

**LÖSUNGEN**

1. (a)

$$[\hat{x}^2, \hat{p}_x] = 2i\hbar\hat{x}.$$

$$[\hat{p}_x, \hat{L}_y] = [\hat{p}_x, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = -[\hat{p}_x, \hat{x}\hat{p}_z] = i\hbar\hat{p}_z.$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^n] = i\hbar n\hat{p}_x^{n-1}.$$

$$[\hat{x}, V(\hat{p}_x)] = \sum_{k=0}^n v_n [\hat{x}, \hat{p}_x^k] = i\hbar \sum_{k=0}^n k v_k \hat{p}_x^{k-1} = i\hbar \frac{d}{d p_x} V(\hat{p}_x),$$

wobei  $V(\hat{p}_x) = \sum_{k=0}^n v_k \hat{p}_x^k$  ist.

(b)

$\frac{\partial}{\partial x}$	nicht Herm.	$\hat{p}_x$ ist Hermitisch $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x$ ist nicht Herm.
$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	Hermitisch	$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\hat{p}_x^2$ .
$\hat{x} + i\hat{p}_x$	nicht Herm.	$(\hat{x} + i\hat{p}_x)^\dagger = \hat{x} - i\hat{p}_x \neq \hat{x} + i\hat{p}_x$ .
$\hat{L}_z \cdot \hat{S}_z$	Hermitisch	$(\hat{L}_z \cdot \hat{S}_z)^\dagger = \hat{S}_z \cdot \hat{L}_z = \hat{L}_z \cdot \hat{S}_z$ .
$e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{L}_z}$	Hermitisch	Operator mit reellen Eigenwerte: $e^{i\pi m} = (-1)^m$ .
$e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_z}$	es hängt von $S$ ab	ganzzahliger Spin $\Rightarrow$ reelle Eigenwerte $\Rightarrow$ Herm. sonst $\Rightarrow$ nicht Hermitisch.

2. (a)

$$1 = \langle \psi_L | \psi_L \rangle = 2|A|^2 \int_0^\infty \exp(-2x/L) dx = 2|A|^2 \left. \frac{\exp(-2x/L)}{-2/L} \right|_{x=0}^\infty = |A|^2 L.$$

$$\Rightarrow |A| = \frac{1}{L}.$$

- (b) Um  $E_L$  zu berechnen, brauchen wir  $\langle \psi_L | \frac{d^2}{dx^2} | \psi_L \rangle$  und  $\langle \psi_L | \hat{x}^2 | \psi_L \rangle$ . Für den zweiten Erwartungswert ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \psi_L | \hat{x}^2 | \psi_L \rangle &= 2|A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2x/L} dx \stackrel{y=2x/L}{=} \frac{1}{4} L^3 |A|^2 \int_0^\infty y^2 e^{-y} dy \\ &= \frac{1}{2} L^3 |A|^2 = \frac{1}{2} L^2. \end{aligned}$$

Der erste Erwartungswert lässt sich durch direkte Integration nicht berechnen, da die zweite Ableitung von  $\psi_L$  in  $x = 0$  nicht definiert ist. Um  $\langle \psi_L | \frac{d^2}{dx^2} | \psi_L \rangle$  zu berechnen, benutzen wir partielle Integration:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_L \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_L \right\rangle &= \int_{-\infty}^\infty \psi_L(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_L(x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^\infty (\psi_L'(x))^2 dx \\ &= - \frac{2|A|^2}{L^2} \int_0^\infty e^{-2x/L} dx \\ &= - \frac{|A|^2}{L} = - \frac{1}{L^2}. \end{aligned}$$

Jetzt berechnen wir  $E_L$ :

$$\begin{aligned} E_L &= \langle \psi_L | \hat{H} | \psi_L \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\beta^2 \left\langle \psi_L \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_L \right\rangle + \frac{1}{\beta^2} \langle \psi_L | \hat{x}^2 | \psi_L \rangle \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( \frac{\beta^2}{L^2} + \frac{L^2}{2\beta^2} \right) \end{aligned}$$

Dann

$$\begin{aligned} \frac{dE_L}{dL} &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( -2\frac{\beta^2}{L^3} + \frac{L}{\beta^2} \right) = 0 \Leftrightarrow \left( \frac{L}{\beta} \right)^2 = \sqrt{2} \Rightarrow \\ \Rightarrow E_{\min} &= \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar\omega}{2} \times 1.414. \end{aligned}$$

Energie des Grundzustands:  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ .

3. (a) Der Zweiteilchen-Hamiltonoperator ist die Summe von 6 harmonischen Oszillatoren. Deswegen ist ein vollständiger Satz von Quantenzahlen: die Quantenzahlen der harmonischen Oszillatoren  $n_{x_1}$ ,  $n_{y_1}$ ,  $n_{z_1}$ ,  $n_{x_2}$ ,  $n_{y_2}$ ,  $n_{z_2}$ , und die Quantenzahlen  $m_1 = \pm \frac{1}{2}$  und

$m_2 = \pm \frac{1}{2}$  von  $\hat{S}_{z_1}$  bzw.  $\hat{S}_{z_2}$ . Die Eigenfunktionen haben dann die allgemeine Form:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, m_1, m_2) &= \psi_{n_{x_1}}(x_1) \psi_{n_{y_1}}(y_1) \psi_{n_{z_1}}(z_1) \chi(m_1) \times \\ &\times \psi_{n_{x_2}}(x_2) \psi_{n_{y_2}}(y_2) \psi_{n_{z_2}}(z_2) \chi(m_2), \end{aligned}$$

wobei

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

die Eigenfunktionen des 1d harmonischen Oszillators sind. Die entsprechende Energie ist:

$$E_{n_{x_1} n_{y_1} n_{z_1} n_{x_2} n_{y_2} n_{z_2}} = \frac{\hbar\omega}{2} (n_{x_1} + n_{y_1} + n_{z_1} + n_{x_2} + n_{y_2} + n_{z_2} + 3).$$

Man kann statt  $m_1$  und  $m_2$  die Quantenzahlen  $S$  und  $M_S$  nehmen. In diesem Fall:  $M_S = m_1 + m_2 \in \{-1, 0, 1\}$  und  $S = |S_1 - S_2|, \dots, S_1 + S_2 \in \{0, 1\}$ .

- (b) Der Grundzustand ist der symmetrische Zustand mit Quantenzahlen  $n_{x_1} = 0, n_{y_1} = 0, n_{z_1} = 0, n_{x_2} = 0, n_{y_2} = 0, n_{z_2} = 0, m_1 = \pm \frac{1}{2}$  und  $m_2 = \pm \frac{1}{2}$ . Deswegen ist er nicht entartet und seine Energie ist:

$$E = \frac{3\hbar\omega}{2}.$$

Für das 1. angeregte Niveau muss ein Fermion im Grundzustand  $|n_{x_1} n_{y_1} n_{z_1}\rangle = |000\rangle$  sein und das andere im 1. angeregten Zustand  $|n_{x_1} n_{y_1} n_{z_1}\rangle \in \{|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle\}$ . Dann ist seine Energie:

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \times 4 = 2\hbar\omega.$$

Da die Teilchen ununterscheidbar sind, gibt es 3 mögliche Kombinationen dieser Quantenzahlen. Außerdem können die Fermionen beide Werte des Spins annehmen:  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ . Also ist die Entartung des 1. angeregten Niveaus  $3 \times 4 = 12$ .

- (c) Für  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$  gilt:

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2}(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2),$$

dann  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |SM_S\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (S(S+1) - 3/2) |SM_S\rangle$ . Der Kopplungsterm ist diagonal in der  $\{S, M_S\}$ -Darstellung. Es folgt:

$$E_{n_{x_1} n_{y_1} n_{z_1} n_{x_2} n_{y_2} n_{z_2} SM_S} = E_{n_{x_1} n_{y_1} n_{z_1} n_{x_2} n_{y_2} n_{z_2}} + \Delta E_S,$$

mit

$$\Delta E_S = \frac{g\hbar^2}{2} \left( S(S+1) - \frac{3}{2} \right).$$

Insbesondere gilt für den Grundzustand ( $S = 0$ ):

$$\Delta E_S = -\frac{3}{4}g\hbar^2,$$

und für das 1. angeregte Niveau:

$$\Delta E_S = \begin{cases} -\frac{3}{4}g\hbar^2 & S = 0, \\ \frac{1}{4}g\hbar^2 & S = 1. \end{cases}$$

4. Zunächst berechnen wir die Eigenwerte und Eigenvektoren des Operators  $\hat{S}_y$ . Diese lauten:

$$\text{Eigenwert: } +\frac{\hbar}{2} \quad \text{Eigenvektor: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

und

$$\text{Eigenwert: } -\frac{\hbar}{2} \quad \text{Eigenvektor: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Die Eigenvektoren in der Basis des Operators  $\hat{S}_z$  lauten dann:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$$

und

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle),$$

mit

$$S_z |\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$$

und

$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle.$$

Der Zustand des in dieser Aufgabe gegebenen Elektrons wird somit beschrieben durch:

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle),$$

d.h. die Koeffizienten  $a(t=0)$  und  $b(t=0)$  sind:

$$a(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{und} \quad b(t=0) = \frac{i}{\sqrt{2}}.$$

Berechnen wir nun die zeitliche Entwicklung dieses Zustands unter Einwirkung des Hamilton-Operators  $H = -\mu_b B \hat{S}_z$ . Wir setzen hierzu für die Wellenfunktion an:

$$|\Psi(t)\rangle = a(t)|\uparrow\rangle + b(t)|\downarrow\rangle$$

und lösen damit die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle.$$

Es ergibt sich:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = -\mu_b B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}.$$

Dies sind zwei ungekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung für die Koeffizienten  $a(t)$  und  $b(t)$ . Sie lauten:

$$\dot{a}(t) = i \frac{\mu_b B}{2} a(t)$$

und

$$\dot{b}(t) = -i \frac{\mu_b B}{2} b(t).$$

Die Lösungen sind:

$$a(t) = a(t=0) \exp\left(i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(i \frac{\mu_b B}{2} t\right)$$

und

$$b(t) = b(t=0) \exp\left(-i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = \frac{i}{\sqrt{2}} \exp\left(-i \frac{\mu_b B}{2} t\right)$$

Die Wahrscheinlichkeit das Elektron nach der Zeit  $t$  im Zustand  $|\uparrow\rangle$  zu finden, ist

$$\mathcal{P}(\uparrow) = |a(t)|^2 = |a(t=0)|^2 = \frac{1}{2}.$$

Ein Spinflip ergibt sich nun auf folgende Weise:

Bei der Berechnung der Eigenwerte und -vektoren von  $\hat{S}_y$  in der Basis von  $\hat{S}_z$  haben wir gesehen, dass der Eigenwert  $-\frac{\hbar}{2}$  den Eigenvektor

$c \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$  ( $c = \text{const.}$  mit  $|c|^2 = 1$ ) hat. Somit bedeutet ein Spinflip, dass wir folgende Gleichungen zu lösen haben:

$$a(t) = a(t=0) \exp\left(i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(i \frac{\mu_b B}{2} t\right) \stackrel{!}{=} c \frac{1}{\sqrt{2}}$$

und

$$b(t) = b(t=0) \exp\left(-i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = \frac{i}{\sqrt{2}} \exp\left(-i \frac{\mu_b B}{2} t\right) \stackrel{!}{=} -c \frac{i}{\sqrt{2}}$$

d.h.  $\exp\left(i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = +c$  und  $\exp\left(-i \frac{\mu_b B}{2} t\right) = -c$ . Damit ist ein Spinflip bei der Zeit  $t = \frac{\pi}{\mu_b B}$  möglich, wobei dann  $c = i$  gilt.