Technische Universität München **Sommersemester 2005**

Diplomvorprüfung Theoretische Physik 3: QUANTENMECHANIK

Dienstag, 06.09.2005 10:00 – 11:30 **LÖSUNGEN**

1. (a) Alle außer $\hat{x}\hat{p}$ sind Hermitesch.

   (b) Für beliebige Basiszustände $|\psi_m\rangle$ und $|\psi_n\rangle$, $n > 1$, ist

$$\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle = \sqrt{n-1}\,\delta_{m,n-1}$$

und

$$\langle\psi_n|\hat{B}^\dagger|\psi_m\rangle = \sqrt{m}\,\delta_{m+1,n} = \sqrt{n-1}\,\delta_{m,n-1}\ .$$

Da die Matrixelemente reell sind, gilt $\langle\psi_n|\hat{B}^\dagger|\psi_m\rangle = \langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle^*$ für alle $n > 1$. Für $n = 1$ gilt dies auch, da auf beiden Seiten der Gleichung Null steht. Wenn für alle Basiszustände gilt: $\langle\psi_n|\hat{B}^\dagger|\psi_m\rangle = \langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle^*$, dann gilt für beliebige Linearkombinationen $|\psi\rangle$, $|\psi'\rangle$ entsprechend $\langle\psi|\hat{B}^\dagger|\psi'\rangle = \langle\psi'|\hat{B}|\psi\rangle^*$. Damit erfüllt $\hat{B}^\dagger$ die definierende Gleichung für Hermitesch konjugierte Operatoren.
Für alle $n \geq 1$ gilt

$$\hat{B}\hat{B}^\dagger|\psi_n\rangle = \hat{B}\sqrt{n}|\psi_{n+1}\rangle = \sqrt{n}\hat{B}|\psi_{n+1}\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle\ ;$$

die Eigenzustände von $\hat{B}\hat{B}^\dagger$ sind gerade die Zustände der anfangs angegebenen Basis, und der Eigenwert zu $|\psi_n\rangle$ ist n.

   (c) Sei $|\psi_n\rangle$, $n = 1, 2, \ldots$ eine gemeinsame Basis von Eigenzuständen, $\hat{A}|\psi_n\rangle = \alpha_n|\psi_n\rangle$, $\quad \hat{B}|\psi_n\rangle = \beta_n|\psi_n\rangle$.
Für einen gegebenen Basiszustand gilt

$$\begin{aligned}(\hat{A}+\hat{B})|\psi_n\rangle &= (\alpha_n+\beta_n)|\psi_n\rangle \Longrightarrow \sin(\hat{A}+\hat{B})|\psi_n\rangle = \sin(\alpha_n+\beta_n)|\psi_n\rangle \\ &= [\sin(\alpha_n)\cos(\beta_n)+\cos(\alpha_n)\sin(\beta_n)]|\psi_n\rangle = \Big(\sin(\hat{A})\cos(\hat{B})+\cos(\hat{A})\sin(\hat{B})\Big)\,|\psi_n\rangle.\end{aligned}$$

Damit gilt $\sin(\hat{A}+\hat{B})|\psi_n\rangle = \Big(\sin(\hat{A})\cos(\hat{B})+\cos(\hat{A})\sin(\hat{A})\Big)\,|\psi_n\rangle$ für alle Basiszustände und somit für alle Zustände im Hilbertraum, d.h., $\sin(\hat{A}+\hat{B}) = \sin(\hat{A})\cos(\hat{B})+\cos(\hat{A})\sin(\hat{B})$.

2. (a) Wir schreiben

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \ , \quad \hat{H}_1 = \frac{(\hat{p}_1)^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2(x_1)^2 \ , \quad \hat{H}_2 = \frac{(\hat{p}_2)^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2(x_2)^2 \ .$$

Eigenfunktionen von $\hat{H}_1$ und $\hat{H}_2$ sind die Oszillator-Eigenfunktionen ψ_n,

$$\hat{H}_1\psi_{n_1}(x_1) = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,\psi_{n_1}(x_1) \ , \quad \hat{H}_2\psi_{n_2}(x_2) = \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,\psi_{n_1}(x_2) \ ,$$

$n_1 = 0,\ 1,\ 2, \ldots, \qquad n_2 = 0,\ 1,\ 2, \ldots.$
Eigenfunktionen von $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ sind die Produktwellenfunktionen $\Psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$,

$$\begin{aligned} & \hat{H}\Psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2) = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega\Psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2) \\ = \; & (N + 1)\hbar\omega\Psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2) \ , \quad N = n_1 + n_2 = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots . \end{aligned}$$

Zu jedem Wert von $N = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ kann etwa n_1 die $N+1$ Werte $0,\ 1,\ 2,\ \ldots N$ annehmen, und n_2 muss dann $N - n_1$ sein, der Eigenwert $E_N = (N + 1)\hbar\omega$ ist also $(N+1)$-fach entartet.

(b) Nun gibt es zu jeder Einteilchenwellenfunktion ψ_n noch zwei mögliche Spinzustände, die durch die Quantenzahl $m_s = \pm\frac{1}{2}$ gekennzeichnet sind. Zu jedem Paar (n_1, n_2) der Ortsquantenzahlen gibt es vier linear unabhängige Zustände der beiden Spins, nämlich $m_{s1} = +\frac{1}{2},\ m_{s2} = +\frac{1}{2}$ (kurz als $|\uparrow\uparrow\rangle$ geschrieben), $m_{s1} = +\frac{1}{2},\ m_{s2} = -\frac{1}{2}$ $(|\uparrow\downarrow\rangle)$,
$m_{s1} = -\frac{1}{2},\ m_{s2} = +\frac{1}{2}$ $(|\downarrow\uparrow\rangle)$ und $m_{s1} = -\frac{1}{2},\ m_{s2} = -\frac{1}{2}$ $(|\downarrow\downarrow\rangle)$.

(i) Zu jedem Eigenwert gibt es nun viermal soviele linear unabhängige Eigenzustände; der Eigenwert $E_N = (N + 1)\hbar\omega$ ist also $4(N+1)$-fach entartet.

(ii) Das Pauli-Prinzip verlangt, dass die Gesamtwellenfunktion $\Psi_{n_1,n_2}(x_1, x_2)|m_{s1}, m_{s2}\rangle$ antisymmetrisch ist in Bezug auf Teilchenaustausch. Von den vier Spinzuständen sind $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ bezüglich Teilchenaustausch symmetrisch. Aus den beiden anderen lässt sich eine symmmetrische $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ und eine antisymmetrische $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ Linearkombination konstruieren. In dem antisymmetrischen (Singulett) Spinzustand, $|m_{s1}, m_{s2}\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$, muss die Ortswellenfunktion Ψ

gegenüber Teilchenaustausch symmetrisch sein, damit die Gesamtwellenfunktion $\Psi_{n_1,n_2}(x_1,x_2)|m_{s1},m_{s2}\rangle$ gegenüber Teilchenaustausch antisymmetrisch ist. Für jedes Paar (n_1,n_2) von Einteilchenortsquantenzahlen ist dies für die Wellenfunktion

$$\Psi^{\text{symm}}_{n_1,n_2}(x_1,x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)$$

erfüllt. Für die drei symmetrischen (Triplett) Spinzustände, muss die Ortswellenfunktion Ψ antisymmetrisch sein,

$$\Psi^{\text{antisymm}}_{n_1,n_2}(x_1,x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2) \ ,$$

eine Konstruktion, welche für $n_1 = n_2$ eine verschwindende Wellenfunktion ergibt. Die Wellenfunktionen $\Psi^{\text{symm}}_{n_1,n_2}$ und $\Psi^{\text{symm}}_{n_2,n_1}$ sind allerdings identisch, ebenso wie — bis auf ein Minus-Zeichen — die Wellenfunktionen $\Psi^{\text{antisymm}}_{n_1,n_2}$ und $\Psi^{\text{antisymm}}_{n_2,n_1}$, so dass wir z.B. $n_1 \leq n_2$ fordern müssen, um Doppelzählungen zu vermeiden.

Für Eigenwerte $E_N = (N+1)\hbar\omega$ mit ungeradem N ist stets $n_1 \neq n_2$ und es gibt $(N+1)/2$ Paare (n_1,n_2) mit $n_1 < n_2$. Zu jedem Paar sind alle vier Spinwellenfunktionen erlaubt, die Entartung ist $4(N+1)/2 = 2(N+1)$. Für Eigenwerte $E_N = (N+1)\hbar\omega$ mit geradem N gibt es $N/2$ Paare (n_1,n_2) mit $n_1 < n_2$, was einschließlich Spinkomponenten $2N$ verschiedene total antisymmetrische Wellenfunktionen ergibt, und ein Paar $n_1 = n_2 = N/2$, für das nur der antisymmetrische Singulett-Zustand des Spins erlaubt ist; die Entartung ist $2N+1$ für gerade N.

3. (a) $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = (2/L)\int_0^L \sin(k_m x)\sin(k_n x)\mathrm{d}x$

$$= \frac{2}{L}\frac{1}{2}\int_0^L \left[\cos\left((m-n)\pi\frac{x}{L}\right) - \cos\left((m+n)\pi\frac{x}{L}\right)\right]\mathrm{d}x$$

$$\overset{u=\pi x/L}{=} \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \left(\cos\left[(m-n)u\right] - \cos\left[(m+n)u\right]\right)\mathrm{d}u = 0 \quad \text{for} \quad m \neq n \ .$$

Für $m = n$:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin^2(k_n x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \left[1 - \cos(2nu)\right]\mathrm{d}u = 1 \ .$$

(b) $\int_0^L |\psi(x,t=0)|^2\mathrm{d}x = |N|^2\int_0^L x^2(L-x)^2\mathrm{d}x$

$$= |N|^2\int_0^L \left(x^2L^2 - 2x^3L + x^4\right)\mathrm{d}x = N^2\left(\frac{L^2x^3}{3} - 2\frac{Lx^4}{4} + \frac{x^5}{5}\right)\Bigg|_0^L = |N|^2\frac{L^5}{30}$$

$\Longrightarrow \int_0^L |\psi_n(x)|^2\mathrm{d}x = 1$ wenn $|N|^2 = 30/L^5$.

$$
\begin{aligned}
a_n &= \langle \psi_n | \psi(t=0) \rangle = N^* \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L (xL - x^2) \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) \mathrm{d}x \\
&\overset{u=x/L}{=} N\sqrt{2L} \int_0^1 (u-u^2) \sin(n\pi u) \mathrm{d}u = \begin{cases} (2L)^{5/2} N^* / (n\pi)^3 \ , & n \text{ ungerade} \\ 0 \ , & n \text{ gerade} \end{cases} \\
& (|a_1|^2 = 0.9986 \ , \quad |a_3|^2 = 0.0014 \ , \quad |a_5|^2 < 10^{-4} \ , \ldots)
\end{aligned}
$$

(c) $\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \, \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_n t\right)$, $\quad E_n = n^2 E_1$, $\quad E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$.

$$
\psi(x, \nu T) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi n^2 \nu} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \, (-1)^{n^2 \nu} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \, (-1)^{\nu} \ ;
$$

von Null verschieden sind in der Summe nur die Terme zu ungeradem n, für die n^2 auch ungerade ist, so dass $(-1)^{n^2\nu} = (-1)^{\nu}$ für alle nichtverschwindenden Terme in der Summe.
Also ist $\psi(x, \nu T) = \psi(x, t=0)(-1)^{\nu}$; für gerade ν ist $\psi(x, \nu T)$ wieder die Anfangswellenfunktion $\psi(x, t=0)$, für ungerade ν unterscheidet sie sich hiervon durch den Faktor -1.