i\alpha \\ \varepsilon &= \hbar\omega \end{aligned}$$

α ist nun beliebig! Wähle nun nach Konvention

$$\begin{aligned}\alpha &:= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \\ \Rightarrow a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}P \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Y + iQ) \\ \Rightarrow a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}P \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Y - iQ)\end{aligned}$$

57. Definiere die Auf- und Absteigeoperatoren („Erzeuger“ und „Vernichter“) für einen harmonischen Oszillator. Berechne $a^\dagger a$ und $[a, a^\dagger]$. Drücke den Hamilton Operator mit Hilfe dieser Operatoren aus.

Mit den eben definierten Operatoren gilt

$$\begin{aligned}[H, a] &= -\hbar\omega a \\ [H, a^\dagger] &= \hbar\omega a^\dagger\end{aligned}$$

Dementsprechend heißt a^\dagger Erzeuger und a Vernichter. Nun gilt

$$\begin{aligned}a^\dagger a &= \frac{1}{2\hbar}(Y - iQ)(Y + iQ) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 + iYQ - iQY) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 + i[Y, Q]) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 - \hbar)\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}aa^\dagger &= \frac{1}{2\hbar}(Y + iQ)(Y - iQ) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 + iQY - iYQ) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 - i[Y, Q]) \\ &= \frac{1}{2\hbar}(Y^2 + Q^2 + \hbar)\end{aligned}$$

Nun gilt für den Kommutator

$$\begin{aligned}\Rightarrow [a, a^\dagger] &= aa^\dagger - a^\dagger a \\ &= \frac{1}{2\hbar}(\hbar - (-\hbar)) \\ &= 1\end{aligned}$$

Also gilt für den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}\Rightarrow H &= \frac{\omega}{2}(Y^2 + Q^2) \\ &= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})\end{aligned}$$

58. **Zeige, dass das Spektrum des Hamiltonoperators für den harmonischen Oszillator nach unten beschränkt ist. Argumentiere, dass es einen eindeutigen Grundzustand $|0\rangle$ mit $a|0\rangle = 0$ geben muss und berechne die Grundzustandsenergie.**

Die Energie des Hamilton Operators ist nach unten beschränkt, denn

$$\begin{aligned}\langle Y^2 \rangle &= \left(\langle \psi | Y \rangle \langle Y | \psi \rangle \right) \geq 0 \forall |\psi\rangle \\ \langle Q^2 \rangle &= \left(\langle \psi | Q \rangle \langle Q | \psi \rangle \right) \geq 0 \forall |\psi\rangle \\ \Rightarrow \langle H \rangle &\geq 0\end{aligned}$$

Also gibt es einen Grundzustand $|0\rangle$, der Eindeutig ist, da es keine Entartung in einer Dimension gibt.

Nun gilt

$$\begin{aligned}H|0\rangle &= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})|0\rangle \\ &= \hbar\omega(\underbrace{a^\dagger(a|0\rangle)}_{=0} + \frac{1}{2}|0\rangle) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle \\ &= E_0|0\rangle \\ \Rightarrow E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}\end{aligned}$$

59. Argumentiere, dass alle angeregten Zustände $|n\rangle$ aus dem Grundzustand mit Hilfe der Kommutatorrelation folgen. Was ist die entsprechende Energie? Wie werden diese Zustände normiert? Was ist der allgemeine Ausdruck für einen angeregten Zustand als Operatorsequenz auf den Grundzustand?

$|0\rangle$ hat die Eigenenergie E_0 .

Nun gilt

$$\begin{array}{lll} a^\dagger|0\rangle & \text{hat die Energie} & E_0 + \hbar\omega \\ (a^\dagger)^2|0\rangle & \text{hat die Energie} & E_0 + 2\hbar\omega \\ \vdots & & \vdots \\ (a^\dagger)^n|0\rangle & \text{hat die Energie} & E_0 + n\hbar\omega \end{array}$$

Für die Normierung der Eigenbasis gilt

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= c_n|n+1\rangle \\ \Rightarrow \langle n|a &= \langle n+1|c_n^* \\ \Rightarrow \langle n+1|c_n^*c_n|n+1\rangle &= |c_n|^2 = \langle n|aa^\dagger|n\rangle \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= aa^\dagger - 1 = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \\ \Rightarrow aa^\dagger &= \frac{H}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Mit $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ gilt

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle \\ \Rightarrow aa^\dagger|n\rangle &= (n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2})|n\rangle = (n+1)|n\rangle \\ \Rightarrow |c_n|^2 &= \langle n|aa^\dagger|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle = n+1 \\ \Rightarrow c_n &= \sqrt{n+1} \\ \Rightarrow a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned}$$

Analog folgt nun

$$\begin{aligned} a^\dagger a|n\rangle &= n|n\rangle \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned}$$

daher gilt für den allgemeinen Ausdruck für einen angeregten Zustand

$$|n\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}} \frac{a^\dagger}{\sqrt{n-1}}|n-2\rangle = \dots = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

60. **Drücke die Operatoren X und P mit Hilfe von a^\dagger und a aus. Berechne die Erwartungswerte $\langle n|XP|n\rangle$ und $\langle n+2|XP|n\rangle$.**

Es gilt

$$\begin{aligned} X &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \\ P &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a) \\ \Rightarrow XP &= i\frac{\hbar}{2}(a + a^\dagger)(a^\dagger - a) \\ \Rightarrow XP|n\rangle &= i\frac{\hbar}{2}(a + a^\dagger)(\sqrt{n+1}|n+1\rangle - \sqrt{n}|n-1\rangle) \\ &= i\frac{\hbar}{2}\left((n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle - \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle - n|n\rangle\right) \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \langle n|XP|n\rangle &= i\frac{\hbar}{2} \\ \langle n+2|XP|n\rangle &= i\frac{\hbar}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)} \end{aligned}$$

61. **Finde einen Differentialoperatorausdruck für angeregte Wellenfunktionen $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ des harmonischen Oszillators. Was versteht man unter Hermite-Polynomen?**

Für die Wellenfunktion $\langle x|n\rangle = \psi_n(x)$ gilt

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \int dx \psi_0(x)|x\rangle$$

Für den Erzeugungsoperator gilt

$$\begin{aligned} a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}P \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}D \end{aligned}$$

Also gilt

$$|n\rangle = \int dx \frac{1}{\sqrt{n!}} \underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n}_{=\psi_n(x)} \psi_0(x)|x\rangle$$

mit der dimensionslosen Größe

$$\begin{aligned} z &:= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \\ \Rightarrow \psi_n(z) &= \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(z - \frac{\partial}{\partial z}\right)^n e^{-\frac{z^2}{2}} \\ &= \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} H_n(z) e^{-\frac{z^2}{2}} \end{aligned}$$

Wobei $H_n(z)$ Hermite Polynome sind, bei denen gilt

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2z \\ H_2 &= -2(1 - 2z^2) \\ H_3 &= -12\left(z - \frac{2}{3}z^3\right) \\ H_4 &= 12\left(1 - 4z^2 + \frac{4}{3}z^4\right) \\ &\vdots \end{aligned}$$

Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} H_n &= 2nH_{n-1} \\ H_{n+1} &= 2zH_n - 2nH_{n-1} \end{aligned}$$

sowie

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n(x) = \delta_{mn}$$

62. Erkläre wie man eine Auslenkung und eine Beschleunigung aus dem Grundzustand des harmonischen Oszillators mit Hilfe von Auf- und Absteigeoperatoren ausdrücken kann. Was ist die Definition für einen „kohärenten Zustand“? Zeige, dass der kohärente Zustand ein Eigenzustand von a ist.

Für eine Auslenkung aus dem Grundzustand gilt mit dem Verschiebeoperator

$$\begin{aligned}
T_{x_0} &= \exp(-ix_0 \frac{P}{\hbar}) \\
\Rightarrow T_{x_0}|0\rangle &= \exp(-ix_0 \frac{P}{\hbar})|0\rangle \\
&= \exp(x_0 \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \frac{1}{\hbar}(a^\dagger - a))|0\rangle \\
&\stackrel{BHC}{=} \exp\left(x_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} a^\dagger\right) \exp\left(-x_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} a\right) \exp\left(\frac{x_0^2}{2} \frac{m\omega}{2\hbar} \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1}\right)|0\rangle \\
&\stackrel{a|0\rangle=0}{=} \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar} x_0^2\right) \exp\left(x_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} a^\dagger\right)|0\rangle \\
\Rightarrow e^{\alpha a}|0\rangle &= |0\rangle
\end{aligned}$$

Analog gilt für die Beschleunigung aus dem Grundzustand

$$\exp\left(ip_0 \frac{X}{\hbar}\right)|0\rangle = \exp\left(-\frac{p_0^2}{2m\omega\hbar}\right) \exp\left(ip_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} a^\dagger\right)|0\rangle$$

Hieraus folgt die Definition für einen kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$, mit $\alpha \in \mathbb{C}$ gilt

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \\
x_0 &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha) \\
p_0 &= \sqrt{2m\omega\hbar} \operatorname{Im}(\alpha)
\end{aligned}$$

Ein kohärenter Zustand ist ein Eigenzustand von a , denn es gilt

$$\begin{aligned}
a|\alpha\rangle &= a e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \\
&\stackrel{a|0\rangle=0}{=} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} (a e^{\alpha a^\dagger} - e^{\alpha a^\dagger} a)|0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} [a, e^{\alpha a^\dagger}]|0\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \alpha e^{\alpha a^\dagger} \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1}|0\rangle \\
&= \alpha e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \\
&= \alpha|\alpha\rangle
\end{aligned}$$

63. **Berechne die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands in einem Quantenoszillator. Berechne die Zeitentwicklung der entsprechenden Orts- und Impulserwartungswerte.**

Für die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustandes gilt mit

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$\Rightarrow |n(t)\rangle = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}|n\rangle$$

sowie

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle$$

$$= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle$$

$$= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Also gilt für die Zeitentwicklung von $|\alpha\rangle$

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle$$

$$= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

mit $\alpha(t) = e^{-i\omega t}\alpha$

Nun gilt das kohärente Zustände unter der Zeitentwicklung kohärent bleiben, denn es gilt

$$a|\alpha(t)\rangle = \alpha(t)|\alpha(t)\rangle$$

$$\langle\alpha(t)|a^\dagger = \alpha(t)^*\langle\alpha(t)|$$

Also gilt für den Erwartungswert des Ortes

$$\langle\alpha(t)|X|\alpha(t)\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\alpha(t)|(a + a^\dagger)|\alpha(t)\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha(t) + \alpha(t)^*)$$

$$= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha(t))$$

Analog folgt für den Impulserwartungswert

$$\langle\alpha(t)|P|\alpha(t)\rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} \operatorname{Im}(\alpha(t))$$

9 Produktzustände

64. Was versteht man unter einem Produktzustand in einem Tensorprodukt von Vektorräumen? Wann ist eine solche Konstruktion sinnvoll/notwendig in der Quantenmechanik? Wann nennt man ein System separabel?

Bei mehreren Freiheitsgraden, z.B. in mehreren Dimensionen mit den Operatoren X, P_x, Y, P_y für die gilt

$$\begin{aligned}[X, P_x] &= [Y, P_y] = i\hbar \\ 0 &= [X, Y] = [X, P_y] = [Y, P_x] = [P_x, P_y]\end{aligned}$$

gilt das die Basis

$$\begin{aligned}X|x, y\rangle &= x|x, y\rangle \\ Y|x, y\rangle &= y|x, y\rangle\end{aligned}$$

ein Produktzustand ist, dass heißt

$$\begin{aligned}|x, y\rangle &= |x\rangle \otimes |y\rangle \\ X &= X \otimes I \\ Y &= I \otimes Y\end{aligned}$$

Der Ansatz eines Produktzustandes ist sinnvoll in der Quantenmechanik, um einen Separationsansatz zu machen, und sich somit das Problem zu vereinfachen.

Wenn nun gilt

$$\begin{aligned}H &= H_1(X, P_x) + H_2(Y, P_y) \\ H_1|E_1\rangle &= E_1|E_1\rangle \\ H_2|E_2\rangle &= E_2|E_2\rangle\end{aligned}$$

dann heißt das System separabel und

$$|E_1, E_2\rangle = |E_1\rangle \otimes |E_2\rangle$$

ist ein Eigenzustand mit

$$\begin{aligned}H|E_1, E_2\rangle &= (E_1 + E_2)|E_1, E_2\rangle \\ \Rightarrow \langle x, y|E_1, E_2\rangle &= \psi(x, y) \\ &= \langle x|E_1\rangle \langle y|E_2\rangle \\ &= \psi_1(x)\psi_2(y)\end{aligned}$$

65. **Was muss man bei einem Produktzustand von zwei identischen Teilchen beachten? Warum?**

Für zwei Teilchen gleicher Sorte muss man beachten, dass beide dem gleichen Potential folgen, und damit ist

$$H_1(X_1, P_1) = H_2(X_2, P_2)$$

Des Weiteren muss man die Ununterscheidbarkeit von zwei identischen Teilchen beachten, somit gilt die Fundamentalsymmetrie

$$H(X_1, X_2, P_1, P_2) = H(X_2, X_1, P_2, P_1)$$

Für den Vertauschungsoperator V_{12} der 1, 2 vertauscht gilt

$$[H, V_{12}] = 0$$

Also Eigenzustände sind gleichzeitig Eigenzustände von H und V_{12} und es gilt

$$V_{12}^2 = 1$$

Also müssen die Wellenfunktionen symmetrisch oder antisymmetrisch sein, also

$$\psi(x_1, x_2) = \pm \psi(x_2, x_1)$$

66. **Was versteht man unter Bosonen und Fermionen? Stelle die jeweilige normierte Basis von Produktzuständen für zwei Teilchen auf, für den Fall eines drei-dimensionalen Einteilchenvektorraums. Wieviele Basiszustände gibt es für jeweils zwei identische Bosonen bzw. Fermionen in einem N-dimensionalen Einteilchenvektorraum?**

Der Eigenwert von V_{12} ist für eine Teilchensorte immer gleich, so gilt:

Fermionen

- V_{12} hat Eigenwert -1
- Antisymmetrisch unter Vertauschung
- haben halbzahliges Spin
- z.B. Elektronen, Protonen und Neutronen

Bosonen

- V_{12} hat Eigenwert 1
- sind symmetrisch unter Vertauschung
- haben ganzzahliges Spin
- z.B. Photonen

Die Basisfunktionen lauten für Bosonen (+) und Fermionen (-)

$$|\omega_1, \omega_2\rangle_{B/F} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle \pm |\omega_2\rangle \otimes |\omega_1\rangle)$$

Die Normierung mit $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ist nur für den Fall $\omega_1 \neq \omega_2$. Nun ist es möglich zwei identische Bosonen im gleichen Zustand zu haben, jedoch geht dies nicht für zwei Fermionen, denn

$$\begin{aligned} |\omega_1, \omega_1\rangle_B &= |\omega_1\rangle \otimes |\omega_1\rangle \\ |\omega_1, \omega_1\rangle_F &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\omega_1\rangle \otimes |\omega_1\rangle - |\omega_1\rangle \otimes |\omega_1\rangle) = 0 \end{aligned}$$

Dies ist das Pauli Prinzip, dass besagt das zwei Fermionen nicht den gleichen Zustand haben können.

Für zwei Teilchen in einem 3 Einteilchensystem gilt dass es 9 Produktzustände geben kann

$$\begin{array}{ccc} |a\rangle \otimes |a\rangle & |a\rangle \otimes |b\rangle & |a\rangle \otimes |c\rangle \\ |b\rangle \otimes |a\rangle & |b\rangle \otimes |b\rangle & |b\rangle \otimes |c\rangle \\ |c\rangle \otimes |a\rangle & |c\rangle \otimes |b\rangle & |c\rangle \otimes |c\rangle \end{array}$$

Für zwei identische Bosonen in einem n-dimensionalen Einteilchenraum gibt es

$$\frac{(n+1)n}{2}$$

Produktzustände, und für zwei identische Fermionen gibt es

$$\frac{(n-1)n}{2}$$

Produktzustände.

67. Beschreibe eine allgemeine Wellenfunktion von n Fermionen. Was versteht man unter einer Slater-Determinante?

Die allgemeine Wellenfunktion von n Fermionen lautet

$$\psi(1, 2, \dots, N) = A_N \varphi_1(1) \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N)$$

Wobei A_N der Antisymmetrisierungsoperator ist, d.h.

$$\psi(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = -\psi(1, 2, \dots, k, \dots, j, \dots, N)$$

Die Slater Determinante kann nun wie folgt geschrieben werden

$$A_N \varphi_1(1) \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \dots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \dots & \varphi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \dots & \varphi_N(N) \end{vmatrix} = |\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_N|$$

68. **Was ist eine Dichtematrix? Wann ist dieses Konzept sinnvoll? Wie kann man durchschnittlichen Erwartungswert mit Hilfe der Dichtematrix berechnen? Was ist die Beziehung zwischen der Dichtematrix und der Entropie? Was sind reine Zustände?**

Die Dichtematrix ist ein Operator der jedem Basiszustand $|\omega\rangle$ eine Wahrscheinlichkeit P_ω zuweist

$$\varrho = \sum_{\omega} P_{\omega} |\omega\rangle \langle \omega|$$

P_ω sind nicht unbedingt quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten. Es muss aber gelten:

$$\begin{aligned} \sum_{\omega} P_{\omega} &= 1 = \text{Spur}(\varrho) = \text{tr}(\varrho) \\ \text{tr}(\varrho^2) &\leq 1 \end{aligned}$$

Für den Durchschnittlichen Erwartungswert gilt

$$\begin{aligned} \langle \bar{\Lambda} \rangle &= \sum_{\omega} P_{\omega} \langle \omega | \Lambda | \omega \rangle \\ &= \sum_{\omega} \langle \omega | P_{\omega} \Lambda | \omega \rangle \\ &\stackrel{\varrho|\omega\rangle = P_{\omega}|\omega\rangle}{=} \sum_{\omega} \langle \omega | \varrho \Lambda | \omega \rangle \\ &= \text{tr}(\varrho \Lambda) \end{aligned}$$

Die Dichtematrix ist relevant für die statische Mechanik, z.B. Entropie

$$S = -\text{tr}(\varrho \ln(\varrho)) = \langle \ln(\varrho) \rangle$$

$$\begin{array}{ll} \text{Maximal} & S = -\ln(n) \\ \text{Minimal} & S = 0 \end{array}$$

Reine Zustände sind Zustände bei denen die Wahrscheinlichkeit nur $P_\omega = 1$ ist. Es gilt weiterhin

$$\begin{aligned} P_{\omega' \neq \omega} &= 0 \\ S &= 0 \\ \varrho^2 &= \varrho \end{aligned}$$

69. **Was ist eine reduzierte Dichtematrix? Wie kann sie als Maß für eine Verschränkung benutzt werden? Berechne die reduzierte Dichtematrix für ein einfaches Beispiel von zwei Teilsystemen in einem verschränkten Zustand. Was ist die Dichtematrix für einen reinen Zustand?**

Die Dichtematrix ist relevant für verschränkte Systeme. Für zwei Teilchensysteme A und B mit den Basiszuständen $|a\rangle$ und $|b\rangle$, gilt das die allgemeine Produktbasis

$$|a, b\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$$

ein Verschränkter Zustand ist, dieser kann nicht als Produktzustand geschrieben werden

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle + |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle) \quad a_1 \neq a_2; b_1 \neq b_2$$

Die Dichtematrix des Teilchensystems A heißt dann reduzierte Dichtematrix und wird durch die Teilspur über B gebildet

$$\varrho_A = \text{tr}_B(\varrho) = \sum_b \langle b | \varrho | b \rangle$$

Wobei ϱ die Dichtematrix des Gesamtsystems ist.

In dem Fall reiner Zustand mit $P_\psi = 1$ gilt

$$\begin{aligned} &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ |a\rangle \otimes |b\rangle &= |a, b\rangle \\ |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1, b_1\rangle + |a_2, b_2\rangle) \\ \varrho &= \frac{1}{2}(|a_1 b_1\rangle\langle a_1 b_1| + |a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2| + |a_2 b_2\rangle\langle a_1 b_1| + |a_2 b_2\rangle\langle a_2 b_2|) \end{aligned}$$

Nun gilt für die reduzierte Dichtematrix

$$\begin{aligned} \varrho_A &= \sum_b \langle b | \varrho | b \rangle \\ &= \sum_b \langle b | \psi \rangle \langle \psi | b \rangle \\ &= \langle b_1 | \varrho | b_1 \rangle + \langle b_2 | \varrho | b_2 \rangle \\ &= \frac{1}{2}(|a_1\rangle\langle a_1| + |a_2\rangle\langle a_1|) \end{aligned}$$

wobei gilt

$$\begin{aligned} \langle b_1 | a_1, b_1 \rangle &= |a_1\rangle \\ \langle b_1 | a_2, b_2 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Also gilt mit $P_{a_1} = P_{a_2} = \frac{1}{2}$

$$\varrho_A = \sum_a P_a |a\rangle\langle a|$$

10 Der Drehimpulsoperator

70. **Wie wird eine Drehung $R(\theta)$ im klassischen zweidimensionalen Raum beschrieben? Was muss demnach für die entsprechende unitäre Transformation U_R der Orts- und Impuls-Operatoren in der Quantenmechanik gelten?**

Die Drehung wird klassisch über eine Drehmatrix $R(\theta)$

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

beschrieben. Also muss für eine Drehung gelten

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos(\theta) - y \sin(\theta) \\ y \cos(\theta) + x \sin(\theta) \end{pmatrix}$$

und für den Drehimpuls gilt klassisch

$$L_z = X P_y - Y P_x$$

Nun muss also in der Quantenmechanik gelten:

$$U_R^\dagger X U_R = X \cos(\theta) - Y \sin(\theta)$$

$$U_R^\dagger Y U_R = Y \cos(\theta) + X \sin(\theta)$$

und für $\theta \rightarrow 0$ gilt

$$U_R^\dagger(\varepsilon) X U_R(\varepsilon) = X - \varepsilon Y$$

$$U_R^\dagger(\varepsilon) Y U_R(\varepsilon) = Y + \varepsilon X$$

ganz analog kann man auch die Impulse P_x, P_y mit dem Boostoperator beschreiben.

71. **Welche Beziehung gilt zwischen Drehungen U_R und dem Drehimpuls L_z in zwei Dimensionen?**

Analog zur Translation ist der Drehimpuls der Generator für die Rotation, also

$$U_R(\varepsilon) = I - i\varepsilon \frac{L_z}{\hbar}$$

$$U_R(\theta) = \exp(-i\theta \frac{L_z}{\hbar})$$

72. Leite die Kommutatorgleichungen für den Drehimpuls L_z mit X , Y , P_x und P_y in zwei Dimensionen aus den Transformationsregeln für eine infinitesimale Drehung her. Welcher Operator L_z erfüllt diese Kommutatorregeln?

Da $U^\dagger = U^{-1}$ gilt

$$\begin{aligned} XU_R &= U_RX - \varepsilon U_R Y \\ \Rightarrow [X, U_R] &= -\varepsilon U_R Y \end{aligned}$$

mit $U_R(\varepsilon) = I - i\varepsilon \frac{L_z}{\hbar}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [X, I - i\varepsilon \frac{L_z}{\hbar}] &= -\varepsilon (I - i\varepsilon \frac{L_z}{\hbar}) Y \\ \Rightarrow [X, L_z] &= -i\hbar Y \end{aligned}$$

analog folgen

$$\begin{aligned} [Y, L_z] &= i\hbar X \\ [P_x, L_z] &= -i\hbar P_y \\ [P_y, L_z] &= i\hbar P_x \end{aligned}$$

Offensichtlich erfüllt $L_z = XP_y - YP_x$ diese Kommutatorregeln.

73. Stelle den Drehimpulsoperator in zwei Dimensionen als Differentialoperator auf eine Wellenfunktion in kartesischen Koordinaten dar. Leite den entsprechenden Ausdruck für Polarkoordinaten her.

In der Ortsbasis gilt

$$\begin{aligned} L_z &\rightarrow -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \\ L_z |l_z\rangle &= l_z |l_z\rangle \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} |l_z\rangle &= \int \int dx dy \psi(x, y) |x, y\rangle \\ \Rightarrow -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, y) &= l_z \psi(x, y) \end{aligned}$$

nun gilt mit Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r \cos(\varphi) \\ y &= r \sin(\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} \\
&= -r \sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial x} + r \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial y} \\
&= -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \\
\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi &= l_z \psi
\end{aligned}$$

Also kann man schließen

$$L_z \mapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

74. **Berechne die Eigenfunktionen und Eigenwerte für den Drehimpuls in zwei Dimensionen. Beschreibe wie dies zur Lösung von allgemeinen rotationsinvarianten Problemen benutzt werden kann. Gib die resultierende Differentialgleichung an.**

Mit

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = l_z \psi$$

folgt für die Eigenfunktion des Drehimpulses

$$\psi(r, \varphi) = \exp(il_z \frac{\varphi}{\hbar}) f(r)$$

mit $f(r)$ als beliebige Funktion des Radius. Falls nun

$$\begin{aligned}
\psi(r, \varphi) &= \psi(r, \varphi + 2\pi) \\
\Rightarrow \quad l_z &= m\hbar \quad m \in \mathbb{Z}
\end{aligned}$$

und falls nur das Skalarprodukt Periodisch ist gilt

$$\begin{aligned}
\langle \psi(r, \varphi) | \psi(r, \varphi) \rangle &= \langle \psi(r, \varphi + 2\pi) | \psi(r, \varphi + 2\pi) \rangle \\
\Rightarrow \quad l_z &= \frac{m}{2} \hbar \quad m \in \mathbb{Z}
\end{aligned}$$

Für allgemeine rotationsinvariante Probleme gilt

$$\begin{aligned}
V(r, \varphi) &= V(r) \\
\text{bzw.} \quad [L_z, H] &= 0
\end{aligned}$$

das heißt es gibt simultane Eigenvektoren für H und L_z . Für die kinetische Energie in Polarkoordinaten gilt

$$\begin{aligned}
\frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)
\end{aligned}$$

Mit dem Ansatz $\psi(r, \varphi) = \exp(il_z \frac{\varphi}{\hbar})f(r)$ gilt

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= E|\psi\rangle \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r) \right) \exp(il_z \frac{\varphi}{\hbar})f(r) &= E \exp(il_z \frac{\varphi}{\hbar})f(r) \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l_z^2}{r^2 \hbar^2} \right) + V(r) \right) f(r) &= E f(r) \end{aligned}$$

Dies ist ein Eindimensionales Problem, dass unabhängig ist von φ , die Unterschiede zu den bisher betrachteten Problemen sind

- $V_{eff}(r) = V(r) - \underbrace{\frac{l_z^2}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalbarriere}}$
- $r \leq 0 \leq \infty$
- $\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$

75. **Wie ist der dreidimensionale Drehimpuls definiert? Wie kann diese Definition mit Drehungen im dreidimensionalen Raum hergeleitet werden?**
Der dreidimensionale Drehimpuls ist definiert mit dem Levi-Civita Symbol als

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} L_k$$

Für die Drehung um die z-Achse im dreidimensionalen Raum gilt die Drehmatrix

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und es gilt

$$U_{R_z}(\theta = \varepsilon) = I - i \frac{\varepsilon L_z}{\hbar}$$

Nun folgt durch Matrixmultiplikation für die Beziehung zwischen infinitesimalen Drehungen

$$R_y(-\varepsilon)R_x(-\varepsilon)R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = R_z(-\varepsilon^2)$$

Also gilt

$$\begin{aligned} U_{R_y}(-\varepsilon)U_{R_x}(-\varepsilon)U_{R_y}(\varepsilon)U_{R_x}(\varepsilon) &= U_{R_z}(-\varepsilon^2) \\ &= I + i \frac{\varepsilon^2 L_z}{\hbar} \\ \Rightarrow U_{R_y}(\varepsilon)U_{R_x}(\varepsilon) &= U_{R_x}(\varepsilon)U_{R_y}(\varepsilon) + i \frac{\varepsilon^2 L_z}{\hbar} + O(\varepsilon^4) \end{aligned}$$

da gilt

$$U_{R_y}(\varepsilon)L_z = L_z + O(\varepsilon^2)$$

Also gilt

$$\begin{aligned} [U_{R_y}(\varepsilon), U_{R_x}(\varepsilon)] &= i \frac{\varepsilon^2 L_z}{\hbar} \\ \Rightarrow -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} [L_y, L_x] &= i \frac{\varepsilon^2 L_z}{\hbar} \\ \Rightarrow [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \end{aligned}$$

Die anderen Kommutatoren folgen analog.

76. **Berechne $[L^2, L_z]$. Was bedeutet dies? Welche allgemeinen Eigenwertgleichungen gelten entsprechend für den Drehimpuls?**

Mit

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

gilt

$$\begin{aligned} [L^2, L_z] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z] \\ &= L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x + L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y + \underbrace{[L_z^2, L_z]}_{=0} \\ &= L_x(-i\hbar L_y) + (-i\hbar L_y)L_x + L_y(i\hbar L_x) + (i\hbar L_x)L_y \\ &= 0 \end{aligned}$$

Also existiert eine gemeinsame Eigenbasis von L^2 und L_z mit

$$\begin{aligned} L_z|l, l_z\rangle &= l_z|l, l_z\rangle \\ L^2|l, l_z\rangle &= \lambda_l|l, l_z\rangle \end{aligned}$$

77. **Wie sind Auf- und Absteigeoperatoren für den Drehimpuls definiert? Zeige mit Hilfe der Drehimpuls-Kommutatoren, dass sie den Drehimpuls ändern. Was sind die Kommutatorregeln für L^+ , L^- und L_z**

Die Auf- und Absteigeoperatoren für den Drehimpuls lauten

$$\begin{aligned} L^+ &= L_x + iL_y \\ L^- &= L_x - iL_y \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} L^+L^- &= L_x^2 + L_y^2 + iL_yL_x - iL_xL_y \\ &= L_x^2 + L_y^2 + i[L_y, L_x] \\ &= L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z \\ L^-L^+ &= L_x^2 + L_y^2 - iL_yL_x + iL_xL_y \\ &= L_x^2 + L_y^2 + i[L_x, L_y] \\ &= L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z \end{aligned}$$

Also gilt für die Kommutatoren

$$\begin{aligned}
[L_z, L^+] &= L_z L_x + i L_z L_y - L_x L_z - i L_y L_z \\
&= [L_z, L_x] + i [L_z, L_y] \\
&= i \hbar L_y + \hbar L_x \\
&= \hbar L^+ \\
[L_z, L^-] &= L_z L_x - i L_z L_y - L_x L_z + i L_y L_z \\
&= [L_z, L_x] + i [L_y, L_z] \\
&= i \hbar L_y - \hbar L_x \\
&= -\hbar L^- \\
[L^+, L^-] &= 2\hbar L_z
\end{aligned}$$

L^+ ändert den Drehimpuls, denn mit

$$\begin{aligned}
L_z |l, l_z\rangle &= l_z |l, l_z\rangle \\
\Rightarrow L_z L^+ |l, l_z\rangle &= ([L_z, L^+] + L^+ L_z) |l, l_z\rangle \\
&= (l_z + \hbar) L^+ |l, l_z\rangle \\
\Rightarrow L^+ |l, l_z\rangle &= c_+ |l, l_z + \hbar\rangle
\end{aligned}$$

Analog gilt für L^-

$$L^- |l, l_z\rangle = c_- |l, l_z - \hbar\rangle$$

78. **Zeige, dass es einen höchsten und niedrigsten Zustand von L_z geben muss. Welche Beziehung gilt entsprechend für den Eigenwert von L^2 und dem höchsten Eigenwert von L_z ? Welche Zustände von L_z gibt es dementsprechend für jeden Eigenwert von L^2 ?**

l_z ist beschränkt denn,

$$\begin{aligned}
\langle l, l_z | L_x^2 + L_y^2 | l, l_z \rangle &\geq 0 \\
\Rightarrow \langle l, l_z | L^+ L^- + L^- L^+ | l, l_z \rangle &\geq 0 \\
\Rightarrow \langle l, l_z | (L^2 - L_z^2) | l, l_z \rangle &\geq 0 \\
\Rightarrow \lambda_l - l_z^2 &\geq 0 \\
\Rightarrow 0 \leq l_z^2 &\leq \lambda_l
\end{aligned}$$

Es gibt also ein l_z^{min} mit

$$\begin{aligned}
L^- |l, l_z^{min}\rangle &= 0 \\
\Rightarrow L^+ L^- |l, l_z^{min}\rangle &= 0 \\
\Rightarrow (L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z) |l, l_z^{min}\rangle &= 0 \\
\Rightarrow (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z) |l, l_z^{min}\rangle &= 0 \\
\Rightarrow (\lambda_l - (l_z^{min})^2 + \hbar l_z^{min}) |l, l_z^{min}\rangle &= 0 \\
\Rightarrow \lambda_l = (l_z^{min})^2 - \hbar l_z^{min}
\end{aligned}$$

Analog gilt nun auch für l_z^{max}

$$\begin{aligned}
& L^+ |l, l_z^{max}\rangle = 0 \\
\Rightarrow & L^- L^+ |l, l_z^{max}\rangle = 0 \\
\Rightarrow & (L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z) |l, l_z^{max}\rangle = 0 \\
\Rightarrow & (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) |l, l_z^{max}\rangle = 0 \\
\Rightarrow & (\lambda_l - (l_z^{max})^2 - \hbar l_z^{max}) |l, l_z^{max}\rangle = 0 \\
\Rightarrow & \lambda_l = (l_z^{max})^2 + \hbar l_z^{max}
\end{aligned}$$

Also gilt

$$\begin{aligned}
& (l_z^{min})^2 - \hbar l_z^{min} = (l_z^{max})^2 + \hbar l_z^{max} \\
\Rightarrow & -l_z^{min} = +l_z^{max} =: l \\
\Rightarrow & \lambda_l = l(l + \hbar)
\end{aligned}$$

Also gibt es zu jedem Eigenwert $\lambda_l = l(l + \hbar)$ von L^2 Eigenzustände von L_z mit Eigenwerten von $-l$ bis $+l$.

79. **Leite einen Ausdruck für Normierung c_+ her in der Gleichung $L^+ |l, l_z\rangle = c_+ |l, l_z + \hbar\rangle$**
 Es gilt

$$L^2 |l, l_z\rangle = l(l + \hbar) |l, l_z\rangle$$

Da nun $|l, l_z\rangle$ normierte Zustände sind und L^- der Adjungierte Operator von L^+ ist gilt

$$\begin{aligned}
|c_+|^2 &= \langle l, l_z | c_+^* c_+ | l, l_z \rangle \\
&= \langle l, l_z | L^- L^+ | l, l_z \rangle \\
&= \langle l, l_z | L^2 - L_z^2 - \hbar L_z | l, l_z \rangle \\
&= l(l + \hbar) - l_z^2 - \hbar l_z
\end{aligned}$$

Also gilt

$$c_+ = \sqrt{l(l + \hbar) - l_z(l_z + \hbar)}$$

Analog folgt für L^-

$$L^- |l, l_z\rangle = \sqrt{l(l + \hbar) - l_z(l_z - \hbar)} |l, l_z\rangle$$

80. **Beschreibe die Eigenschaften, Besonderheiten und Unterschiede von orbitalen und intrinsischen („Spin“) Drehimpulsen.**

Beim Orbitalen Drehimpuls ist l ganzzahlig und diese werden durch

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

beschrieben.

Beim intrinsischen Drehimpuls (Spin $s = l$) ist der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens fest. Er ist

- halbzahlig für Fermionen ($s = \frac{1}{2}$, z.B. Elektronen, Protonen und Neutronen).
- ganzzahlig für Bosonen ($s = 1$ z.B. Photonen)

81. **Beschreibe wie man die Matrixdarstellung von Drehimpulsoperatoren für einen beliebigen Gesamtdrehimpuls l bestimmen kann. Stelle die Matrizen L^2 , L_z und L^+ für den Gesamtdrehimpuls $l = \frac{1}{2}$ und $l = 1$ dar. Was sind die Pauli Matrizen?**

Die Matrixdarstellung von Drehimpulsoperatoren für einen beliebigen Gesamtdrehimpuls bekommt man, indem man für l alle möglichen l_z bestimmt und dann Drehimpulsoperatoren auf diese Zustände anwendet. Durch einen Isomorphismus von allen möglichen Zuständen in den \mathbb{R}^n in dem die Zustände orthogonal sein müssen, da sie Eigenzustände sind, kann man nun die Abbildungsmatrix bezüglich dieser Basis bestimmen was die Matrixdarstellung ist.

Nun gilt für $l = s = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\frac{1}{2} \leq l_z \leq \frac{1}{2} \\ \Rightarrow l_z = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} |l = \frac{1}{2}, l_z = \frac{1}{2}\rangle &= |\uparrow\rangle \\ |l = \frac{1}{2}, l_z = -\frac{1}{2}\rangle &= |\downarrow\rangle \\ \Rightarrow L_z |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \\ L_z |\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \\ \Rightarrow L_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Des weiteren gilt nun

$$\begin{aligned}
 L^2|\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\hbar}{2} + \hbar\right)|\uparrow\rangle \\
 &= \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle \\
 L^2|\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\hbar}{2} + \hbar\right)|\downarrow\rangle \\
 &= \frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle \\
 \Rightarrow L^2 &= \hbar^2 \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

und es gilt

$$\begin{aligned}
 L^+|\uparrow\rangle &= 0 \\
 L^+|\downarrow\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}\left(\frac{\hbar}{2} + \hbar\right) - \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\left(-\frac{\hbar}{2} + \hbar\right)}|\uparrow\rangle \\
 &= \hbar|\uparrow\rangle \\
 \Rightarrow L^+ &= \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

analog gilt

$$\begin{aligned}
 L^- &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow L_x &= \frac{L^+ + L^-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 L_y &= \frac{L^+ - L^-}{2i} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

für $l = \hbar$, $l_z = \pm\hbar, 0$ gilt:

$$\begin{aligned}
 L_z &= \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \\
 L^2 &= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 L^+ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Die Pauli-Matrizen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ (nach Wolfgang Pauli) bilden zusammen mit der 2×2 -Einheitsmatrix, die in diesem Zusammenhang mit σ_0 bezeichnet wird, eine Basis des

4-dimensionalen reellen Vektorraums der komplexen hermiteschen 2×2 -Matrizen. In der Quantenphysik stellen sie die Wirkung der Spindrehimpulsoperatoren, $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, i \in \{1, 2, 3\}$, auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen, beispielsweise auf Elektronen, dar. Die Pauli-Matrizen lauten

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

11 Rotationsinvariante Probleme

82. **Welche Kommutatoreigenschaften von H gelten für ein rotationsinvariantes Problem? Zeige, dass daraus eine Entartung folgt.**

Für Rotationsinvariante Probleme soll gelten

$$[e^{i\frac{\vec{\theta} \cdot \vec{L}}{\hbar}}, H] = 0 \quad \forall \theta$$

Also muss insbesondere gelten

$$\begin{aligned} [\vec{L}, H] &= 0 \\ \Rightarrow [L^+, H] &= [L^-, H] = [L^2, H] = 0 \end{aligned}$$

Also gibt es eine gemeinsame Eigenbasis von H, L^2, L_z und es gilt

$$\begin{aligned} H|l, l_z\rangle &= E|l, l_z\rangle \\ H|l, l_z + \hbar\rangle &= H \frac{L^+}{c} |l, l_z\rangle \\ &= \frac{L^+}{c} H|l, l_z\rangle \\ &= E \frac{L^+}{c} |l, l_z\rangle \\ &= E|l, l_z + \hbar\rangle \end{aligned}$$

wobei

$$c = \sqrt{l(l + \hbar) - l_z(l_z + \hbar)}$$

ist. Also gilt, dass die Eigenwerte von H für alle Zustände in der gleichen Leiter ($-l \leq l_z \leq l$) gleich sind. Dies bedeutet, dass es $2l + 1$ Entartung gibt. Aber es gibt viele Zustände mit einem höchsten Drehimpuls l . Die Eigenwerte E_{n,l,l_z} sind unabhängig von l_z .

83. **Welche Wellenfunktionen erfüllen die Eigenwertgleichungen von L^2 und L_z im Ortsraum? Stelle L_z im Ortsraum dar. Gebe alle Wellenfunktionen bis $l = 1$ an.**

Klassisch gilt für Rotationsinvariante Probleme

$$V(\vec{r}) = V(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2})$$

nun gilt mit Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y &= r \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ z &= r \cos(\theta) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{array}{ll} -\pi < \varphi \leq \pi & \text{Azimutwinkel} \\ 0 \leq \theta \leq \pi & \text{Polarwinkel} \end{array}$$

Um nun die Orbitale (d.h. Wellenfunktionen) herzuleiten, drücke P^2 , $V(r)$, L^2 , L_z , L_x und L_y in Kugelkoordinaten aus

$$\begin{aligned} L_z &= X P_y - Y P_x \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_x &= -i\hbar \left(\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos(\varphi) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L^- &= -\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+\hbar)}{2mr^2} + V(r) \end{aligned}$$

Löse nun die Schrödingergleichung mit Hilfe des Separationsansatzes

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

mit $l_z = m$. Nun gilt

$$\begin{aligned} -l &\leq m \leq l \\ L_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \\ L^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \end{aligned}$$

Nun gilt für alle Rotationsinvarianten Probleme

$$\begin{aligned} L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Für die Lösung von $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ gibt es nun zwei Möglichkeiten. Die erste ist die Herleitung.

Wegen der L_z -Gleichung gilt

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \propto e^{im\varphi}$$

Also gilt

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2(\theta)} \right)$$

Nun gilt für $l = m$

$$\begin{aligned} L^2 Y_{ll} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{ll} \\ \Rightarrow Y_{ll} &\propto e^{il\varphi} \sin^l(\theta) \end{aligned}$$

Benutze nun

$$L^- = -\hbar e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

um Y_{lm} für $-l \leq m \leq l$ zu lösen und normiere die Lösung dann noch.

Die zweite Variante ist das Nachschlagen der Lösung. Diese sind sogenannte Kugelflächenfunktionen, für die gilt

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = c e^{im\varphi} P_l^m(\cos(\theta))$$

wobei P_l^m assoziierte Legendre Polynome sind und

$$c = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}$$

Nun gilt für die ersten Kugelflächenfunktionen

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\varphi} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2(\theta) - 1) \end{aligned}$$

84. Was bedeutet die Aussage, dass die Kugelflächenfunktionen „vollständig“ und „orthonormal“ sind? Was versteht man unter einer Multipolentwicklung?

Die Kugelflächenfunktionen sind orthogonal, denn es gilt

$$\int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_{-\pi}^\pi d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (10)$$

und für die Vollständigkeit gilt

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') = \delta(\varphi' - \varphi) \delta(\cos(\theta) - \cos(\theta'))$$

Da jede Funktion, die analytisch ist, entwickelt werden kann, gilt

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

als Multipolentwicklung, und es gilt

$$\int \int d\varphi d\theta \sin(\theta) \psi(r, \theta, \varphi) Y_{lm}^* \stackrel{(10)}{=} f_{lm}(r)$$

85. Was ist der Ausdruck der kinetischen Energie in drei Dimensionen als Ableitung der Radialkomponente r der Kugelkoordinaten und der Drehimpulsoperatoren?

Für die kinetische Energie gilt

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{P^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} \end{aligned}$$

86. Mache einen Separationsansatz für die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ für allgemeine rotationsinvariante Probleme und leite eine effektive eindimensionale Differentialgleichung für die Radialkomponente $f(r)$ her. Zeige, dass sich die Differentialgleichung mit dem Ansatz $f(r) = \frac{u(r)}{r}$ vereinfacht. Was sind die Gemeinsamkeiten/Unterschiede der Differentialgleichung zu der Schrödingergleichung in einer Dimension?

Für allgemeine Rotationsinvariante Probleme gilt:

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + V(r) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \end{aligned}$$

Nun löst man die Schrödingergleichung im Ortsraum mit dem Ansatz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

und es folgt durch einsetzen die folgende Gleichung

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) f(r) = E f(r)$$

Diese System haben wir für alle Rotationsinvariante Probleme für den Winkelanteil gelöst, aus diesem Grund kümmern wir uns nur noch um $f(r)$, nun gilt mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{u(r)}{r} \\ \Rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} f(r) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{u(r)}{r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \left(\frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2} \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ru' - u) \\ &= \frac{1}{r^2} (u' + ru'' - u') \\ &= \frac{u''}{r} \end{aligned}$$

Also gilt insgesamt

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{r} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) \frac{u}{r} &= E \frac{u}{r} \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) u(r) &= E u(r) \end{aligned}$$

Dies hat die Form einer normalen Schrödingergleichung in einer Dimension für $u(r)$. Die Unterschiede sind

- Zentrifugalbarriere $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$
- Wertebereich $0 \leq r < \infty$
- neue Randbedingung für $r \rightarrow 0$

87. **Argumentiere, dass die Lösung für die Radialkomponente $f(r) = \frac{u(r)}{r}$ in rotationsinvarianten Problemen am Ursprung ein typisches Potenzverhalten zeigen muss.**

Insbesondere gilt das $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ für $l \neq 0$ und für $r \rightarrow 0$ dominiert. Dies muss durch den Term $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r)$ kompensiert werden. Also muss gelten

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{l(l+1)}{r^2} u(r)$$

Dies deutet auf ein Potenzgesetz für $r \rightarrow 0$ hin.

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} u &\propto r^\alpha \\ \Rightarrow \alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} &= l(l+1)r^{\alpha-2} \\ \Rightarrow \alpha(\alpha-1) &= l(l+1) \\ \Rightarrow \alpha &= l+1 \\ \text{oder } \alpha &= -l \end{aligned}$$

Im Grenzwert $r \rightarrow 0$ ist

- r^{l+1} regulär
- r^{-l} singulär (dies ist nur relevant, wenn der Ursprung $r \rightarrow 0$ nicht erreicht werden kann)

Für $l = 0$ muss $f(r)$ endlich sein für $r \rightarrow 0$. Also muss $f(r)$ stetig sein und $f'(r)$ muss auch stetig sein, falls $V(r=0)$ endlich ist. Dies heißt also

$$f'(r=0) = 0$$

für $f(r) = \frac{u(r)}{r}$. Also gilt

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \propto r$$

also gilt allgemein

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = r f(r) \propto r^{l+1}$$

für $l = 0$ ist aber auch ein schnellerer Abfall möglich.

für $r \rightarrow \infty$

ist $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ klein und es gelten die üblichen Regeln für gebundene und ungebundene

Zustände, falls $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = V_0$ endlich ist. Aus diesem Grund wählt man o.B.d.A $V_0 = 0$. Also gibt es nun ungebundene Zustände für $E > 0$. Nun gilt für $r \rightarrow \infty$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow u(r) \propto e^{\pm ikr}$$

Für gebundene Zustände mit $E < 0$ gilt im $r \rightarrow \infty$

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\Rightarrow u(r) \propto e^{-|\kappa|r}$$

88. **Stelle eine Multipolentwicklung für eine ebene Welle $\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})$ in z-Richtung auf. Durch welche Funktionen werden die Radialkoeffizienten $f_{lm}(r)$ charakterisiert? Argumentiere, dass diese Funktionen die entsprechende eindimensionale Schrödingergleichung für ein freies Teilchen in radialer Richtung erfüllen müssen. Was sind entsprechend die allgemeinen Lösungen für ein freies Teilchen als Funktion der Kugelflächenfunktionen?**

Betrachte das freie Teilchen mit $V(r) = 0$. In kartesischen Koordinaten kennen wir die Lösung als

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

dies ist eine Ebene Welle in Richtung \vec{k} . Jedoch ist eine Ebene Welle nicht Rotationsinvariant. Also kann man folgern das es eine Entartung gibt, also viele Lösungen zur gleichen Energie $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Das Ziel ist also das finden aller Rotationsinvarianten Lösungen für das freie Teilchen.

Finde nun eine geschickte Überlagerung aus bekannten Lösungen (eben Wellen). Wir führen also eine Multipolentwicklung durch mit

$$e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f(r) Y_{lm}$$

$$f(r) = \int d\varphi \int \sin(\theta) d\theta Y_{lm}^* e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Nun wählen wir uns das Koordinatensystem so, dass $\vec{k} = k\hat{z}$ also gilt

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos(\theta)$$

des weiteren gilt

$$Y_{lm} \propto e^{im\varphi} P_l^m(\cos(\theta))$$

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi e^{im\varphi} = 2\pi \delta_{m0}$$

Also gilt

$$f(r) = 2\pi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta Y_{lm}^* e^{ikr \cos(\theta)} \delta_{m0}$$

Mit der Substitution $z = \cos(\theta)$ und

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos(\theta))$$

gilt

$$f(r) = 2\pi \int_{-1}^1 dz e^{ikz} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(z)$$

Dies Lösungen sind nun

$$\begin{aligned} \text{für } l=0 \quad f(r) &= c_0 \frac{\sin(kr)}{kr} \\ \text{für } l=1 \quad f(r) &= c_1 \left(\frac{\sin(kr)}{(kr)^2} - \frac{\cos(kr)}{kr} \right) \\ \text{etc} \end{aligned}$$

Dies sind die sphärischen Besselfunktionen

$$\begin{aligned} j_0(kr) &= \frac{\sin(kr)}{kr} \\ j_l(x) &= -x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l j_0(x) \end{aligned}$$

Also gilt

$$e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\theta))$$

Nun gilt, dass jede einzelne sphärische Besselfunktion

$$u(r) = r f(r) = r j_l$$

die eindimensionale Differentialgleichung mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ erfüllt. Also sind Rotationsinvariante Lösungen zu $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

89. Gegeben sei eine bekannte Lösung für die zeitunabhängige Schrödingergleichung in einem rotationsinvarianten System. Zeige, dass jeder Term in der Multipolentwicklung dieser Lösung separat wieder eine Lösung darstellt. Argumentiere, dass daher die radialabhängigen Koeffizienten nicht von der Quantenzahl in z-Richtung m abhängen.

Falls eine Lösung $\psi(r, \theta, \varphi)$ bekannt ist, dann gilt mit der Multipolentwicklung

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_{lm}$$

mit

$$f_{lm}(r) = \int d\Omega Y_{lm}^* \psi(r, \theta, \varphi)$$

Für Rotationsinvariante Probleme gilt nun

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \\ \Rightarrow & \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) \right) f_{lm}(r) Y_{lm} = E \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_{lm} \end{aligned}$$

für $f(r) = \frac{u(r)}{r}$ gilt nun

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{u''}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \frac{u}{r} + V(r) \frac{u}{r} \right) Y_{lm} = E \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{u}{r} Y_{lm}$$

Wende nun

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi)$$

auf beiden Seiten an, denn es gilt

$$\begin{aligned} & \int d\Omega Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2M} u'' + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} u + V(r) u = E u \end{aligned}$$

Dies gilt für jede beliebige Komponente $f_{lm} = \frac{u}{r}$ und insbesondere ist f_{lm} unabhängig von m .

90. Was sind die Quantenzahlen für den Grundzustand und die zwei niedrigsten Anregungen für einen isotropen drei-dimensionalen Oszillator in „kartesischen Quantenzahlen“ bzw. in Drehimpuls- und Hauptquantenzahlen?

Hauptquantenzahl n	n_x	n_y	n_z	Drehimpulsquantenzahl l	m	Entartungsgrad
0	0	0	0	0	0	1
1	1	0	0	1	0	3
	0	1	0		1	
	0	0	1		-1	
2	2	0	0	2	-2	6
	1	1	0		-1	
	1	0	1		0	
	0	1	1		1	
	0	2	0		2	
	0	0	2		0	
				0		

12 Das Wasserstoffatom

91. Was ist die Differentialgleichung für die Radialkomponente der Wellenfunktion im Wasserstoffatom? Mache einen geeigneten Ansatz für die Wellenfunktion und zeige, dass im Radialanteil ein Produkt von einer Polynomfunktion mit einer Exponentialfunktion zu einer Rekursionsformel für die Koeffizienten im Polynom führt. Wie folgt daraus eine Quantisierungsbedingung?

Beim Wasserstoffatom ist die potentielle Energie

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Wenn man nun in Relativkoordinaten mit der effektiven Masse

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

rechnet, gilt mit dem Ansatz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

die schon bekannte Differentialgleichung für den Radialanteil

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' - \frac{e^2}{r} u + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u = E u$$

Dies ist eine eindimensionale Differentialgleichung mit einem Lenard-Jones-Potentail als Effektiven Potential. Hier gilt nun das es gebundene Zustände für $E < 0$ gibt.

Des Weiteren gilt für $r \rightarrow \infty$ geht $V(r) \rightarrow 0$. Daher gilt für $E < 0$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi \propto e^{-\kappa r}$$

mit

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Allerdings ist die Multiplikation mit einem Polynom auch nicht falsch, also scheint der Ansatz $u(r) = g(r)e^{-\kappa r}$ Erfolgsversprechend zu sein. nun gilt

$$\begin{aligned} u(r) &= g(r)e^{-\kappa r} \\ \Rightarrow u'(r) &= g'(r)e^{-\kappa r} - \kappa g(r)e^{-\kappa r} \\ \Rightarrow u''(r) &= g''(r)e^{-\kappa r} - 2\kappa g'(r)e^{-\kappa r} + \kappa^2 g(r)e^{-\kappa r} \end{aligned}$$

Also gilt durch einsetzen in die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} & -u'' - \frac{2me^2}{\hbar^2 r} u + \frac{l(l+1)}{r^2} u = -\kappa^2 u \\ \Rightarrow & -g'' e^{-\kappa r} + 2\kappa g' e^{-\kappa r} - \kappa^2 g e^{-\kappa r} - \frac{2me^2}{\hbar^2 r} g(r)e^{-\kappa r} + \frac{l(l+1)}{r^2} g(r)e^{-\kappa r} = -\kappa^2 g(r)e^{-\kappa r} \\ \Rightarrow & -g'' + 2\kappa g' - \frac{2me^2}{\hbar^2 r} g + \frac{l(l+1)}{r^2} g = 0 \end{aligned}$$

Für die Funktion $g(r)$ gilt nun mit dem Polynomansatz

$$\begin{aligned} g(r) &= r^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k \\ \Rightarrow g'(r) &= \sum_{k=0}^{\infty} (k+l+1) c_k r^{k+l} \\ \Rightarrow g''(r) &= \sum_{k=0}^{\infty} (k+l+1)(k+l) c_k r^{k+l-1} \end{aligned}$$

Nun gilt wiederum durch einsetzen in die Differentialgleichung, mit $c_{-1} = 0$ und Indexverschiebungen

$$\begin{aligned} \sum_{k=-1}^{\infty} \left(-c_{k+1} r^{k+l} (k+l+2)(k+l+1) + 2\kappa c_k r^{k+l} (k+l+1) \right. \\ \left. - \frac{2me^2}{\hbar^2} c_k r^{k+l} + l(l+1)c_{k+1} r^{k+l} \right) = 0 \end{aligned}$$

Da diese Gleichung für alle $0 \leq r < \infty$ gelten soll, müssen die Koeffizienten vor den gleichen Potenzen gleich sein. Also

$$\begin{aligned} c_{k+1} \left(l(l+1) - (k+l+1)(k+l+2) \right) &= \left(\frac{2me^2}{\hbar^2} - 2\kappa(k+l+1) \right) c_k \\ \Rightarrow c_{k+1} &= \frac{\frac{2me^2}{\hbar^2} - 2\kappa(k+l+1)}{l(l+1) - (k+l+1)(k+l+2)} c_k \end{aligned}$$

Wenn man nun unendlich viele Koeffizienten zulassen würde wäre dies eine Exponentialfunktion, die aber schon im Ansatz enthalten ist, deshalb muss die Reihe endlich sein. Hieraus folgt dann die Quantisierungsbedingung.

92. Was ist die Quantisierungsbedingung im Wasserstoffatom für die exponentielle Abklingkonstante κ in der Wellenfunktion. Was folgt daraus für die Energieeigenwerte? Was sind die möglichen Quantenzahlen und was ist die Entartung für jeden Energieeigenwert?

Für die Quantisierungsbedingung macht man den Ansatz eines endlichen Polynoms. Sei nun k der höchste Grad des Polynoms, dann gilt

$$2\kappa(l+k+1) - \frac{2me^2}{\hbar^2} = 0$$

$$\Rightarrow 2\kappa(l+k+1) = \frac{2me^2}{\hbar^2}$$

Also folgt für die Quantisierungsbedingung für κ mit

$$n = l + k + 1$$

$$\Rightarrow \kappa = \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{1}{n}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m}$$

$$= -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Nun gilt mit

$$R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$n = k + l + 1$	E	l	k	Entartung
1	$-R_y$	0	0	1
2	$-\frac{R_y}{4}$	0	1	1
	$-\frac{R_y}{4}$	1	0	3
3	$-\frac{R_y}{9}$	0	2	1
	$-\frac{R_y}{9}$	1	1	3
	$-\frac{R_y}{9}$	2	0	5

Die Entartung der Hauptquantenzahl ist somit

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (11)$$

93. **Was ist ein Rydberg R_y und was ist der Bohrsche Radius a_0 ? Wie hängen im Allgemeinen in der Quantenmechanik Energie und Lokalisierungs-länge zusammen?**

Ein Rydberg R_y ist definiert als

$$R_y = \frac{m e^4}{2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV}$$

und der Bohrsche Radius a_0 ist

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \approx 0,529 \text{ \AA}$$

Die Lokalisierungsenergie auf die Länge λ_l ist für die Ruhemasse definiert als

$$\begin{aligned} \frac{m c^2}{2} &= \frac{\hbar^2}{2m\lambda_l^2} \\ \lambda_l &= \frac{\hbar}{m c} \\ &= \alpha a_0 \end{aligned}$$

Die Lokalisierungsenergie auf λ_l braucht so viel Energie, das weitere Teilchen erzeugt werden können. Eine Messung auf λ_l genau benötigt Photonen mit der Energie

$$E = \frac{\hbar c}{\lambda_l}$$

die weitere Teilchen erzeugen.

94. **Was ist das asymptotische Verhalten der Wellenfunktionen im Wasserstoffatom für große Distanzen r in Abhängigkeit der Quantenzahlen? Was ist der Erwartungswert $\langle r \rangle$? Was sind die expliziten Ausdrücke der Wellenfunktionen bis zu $n = 2$ für $m = 0$?**

Für große Distanzen r in Abhängigkeit der Quantenzahlen gilt für das Verhalten der Wellenfunktion

$$\psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}}$$

Für den Erwartungswert gilt mithin

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l+1))$$

und die Wellenfunktionen bis $n=2$ für $m=0$ lauten

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ \psi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ \psi_{210} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} \left(\frac{r \cos(\theta)}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \end{aligned}$$

95. **Wie kann man die Lösung für das Wasserstoffatom für Atome mit vielen Elektronen selbstkonsistent verallgemeinern (gemäß Hartree)? Was bleibt gleich und was ändert sich? Erkläre die Verbindung mit dem Periodensystem.**

Diese Methode benutzt ein verbessertes effektives Potential wobei gilt

- a) Es gilt

$$V_0 = -\frac{e^2 Z^2}{r}$$

- b) Finde die Lösung ψ_n und berechne mit ihr die Dichte

$$\rho(r) = \sum_n |\psi_n|^2$$

- c) Setze das neue Potential als

$$V_1 = V_0 + e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr'$$

und beginne bei b) von neuem.

Diese Methode vernachlässigt alle Korrelationen/ Verschränkungen zwischen Teilchen, was eher ein Problem für Bindungen ist. Gleich bleibt bei der Hartree Methode:

- unabhängige Elektronen in neuen selbst konsistenten Orbitalen
- Orbitale haben ebenfalls die Quantenzahlen n, l, m

Unterschiede sind, dass die Energien und Orbitale leicht verändert sind

- keine Entartung mehr für l
- größere Orbitale

Das Periodensystem ist nach den Orbitalen aufgebaut, jedoch wird die 4f Schale erst nach der 6s Schale gefüllt. Die äußeren Schalen bestimmen das chemische Verhalten.

13 Elektromagnetische Felder in der Quantenmechanik

96. Was versteht man unter der Feinstrukturkonstante und der Comptonwellenlänge? Was ist die physikalische Bedeutung der Comptonwellenlänge?

Die Feinstrukturkonstante ist die elektromagnetische Kopplungskonstante. Das bedeutet, sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Austauschteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung, ein Photon, an ein elektrisch geladenes Elementarteilchen, zum Beispiel ein Elektron, koppelt. Damit bestimmt die Feinstrukturkonstante die Rate für physikalische Prozesse wie die Lichtemission und die Stärke der abstoßenden oder anziehenden Kräfte zwischen elektrisch geladenen Teilchen. Für die Feinstrukturkonstante gilt in SI Einheiten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c \hbar}$$

Die Compton-Wellenlänge ist für ein Teilchen mit Masse m eine charakteristische Größe. Sie gibt die Zunahme der Wellenlänge des rechtwinklig an ihm gestreuten Photons an. Die Compton-Wellenlänge eines Teilchens der Masse m beträgt

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$$

Die Lokalisierung auf λ_c genau braucht so viel Energie, dass weitere Teilchen erzeugt werden können. Eine Messung auf λ_c genau, benötigt Photonen mit der Energie $\frac{\hbar c}{\lambda_c}$, die weitere Teilchen erzeugen.

97. Beschreibe wie in der klassischen Mechanik die Dynamik eines Teilchens mit den elektromagnetischen Potentialen beschrieben wird (Lagrange und Hamilton Formalismus). Was ist demnach der analoge quantenmechanische Hamiltonoperator? Was ist der Unterschied zwischen dem kinetischen und dem konjugierten Impuls?

In der klassischen Mechanik werden Elektrische Felder beschrieben durch

$$V(r) = q \varphi(r)$$

Magnetische Felder werden durch ein Vektorpotential \vec{A} beschrieben

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}$$

Im Lagrange-Formalismus gilt nun

$$\begin{aligned} L &= T - V \\ &= \frac{m}{2} \vec{v}^2 - q\varphi(r) + \frac{q}{c} \vec{v} \cdot \vec{A} \\ \vec{p} &= \nabla_{\vec{v}} L \\ &= m \vec{v} + \frac{q}{c} \vec{A} \end{aligned}$$

Im Hamilton Formalismus gilt nun

$$\begin{aligned}
 H(\vec{p}, \vec{r}) &= \vec{p} \vec{v} - L \\
 &= m \vec{v}^2 + \frac{q}{c} \vec{v} \vec{A} - \frac{m}{2} \vec{v}^2 + q\varphi(r) - \frac{q}{c} \vec{v} \vec{A} \\
 &= \frac{m}{2} \vec{v}^2 + q\varphi(r) \\
 &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2 + q\varphi(r)
 \end{aligned}$$

Der kinetische Impuls ist

$$p_{kin} = m \vec{v}$$

und der kanonische/ konjugierten Impuls ist

$$\begin{aligned}
 \vec{p} &= m \vec{v} + \frac{q}{c} \vec{A} \\
 &= p_{kin} + \frac{q}{c} \vec{A}
 \end{aligned}$$

Also gilt für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{(\vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} + V(X)$$

98. **Was macht eine Eichtransformation des Vektorpotentials in der Quantenmechanik? Kann dies die Lösung der Schrödingergleichung (Energieeigenwerte bzw. Wellenfunktionen) beeinflussen? Was passiert mit dem kinetischen Impuls?**

Der Hamiltonoperator hängt von \vec{A} ab, und somit ist dieser auch von der Eichung abhängig. Die Lösung hängt nun auch von der Eichung ab, aber die physikalischen Observablen (also z.B. Energieeigenwerte bzw. Wellenfunktionen) sind von der Eichung unabhängig.

Der kinetische Impuls

$$\langle m \vec{v} \rangle = \langle \vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A} \rangle$$

ist für alle Eichungen gleich, aber der kanonische Impuls

$$\langle \vec{P} \rangle$$

hängt von der Eichung ab.

99. Was ist das Vektorpotential für ein konstantes Magnetfeld in z-Richtung in der zirkulären und in der Landau Eichung? Leite den Hamiltonoperator für ein geladenes Teilchen in der zirkulären Eichung als Funktion von Orts-, Impuls- und Drehimpulsoperatoren her.

Für die zirkuläre Eichung gilt

$$\begin{aligned}\vec{A} &= -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B} \\ &= -\frac{B_z}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Für die Landau-Eichung sind mögliche Vektorpotentiale

$$\begin{aligned}\vec{A} &= -B_z \begin{pmatrix} 0 \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \\ \vec{A} &= -B_z \begin{pmatrix} -y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Für den Hamiltonoperator gilt

$$\begin{aligned}H &= \frac{(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A})^2}{2m} \\ &= \frac{P^2}{2m} - \frac{q}{2mc}(\vec{P}\vec{A} + \vec{A}\vec{P}) + \frac{q^2}{2mc^2}A^2 \\ &= \frac{P^2}{2m} - \frac{q}{2mc}(XP_y - YP_x + P_yX - P_xY)\frac{B_z}{2} + \frac{q^2B_z^2}{8mc^2}(X^2 + Y^2) \\ &= \frac{P^2}{2m} - \frac{q}{2mc}B_z\underbrace{(XP_y - YP_x)}_{=L_z} + \frac{q^2B_z^2}{8mc^2}(X^2 + Y^2) \\ &= \frac{P^2}{2m} - \frac{q}{2mc}B_zL_z + \frac{q^2B_z^2}{8mc^2}(X^2 + Y^2)\end{aligned}$$

100. Was ist der energetisch wichtigste Effekt des Magnetfeldes auf ein geladenes Teilchen? Durch welchen Term im Hamiltonoperator wird dieser Effekt beschrieben?

Der Energetisch wichtigste Effekt des Magnetfeldes auf ein geladenes Teilchen ist die Aufspaltung der entarteten Energien. Der sogenannte orbitale Zeemann Effekt. Dieser Effekt wird durch den Term

$$-\frac{q}{2mc}\vec{L} \cdot \vec{B}$$

beschrieben.

101. **Wie kommt ein magnetischer Dipol in der Quantenmechanik zustande? Was ist das gyromagnetische Verhältnis?**

Ein Dipol bildet sich durch das elektrische Feld und $\vec{L} \cdot \vec{B}$ sorgt dafür, dass sich Dipole/ Drehimpulse zum Magnetfeld ausrichten. Magnetische Dipole werden in Einheiten des Bohrschen Magnetons gemessen.

Das gyromagnetische Verhältnis g für den Magnetischen Dipol ist

$$g = \frac{q}{2mc}$$

102. **Was ist das Bohrsche Magneton in Elementarkonstanten bzw. ungefähren geeigneten Einheiten?**

Für das Bohrsche Magneton μ_B gilt

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \approx 5,7884 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T}$$

103. **Was versteht man unter dem „orbitalen“ Zeemanneffekt für geladene Teilchen in rotationsinvarianten Systemen mit einem Magnetfeld? Welche Entartung wird aufgehoben und wie groß ist die Energieaufspaltung? Was passiert mit den ursprünglichen Lösungen?**

Für den Effekt des Dipolterms gilt mit

$$\begin{aligned} H_L &= -\frac{e}{2mc} L_z B_z \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} L_z B_z \end{aligned}$$

Falls nun Lösungen auch Drehimpulszustände sind gilt mit

$$\begin{aligned} H|\psi_{nlm}\rangle &= E_n|\psi_{nlm}\rangle \\ L^2|\psi_{nlm}\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|\psi_{nlm}\rangle \\ L_z|\psi_{nlm}\rangle &= \hbar m|\psi_{nlm}\rangle \end{aligned}$$

Also gilt

$$(H + H_L)|\psi_{nlm}\rangle = (E_n - \mu_B m B_z)|\psi_{nlm}\rangle$$

ist wieder ein Eigenzustand mit der Eigenenergie $E_n - \mu_B m B_z$. Also verursacht der Dipolterm eine Aufspaltung der Energien mit $\mu_B B_z$. Wobei die Entartung für l aufgehoben werden. Die Ursprünglichen Lösungen bleiben erhalten, da es sich hier um einen Separationsansatz handelt.

104. **Beschreibe die Zeitentwicklung in einem Magnetfeld unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung B^2 im Hamiltonoperator. Erkläre den Zusammenhang mit der Rotation bzw. Präzession.**

Es gilt allgemein das

$$e^{i\frac{\vec{P}\cdot\vec{a}}{\hbar}}$$

einer Verschiebung um \vec{a} entspricht.

Und

$$e^{i\frac{\vec{P}\cdot\vec{\theta}}{\hbar}}$$

entspricht einer Drehung um $\vec{\theta}$. Nun gilt mit für die Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{H_L}{\hbar}t} \\ &= e^{i\frac{\mu_B}{\hbar^2}\vec{B}\cdot\vec{L}t}|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-i\frac{\vec{L}\cdot\vec{\theta}}{\hbar}}|\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{\theta} &= \frac{\vec{B}\mu_B}{\hbar}t \\ &= \omega_B t \end{aligned}$$

Also das Magnetfeld verursacht eine Drehung mit konstanter Winkelgeschwindigkeit ω_B , was man als Präzession deuten kann.

105. **Was ist die Larmor Frequenz?**

Die Frequenz beim für den Übergang beim orbitalen Zeemann Effekt wird durch die Übergangsenergie definiert

$$\hbar\omega_B = \mu_B B_z$$

Die Larmor-Frequenz ist dann

$$\omega_B = \frac{e}{2mc}B_z$$

106. **Wie kann man den grundlegenden Effekt der Kern-Spin-Resonanz (NMR) klassisch verstehen? Wie wird er quantenmechanisch erklärt?**

Für die grundlegenden Effekte bei der Kern-Spin-Resonanz gibt es zwei Sichtweisen

- klassisch: Strahlung wird absorbiert, wenn die Dipoldrehung in Resonanz ist.
- quantenmechanisch: Es gibt eine Energieaufspaltung $\mu_B B = \hbar\omega_B$ und somit können Photonen mit der Frequenz ω_B absorbiert werden.

107. **Wie sind die Magnetisierung und die Suszeptibilität mit Hilfe der Freien Energie definiert?**

Es gilt mit der Entropie S

$$F = E - TS \xrightarrow{T \rightarrow 0} E$$

Nun gilt für die Magnetisierung M_z

$$M_z = -\frac{\partial F}{\partial B_z} = -\frac{\partial E}{\partial B_z}$$

und für die Suszeptibilität χ gilt

$$\chi = \frac{\partial M_z}{\partial B_z} = -\frac{\partial^2 F}{\partial B_z^2} = -\frac{\partial^2 E}{\partial B_z^2}$$

108. **Was versteht man unter Paramagnetismus? Wann tritt er auf und welcher Term im Hamiltonoperator für ein geladenes Teilchen ist dafür verantwortlich?**

Paramagnetismus ist eine der Ausprägungsformen des Magnetismus in Materie und es gilt $\chi > 0$: Paramagneten sind nur so lange magnetisch, wie sie in der Nähe eines Magneten sind. Verantwortlich für den Paramagnetismus ist der Term

$$H_L = -\frac{\mu_b}{\hbar} L_z B_z$$

Also gilt für die Magnetisierung

$$\begin{aligned} M_z &= -\left\langle \frac{\partial E}{\partial B_z} \right\rangle \\ &= \frac{\mu_b}{\hbar} \langle L_z \rangle \end{aligned}$$

Also richten sich die Drehimpulse/ Dipole im Feld aus. $\chi > 0$ ist für endliche Temperaturen endlich und heißt Curie Suszeptibilität.

109. **Was versteht man unter Diamagnetismus? Welcher Term im Hamiltonoperator für ein geladenes Teilchen ist dafür verantwortlich?**

Diamagnetismus ist eine der Ausprägungsformen des Magnetismus in Materie und es gilt $\chi < 0$: Diamagnete magnetisieren sich in einem externen Magnetfeld so, dass sich das Magnetfeld in ihrem Innern proportional zur Stärke des angelegten Magnetfelds abschwächt. Für ein System mit $\langle L_z \rangle = 0$ wird der Term

$$H_B = \frac{e^2 B_z^2}{8mc^2} (X^2 + Y^2)$$

wichtig. Es gilt

$$\begin{aligned} M_z &= -\left\langle \frac{\partial E}{\partial B_z} \right\rangle \\ &= -\frac{e^2}{4mc^2} B_z \langle X^2 + Y^2 \rangle \end{aligned}$$

Dies ist die Lenzsche Regel (Magnetisierung entgegen des Feldes). Für die Suszeptibilität gilt

$$\chi = \frac{\partial M_z}{\partial B_z} = -\frac{e^2}{4mc^2} \langle X^2 + Y^2 \rangle < 0$$

Der Larmor Diamagnetismus wird von allen Elektronen in den inneren Schalen verursacht.

110. **Keine Frage zu dieser Nummer ;).**

111. **Erkläre den Aharonov-Bohm-Effekt.**

Beim Aharonov-Bohm-Effekt laufen geladene Teilchen (Elektronen) auf verschiedenen Seiten an einem Zylinder vorbei, in dem ein Magnetfeld B herrscht. Der Zylinder ist von einer Wand umgeben, die von den Teilchen nicht durchdrungen werden kann; außerhalb ist das Magnetfeld Null. Trotzdem hängt der Ausgang des Experiments davon ab, ob das Magnetfeld ein- oder ausgeschaltet ist, denn das Vektorpotential A ist im ersten Fall auch außerhalb des Zylinders vorhanden. Man stelle sich hierbei ein radial verlaufendes Vektorpotential vor. Dessen Rotation $\text{rot } A$ und damit das Magnetfeld B ist außerhalb des Zylinders Null, dennoch ist A nirgends Null.

14 Paulimatrizen

112. Was sind die Spin- $\frac{1}{2}$ Drehimpulsmatrizen \vec{S} ? Was sind die Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$?

Für ein Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen gilt

$$s = \frac{1}{2}$$

$$m = \pm \frac{1}{2}$$

Mit den schon bekannten Regeln für S_x, S_y, S_z gilt

$$S_x = \frac{S^+ + S^-}{2}$$

$$S_y = \frac{S^+ - S^-}{2i}$$

$$S_z |s, m\rangle = m |s, m\rangle$$

gilt

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für die 4 Pauli Matrizen gilt:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Also gilt für die Spin $\frac{1}{2}$ Drehimpulsmatrizen

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

113. Welche Kommutator- und Antikommutatorregeln gelten für die Pauli-Matrizen?

Offensichtlich gilt für die Paulimatrizen

$$\sigma_\alpha^2 = I$$

Also gilt für den Kommutator und Antikommutator

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} = \sigma_\alpha\sigma_\beta + \sigma_\beta\sigma_\alpha$$

$$= \begin{cases} 2\delta_{\alpha\beta}I, & \text{für } \alpha, \beta = x, y, z \\ 2\sigma_\alpha, & \text{für } \beta = 0 \end{cases}$$

114. Was ist die mathematische Formulierung für die Aussage, dass die Pauli Matrizen linear unabhängig sind?

Es gilt

$$\sum_{\alpha=0,x,y,z} c_{\alpha} \sigma_{\alpha} = 0 \quad \Rightarrow c_{\alpha} = 0$$

also sind die 4 Pauli Matrizen linear unabhängig.

115. Was ist die Spur von allgemeinen bilinearen Produkten der Pauli-Matrizen $\sigma_i \sigma_j$?

Es gilt

$$\text{tr}(\sigma_{\alpha} \sigma_{\beta}) = 2\delta_{\alpha\beta}$$

116. Argumentiere, dass jeder bilineare Ausdruck von Pauli-matrizen wieder auf einen linearen Ausdruck (inklusive Identität) zurückgeführt werden kann. Gebe eine entsprechende mathematische Formel an.

Jede quadratische (bilineare Form) von Matrizen kann wieder als lineare Überlagerung geschrieben werden. So gilt zum Beispiel

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= \underbrace{\frac{\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x}{2}}_{=i\sigma_z} + \underbrace{\frac{\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x}{2}}_{=0} \\ &= i\sigma_z \end{aligned}$$

nun gilt mit $\vec{a} \cdot \vec{\sigma}$ und $\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ als beliebiger Überlagerung von $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

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

117. Zeige, dass eine Drehung eines Spin- $\frac{1}{2}$ Drehimpulses durch eine einfache lineare Form in Paulimatrizen angegeben werden kann.

Allgemein gilt

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^n = \begin{cases} |\vec{a}|^n I, & \text{für } n \text{ gerade} \\ (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^{n-1} (\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) = a^{n-1} (\vec{a} \cdot \vec{\sigma}), & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

Also gilt

$$\begin{aligned} e^{i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^n}{n!} \\ &= I \sum_{n \text{ gerade}} \frac{(ia)^n}{n!} + i(\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \sum_{n \text{ ungerade}} \frac{(ia)^{n-1}}{n!} \\ &= I \cos(a) + i(\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \sin(a) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}\vec{\omega} &= \omega \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\varphi) \\ \sin(\theta)\sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \vec{\omega} \cdot \vec{S} &= \frac{\hbar}{2} \vec{\omega} \cdot \vec{\sigma} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_z & \omega_x - i\omega_y \\ \omega_x + i\omega_y & -\omega_z \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) e^{-i\varphi} \\ \sin(\theta) e^{i\varphi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Also gilt für die Drehung eines Spin- $\frac{1}{2}$ Drehimpulses

$$e^{i\frac{\vec{S} \cdot \vec{\omega}}{\hbar}} = I \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) + i \vec{\omega} \cdot \vec{\sigma} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right)$$

118. **Wie ist der Eigenzustand für einen Spin in eine beliebige Richtung definiert? Argumentiere, dass jedem beliebigen Spin- $\frac{1}{2}$ Zustand eine eindeutige Richtung zugewiesen werden kann.**

$\vec{\omega} \cdot \vec{S}$ definiert Eigenzustände mit

$$\begin{aligned}\vec{\omega} \cdot \vec{S} |\omega+\rangle &= \frac{\omega\hbar}{2} |\omega+\rangle \\ \vec{\omega} \cdot \vec{S} |\omega-\rangle &= -\frac{\omega\hbar}{2} |\omega-\rangle\end{aligned}$$

Diese werden von der Drehung nicht beeinflusst, also sind dies Spin Zustände der Richtung $\vec{\omega}$

$$\begin{aligned}|\omega+\rangle &= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \\ |\omega-\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Ein allgemeiner Spin Zustand $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ kann mit θ , φ , Betrag sowie Phase beschrieben werden. Da nun die beiden Eigenvektoren orthogonal sind kann jedem Spin- $\frac{1}{2}$ Zustand eindeutig eine Richtung zugewiesen werden.

119. **Was ist das gyromagnetische Verhältnis für den Elektronenspin?**
Mit Magnetfeld gilt, dass der Term

$$H = -\vec{\mu} \vec{B}$$

existiert. Nun gilt

$$\vec{\mu} = \frac{g e}{2m c} \vec{S}$$

wobei g das gyromagnetische Verhältnis für den Elektronenspin ist, mit

$$g = 2 + \frac{\alpha}{\pi} + \dots \approx 2,0023\dots$$

15 Die WKB-Methode

120. Was versteht man unter der WKB-Näherung? Erläutere kurz das Vorgehen zur approximativen Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung.

Aus der Schrödinger-Gleichung

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

gilt mit

$$P(x) = \sqrt{2M(E - V(x))}$$

$$\Rightarrow \left(\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + P^2(x) \right) \psi(x) = 0$$

Mit dem Eikonal S , dass die Dimension der Wirkung hat folgt mit folgendem Ansatz

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \\ \Rightarrow \psi'(x) &= \frac{i}{\hbar} S'(x) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \\ \Rightarrow \psi''(x) &= \left(\frac{i}{\hbar} S''(x) - \frac{1}{\hbar^2} (S'(x))^2 \right) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \\ \Rightarrow 0 &= i\hbar S''(x) - (S'(x))^2 + P^2(x) \end{aligned}$$

Jetzt besteht das Ziel darin eine Lösung für das Eikonal zu finden. Hierzu entwickelt man $S(x)$ in eine Taylorreihe in \hbar

$$\begin{aligned} S(x) &= S_0(x) + i\hbar S_1(x) + O(\hbar^2) \\ \Rightarrow 0 &= i\hbar \left(S_0''(x) + \underbrace{i\hbar S_1''(x)}_{\in O(\hbar^2)} + O(\hbar^2) \right) - \left((S_0'(x))^2 + 2i\hbar S_0'(x) S_1'(x) + O(\hbar^2) \right) + P^2(x) \end{aligned}$$

Nun gilt für \hbar^0

$$\begin{aligned} (S_0'(x))^2 &= P(x)^2 \\ \Rightarrow S_0'(x) &= \pm P(x) \\ \Rightarrow S_0(x) &= \pm \int_{x_0}^x P(y) dy \end{aligned}$$

und für \hbar^1 gilt

$$\begin{aligned} i\hbar S_0''(x) &= 2i\hbar S_0'(x) S_1'(x) \\ \Rightarrow S_1'(x) &= \frac{S_0''(x)}{2S_0'(x)} = \frac{d}{dx} \frac{1}{2} \ln |S_0'(x)| = \frac{d}{dx} \ln \sqrt{P(x)} \\ \Rightarrow S_1(x) &= \ln \sqrt{P(x)} + c \end{aligned}$$

Also gilt für das Eikonal S

$$S(x) = \pm \int_{x_0}^x P(y) dy + i\hbar \left(\ln \frac{1}{\sqrt{P(x)}} + c \right)$$

$$\Rightarrow \psi_{\pm}(x) = \frac{A}{\sqrt{P(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x P(y) dy\right)$$

Also gilt durch das Superpositionsprinzip

$$\psi(x) = \frac{A_+}{\sqrt{P(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x P(y) dy\right) + \frac{A_-}{\sqrt{P(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x P(y) dy\right)$$

121. **Wie lautet die WKB-Bedingung zur Gültigkeit der WKB-Näherung? Gebe eine anschauliche physikalische Erklärung dafür an.**

Die WKB-Bedingung lautet

$$|\hbar S_0''(x)| \ll |S_0'(x)|^2 \Rightarrow |\hbar P'(x)| \ll P^2(x)$$

Wenn man nun den klassischen Impuls $P(x)$ als Funktion der de Broglie Wellenlänge schreibt gilt

$$\lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)} = \frac{2\pi\hbar}{P(x)}$$

$$\Rightarrow \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| = \left| \frac{2\pi\hbar P'(x)}{P^2(x)} \right|$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1$$

Also macht die WKB-Näherung nur Sinn für räumlich langsam veränderliche Potentiale $V(x)$.

122. **Wie lautet die WKB-Wellenfunktion. Welche physikalischen Fälle müssen unterschieden werden?**

Die Wellenfunktion lautet

$$\psi(x) = \frac{A_+}{\sqrt{P(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x P(y) dy\right) + \frac{A_-}{\sqrt{P(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x P(y) dy\right)$$

Nun muss man zwischen 3 Fällen unterscheiden

$V(x) < E:$	klassisch erlaubt, $P(x)$ ist reell \Rightarrow räumlich Oszillierende WKB-Wellenfunktion \Rightarrow Bohr-Sommerfeld-Quantisierung
$V(x) > E:$	klassisch verboten, $P(x) = i\sqrt{2M(V(x) - E)}$ ist rein imaginär \Rightarrow räumlich exponentiell abnehmende WKB-Wellenfunktion \Rightarrow Tunneleffekt
$V(x) \approx E:$	klassische Umkehrpunkte $\Rightarrow P(x) \approx 0$ \Rightarrow WKB-Methode bricht zusammen

123. **Erläutere, wie sich die Tunnelamplitude aus der WKB-Näherung ergibt.**
 Die WKB-Methode ist anwendbar für schwach veränderliche Potentiale. Nun gilt mit

$$\begin{aligned}
 P(x) &= i \underbrace{\sqrt{2M(V(x) - E)}}_{=q(x)} \\
 \Rightarrow \psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{q(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy\right) \\
 &\approx \frac{A}{\sqrt{q(x_0)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy\right) \\
 \psi(x_0) &= \frac{A}{\sqrt{q(x_0)}} \\
 \Rightarrow \psi(x_e) &= \psi(x_0) e^{-\frac{\gamma(x_e)}{2}}
 \end{aligned}$$

mit

$$\gamma(x_e) = \frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_e} q(y) dy$$

Die Mittlere Lebensdauer im Kasten lässt sich semiklassisch berechnen. Die klassische kinetische Energie ist

$$\begin{aligned}
 T &= E - V(x) = E + V_0 = \frac{M}{2} v^2 \\
 \Rightarrow v &= \frac{\sqrt{2M(E + V_0)}}{M} = \frac{2x_0}{T_{per}}
 \end{aligned}$$

Die Frequenz ist mithin

$$f = \frac{1}{T_{per}} = \frac{\sqrt{2M(E + V_0)}}{2M x_0}$$

Bei jedem Anlaufen gegen die Potentialbarriere tunnelt das Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit von $e^{-\gamma(x_e)}$ hinaus. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen pro Sekunde entkommt ist demnach

$$R = f e^{-\gamma(x_e)} = \frac{\sqrt{2M(E + V_0)}}{2M x_0} e^{-\gamma(x_e)}$$

und die mittlere Lebensdauer ist

$$\tau = \frac{1}{R}$$

124. **Wie lautet die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung? Zeige, dass sich daraus die exakten Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators ergeben.**

Die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung lautet

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

Für den Harmonischen Oszillator gilt:

$$\begin{aligned} p(x) &= \sqrt{2mE \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right)} \\ &= \sqrt{2mE \left(1 - \frac{m\omega^2}{2E} x^2 \right)} \end{aligned}$$

Die Umkehrpunkte sind also

$$\begin{aligned} x_{1/2} &= \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \\ \Rightarrow \oint p(x) dx &= 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2mE \left(1 - \frac{m\omega^2}{2E} x^2 \right)} dx & dx &= d\theta \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \\ &= 2 \int_{-1}^1 \sqrt{2mE \frac{2E}{m\omega^2} (1 - \theta^2)} d\theta \\ &= \frac{2E}{\omega} \pi \\ \Rightarrow \oint p(x) dx &= \frac{2E}{\omega} \pi = \left(N + \frac{1}{2} \right) 2\pi\hbar \\ \Rightarrow E &= \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \end{aligned}$$

16 Addition von Drehimpulsen

125. Was versteht man unter der Addition von Drehimpulsen? Wann ist dieses Konzept wichtig? Beschreibe, welche Quantenzahlen in der Gesamtspinbasis und in der Basis von Produktzuständen der einzelnen Spins benutzt werden.

Unter Addition von Drehimpulsen versteht man das vektorielle addieren zweier Drehimpulse z.B.

$$\begin{aligned}\vec{S} + \vec{L} \\ \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \\ \vec{S}_1 + \vec{S}_2\end{aligned}$$

Wichtig ist dieses Konzept bei zwei unabhängigen Drehimpulsen, die allerdings beide für das System wichtig sind. So gilt zum Beispiel für

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

mit

$$\begin{aligned}[L_1^j, L_2^k] &= 0 \\ \Rightarrow [J^x, J^y] &= [L_1^x + L_2^x, L_1^y + L_2^y] \\ &= \overbrace{[L_1^x, L_2^y]}^{=0} + \overbrace{[L_2^x, L_1^y]}^{=0} \\ &\quad + \underbrace{[L_1^x, L_1^y]}_{=i\hbar L_1^z} + \underbrace{[L_2^x, L_2^y]}_{=i\hbar L_2^z} \\ &= i\hbar L_1^z + i\hbar L_2^z \\ &= i\hbar J^z\end{aligned}$$

Nun gibt es zwei mögliche Basen. Die erste wird über die Quantenzahlen der Gesamtspinbasis beschrieben mit

$$j \qquad \text{und} \qquad -j \leq m \leq j$$

oder die zweite Möglichkeit ist die Beschreibung über die einzelnen Drehimpulse in der Produktbasis

$$\begin{aligned}l_1 \qquad \text{und} \qquad -l_1 \leq m_1 \leq l_1 \\ l_2 \qquad \text{und} \qquad -l_2 \leq m_2 \leq l_2 \\ |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle\end{aligned}$$

126. **Leite die Gesamtspinbasis von zwei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen als Überlagerung der Produktzustände der einzelnen Teilchen her.**

für das Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen gilt $l_1 = l_2 = \frac{1}{2}$, also gilt für die Basis

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |\uparrow\uparrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |\uparrow\downarrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |\downarrow\uparrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Nun gilt für den Fall des Zustandes mit dem Maximalem Drehimpuls in z-Richtung ("höchster Zustand")

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |j = m, m = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rangle = |1, 1\rangle$$

Daher gilt nun

$$\begin{aligned} J^2|1, 1\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|1, 1\rangle \\ &= 2\hbar^2|1, 1\rangle \\ J^z|1, 1\rangle &= \hbar|1, 1\rangle \end{aligned}$$

Um die anderen Zustände auch zu benutzen, benutze den Absteige Drehimpulsoperator

$$J^- = L_1^- + L_2^-$$

mit

$$\begin{aligned} L_1^-|\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar|\downarrow\uparrow\rangle \\ L_2^-|\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar|\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

gilt nun

$$\begin{aligned} J^-|1, 1\rangle &= (L_1^- + L_2^-)|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \hbar(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \end{aligned}$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} J^-|1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|1, 0\rangle \\ &= \sqrt{2}\hbar|1, 0\rangle \end{aligned}$$

Also gilt

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

analog folgt

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Also gibt es drei Zustände mit dem Gesamtdrehimpuls $J = 1$ ($m = 1, 0, -1$).
Allerdings fehlt noch ein der Zustand

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Also gilt, dass es 4 Gesamtdrehimpulszustände geben muss mit

$j = 1$, triplet	$ 1, 1\rangle = \uparrow\uparrow\rangle$
	$ 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$
	$ 1, -1\rangle = \downarrow\downarrow\rangle$
$j = 0$, singulett	$ 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$

127. Was sind Clebsch-Gordan Koeffizienten und die Clebsch-Gordan Zerlegung?

Die Zerlegung

$$|j, m\rangle = \sum_{l_1, l_2, m_1, m_2} \alpha_{l_1, l_2, m_1, m_2} |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle$$

heißt Clebsch-Gordan Zerlegung, wobei

$$\alpha_{l_1, l_2, m_1, m_2} = \langle l_1, m_1; l_2, m_2 | j, m \rangle$$

die Clebsch-Gordan Koeffizienten sind.

Es gilt

$$\langle l_1, m_1; l_2, m_2 | j, m \rangle \neq 0$$

solange

$$m = m_1 + m_2$$

$$|l_1 - l_2| \leq j \leq l_1 + l_2$$

128. **Beschreibe wie man im Allgemeinen die Clebsch-Gordan Koeffizienten bei der Addition von zwei Drehimpulsen l_1 und l_2 bestimmen kann.**

Allgemein bestimmt man die Clebsch-Gordan Koeffizienten wie folgt

- a) Finde den Zustand mit dem größten Drehimpuls.

$$|j, m = j\rangle = |l_1, m_1 = l_1; l_2, m_2 = l_2\rangle$$

mit $j = m = l_1 + l_2$

- b) Benutze nun

$$J^- = L_1^- + L_2^-$$

mit

$$J^- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$$

$$L_1^- |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle = \hbar \sqrt{l_1(l_1+1) - m_1(m_1-1)} |l_1, m_1-1; l_2, m_2\rangle$$

$$L_2^- |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle = \hbar \sqrt{l_2(l_2+1) - m_2(m_2-1)} |l_1, m_1; l_2, m_2-1\rangle$$

Hieraus folgen dann alle Zustände

$$|j, j-1\rangle$$

$$|j, j-2\rangle$$

$$\vdots$$

$$|j, -j\rangle$$

Dies sind alle Linearkombinationen von $|l_1, m_1; l_2, m_2\rangle$ und somit sind alle Zustände mit $j = l_1 + l_2$ bekannt.

- c) Für den Zustand mit $j = l_1 + l_2 - 1$ benutzt man nun die Orthogonalität. Der Zustand $|j = l_1 + l_2, m = l_1 + l_2 - 1\rangle$ ist schon bekannt und orthogonal zu

$$|j = l_1 + l_2 - 1, m = l_1 + l_2 - 1\rangle$$

Dies gibt eine eindeutige Linearkombination in der Einzeldrehimpulsbasis.

- d) Finde nun die restlichen Zustände mit $j = l_1 + l_2 - 1$ durch anwenden von J^-, L_1^-, L_2^- .

- e) Gehe zurück zu c) mit $j = l_1 + l_2 - 2$, usw.

Dieses vorgehen ergibt folgendes Schema

$(l_1 + l_2)$	$(l_1 + l_2 - 1)$	\cdots	$ l_1 - l_2 $
$ j = l_1 + l_2, m = j\rangle$			
$ l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$		
\vdots	\vdots	\ddots	
$ l_1 + l_2, -l_1 - l_2\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, -l_1 - l_2 + 1\rangle$	\cdots	\cdots

17 Die Variationsmethode

129. **Zeige, dass der Erwartungswert der Energie immer größer oder gleich der Grundzustandsenergie ist. Was ist die allgemeine Vorgehensweise bei der Variationsmethode?**

Es gilt

$$\begin{aligned}\langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_n E_n |\langle E_n|\psi\rangle|^2 \\ &\geq E_0 \sum_n \langle\psi|E_n\rangle \langle E_n|\psi\rangle \\ &= E_0 \langle\psi|\psi\rangle\end{aligned}$$

Die allgemeine Vorgehensweise bei der Variationsmethode ist zuerst der Ansatz einer geraden Wellenfunktion

$$\psi_{\alpha,\beta,\gamma,\dots}(x)$$

die von $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ abhängig sein kann. Dann gilt aber auch

$$E(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \frac{\langle\psi_{\alpha,\beta,\gamma,\dots}(x)|H|\psi_{\alpha,\beta,\gamma,\dots}(x)\rangle}{\langle\psi_{\alpha,\beta,\gamma,\dots}(x)|\psi_{\alpha,\beta,\gamma,\dots}(x)\rangle} \geq E_0$$

Minimiere nun $E(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$, und dann ist

$$E_{min} = E(\alpha_{min}, \beta_{min}, \gamma_{min}, \dots)$$

im besten Fall die Grundzustandsenergie.

130. **Zeige, dass eine kleine Abweichung in einem Energieeigenzustand nur zu einer quadratisch kleinen Korrektur im Erwartungswert der Energie führt.**

Falls man gut geraten hat gilt

$$|\psi_{\alpha_{min}}\rangle = |\psi_0\rangle + \varepsilon|\psi_{\perp}\rangle$$

wobei $|\psi_{\perp}\rangle$ eine Überlagerung von Anregungszuständen mit

$$\langle\psi_{\perp}|\psi_0\rangle = 0$$

Nun gilt also für E_{min}

$$\begin{aligned} E_{min} &= \frac{\langle\psi_{\alpha_{min}}|H|\psi_{\alpha_{min}}\rangle}{\langle\psi_{\alpha_{min}}|\psi_{\alpha_{min}}\rangle} \\ &= \frac{\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle + \varepsilon\overbrace{\langle\psi_0|H|\psi_{\perp}\rangle}^{=0} + \varepsilon\overbrace{\langle\psi_{\perp}|H|\psi_0\rangle}^{=0} + \varepsilon^2\langle\psi_{\perp}|H|\psi_{\perp}\rangle}{\langle\psi_0|\psi_0\rangle + \varepsilon^2\langle\psi_{\perp}|\psi_{\perp}\rangle} \\ &= \frac{E_0\langle\psi_0|\psi_0\rangle + \varepsilon^2\langle\psi_{\perp}|H|\psi_{\perp}\rangle}{\langle\psi_0|\psi_0\rangle + \varepsilon^2\langle\psi_{\perp}|\psi_{\perp}\rangle} \\ &\approx E_0 + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Also führt eine kleine Abweichung in der Wellenfunktion zu einer quadratisch kleinen Abweichung in der Energie.

18 Störungstheorie

131. **Welche Entwicklung der Zustände und Energien wird bei der Herleitung der stationären Störungstheorie angenommen. Wie werden die Koeffizienten allgemein bestimmt?**

Bei der Störungstheorie wird angenommen, dass die Wellenfunktion als auch die Eigenfunktionen in eine Taylorreihe entwickelbar sind. Mit

$$H = H^0 + \lambda H'$$

Die Idee ist nun die Lösung von H in λ um die bekannte Lösung von H^0 mit

$$H^0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

in eine Taylorreihe zu entwickeln. Wobei gelten soll

$$\begin{aligned} H |\psi_n\rangle &= E_n |\psi_n\rangle \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle &= \delta_{nm} \\ \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle &= 0 \\ \langle \psi_n^{(2)} | \psi_n^{(0)} \rangle &= 0 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Die nun zu lösende Eigenwertgleichung ist

$$\begin{aligned} &(H^0 + \lambda H') \left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \\ &= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

geordnet nach Potenzen von λ lautet dies

$$\begin{aligned} &H^0 |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \left(H^0 |\psi_n^{(1)}\rangle + H' |\psi_n^{(0)}\rangle \right) + \lambda^2 \left(H^0 |\psi_n^{(2)}\rangle + H' |\psi_n^{(1)}\rangle \right) + \dots \\ &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \left(E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \right) + \lambda^2 \left(E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \right) + \dots \end{aligned}$$

Diese Gleichung soll nun für alle λ erfüllt sein und somit müssen die Koeffizienten jeder Potenz von λ an sich schon null ergeben. Über diese Beziehung werden dann die Koeffizienten allgemein bestimmt.

132. **Leite die Formeln für die Energie in der (nicht-entarteten) stationären Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung her. Was ist die Korrektur des Zustands in der ersten Ordnung?**

Für λ^1 gilt die Gleichung

$$H^0|\psi_n^{(1)}\rangle + H'|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (12)$$

Durch die Multiplikation mit $\langle\psi_n^{(0)}|$ von rechts folgt

$$\begin{aligned} \langle\psi_n^{(0)}|H^0|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ E_n^{(0)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=0} + \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=0} + E_n^{(1)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1} \\ \Rightarrow E_n^{(1)} &= \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Um nun die Korrektur des ersten Zustandes zu bekommen benutzt man Gleichung (12) um eine Basisentwicklung von

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle |\psi_m^{(0)}\rangle$$

zu machen. Insbesondere gilt, dass der Term $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ berechnet werden muss. Durch Multiplikation mit $\langle\psi_m^{(0)}|$ auf beiden Seiten von (12) folgt

$$\begin{aligned} \langle\psi_m^{(0)}|H^0|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Da die Entwicklung über alle $m \neq n$ geht gilt

$$\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$$

also gilt

$$\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{\langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Also gilt für die Korrektur des Zustands erster Ordnung

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (13)$$

Für den Energie zweiter Ordnung gilt nun über die gleiche Vorgehensweise wie bei der Energie erster Ordnung wenn man die Gleichung für λ^2 betrachtet

$$H^0|\psi_n^{(2)}\rangle + H'|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Durch Multiplikation mit $\langle \psi_n^{(0)} |$ von rechts folgt wiederum

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{(0)} | H^0 | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(1)} \rangle &= E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle \\ E_n^{(0)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle}_{=0} + \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(1)} \rangle &= E_n^{(0)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle}_{=0} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{=0} + E_n^{(2)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=1} \end{aligned}$$

Also gilt mit Gleichung (13) für die Energie 2. Ordnung

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(1)} \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_m^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned}$$

133. **Was muss bei der entarteten Störungstheorie beachtet werden? Argumentiere, dass im entarteten Fall das Problem mit Hilfe eines effektiven Hamiltonoperators im entarteten Hilbertraum beschrieben werden muss.**

Der interessierte Leser beantwortet sich diese Frage selbst.