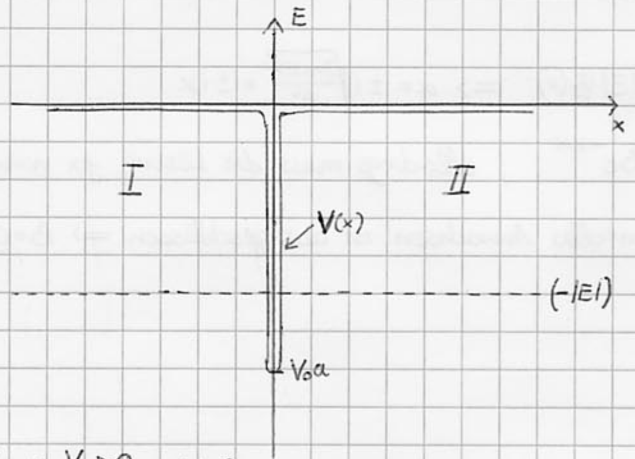
Übungsblatt I

Aufgabe 1



$V(x) = -V_0 a\,\delta(x) \quad ; \quad V_0 > 0 \quad ; \quad a > 0$

a) Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) - V_0 a\,\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

b) Zunächst gilt mal, dass $\psi(x)$ stetig ist. Daraus ergibt sich die 1. Anschlussbedingung:

$$\psi(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon\to 0} = \psi(-\varepsilon)\Big|_{\varepsilon\to 0} \quad \text{für } \varepsilon > 0 \quad ; \text{ bzw. } \psi(0)\Big|_{0^+} = \psi(0)\Big|_{0^-} \qquad (*)$$

Nun integrieren wir die Schrödingergleichung von $-\varepsilon$ bis ε:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\right)dx - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0 a\,\delta(x)\psi(x)\,dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(x) \quad \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\Big|_{x=-\varepsilon}^{\varepsilon} - V_0 a\,\psi(0) = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(x)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist 0, denn: $\psi(x)$ ist stetig und $|\psi(x)| < \infty$

$$\Longrightarrow \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(x) \le 2\varepsilon E\,|\psi_{max}(x)| \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 0$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\Big|_{x=-\varepsilon}^{\varepsilon} = -V_0 a\,\psi(0)\,\frac{2m}{\hbar^2}$$

D.h. unsere 2. Randbedingung lautet:

$$\cancel{\frac{\partial}{\partial x}\psi(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon\to 0} - \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\Big|_{\varepsilon\to 0}}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\Big|_{\varepsilon\to 0} - \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\Big|_{-\varepsilon\to 0} = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a\,\psi(0) \qquad (**)$$

c) Es soll gelten: $E<0$

Lösung im Bereich I ($x\leq 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I(x) = -|E|\,\psi_I(x)$$

Ansatz: $\psi_I(x) = e^{i\alpha x}$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\psi_I(x) = -|E|\,\psi_I(x) \Rightarrow \alpha = \pm i\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \pm i\varkappa$$

$\Rightarrow \psi_I(x) = Ae^{\varkappa x} + Be^{-\varkappa x}$; allerdings muss die Lösung ja normierbar (physikalisch) sein; d.h. ein exponentielles Anwachsen ist ausgeschlossen $\Rightarrow B=0$

also: $\psi_I(x) = Ae^{\varkappa x}$

Lösung im Bereich II ($x\geq 0$):

ein analoges Vorgehen mit dem gleichen Lösungsansatz:

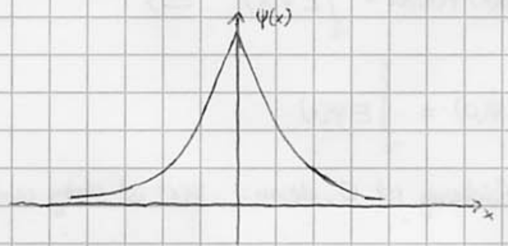
$\psi_{II}(x) = Ce^{-\varkappa x} + De^{\varkappa x}$; Normierungsbedingung führt wieder auf $D=0$

$\Rightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{-\varkappa x}$

Nun betrachten wir die Anschlussbedingungen:

Mit (*) folgt: $Ae^{\varkappa\cdot 0} = Ce^{-\varkappa\cdot 0} \Rightarrow A=C$

graphisch ergibt sich für die Wellenfunktion also folgendes Verhalten:



Mit (**) folgt: $C(-\varkappa)e^{-\varkappa x}\Big|_{x=\varepsilon\to 0} - A\varkappa e^{\varkappa x}\Big|_{x=-\varepsilon\to 0} = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a\,\psi(0)$

$\psi(0) = A = C \quad\Rightarrow\quad -\varkappa\cdot C - \varkappa\cdot C = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a\,C$

$$\Rightarrow \varkappa = \frac{m}{\hbar^2}V_0 a \quad\Rightarrow\quad \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{m}{\hbar^2}V_0 a \quad\Rightarrow\quad |E| = \frac{1}{2}\frac{m}{\hbar^2}V_0^2 a^2$$

Dies ist die gesuchte Bindungsenergie; wie man sieht gibt es nur einen gebundenen Zustand. Dies passt mit unserem Ergebnis für den endlichen Potentialtopf aus der Vorlesung zusammen. Dort haben wir gefunden, dass es mind. einen gebundenen

Zustand geben muss, auch wenn der Topf sehr schmal und untief wird!

d) Alle Terme in der Schrödingergleichung von $\varphi(x)$ haben Dimension einer Energie ($J \hat{=}$ Joule)

$[\delta(x)] = \frac{1}{m}$; $[V_0] = J$ (wie gefordert) ; $[V_0 a \delta(x)] = J$ $\Rightarrow$ $[a] = m$

Testen ob dann $|E|$ Dimension einer Energie hat:

$$\left[\frac{1}{2}\frac{m}{\hbar^2}V_0^2 a^2\right] = \frac{kg}{J^2 s^2} J^2 m^2 = \frac{kg \cdot m^2}{s^2} = J \quad \checkmark$$

Übungsblatt I

Aufgabe 2

Laut Vorlesung gilt: $\ln T \approx -\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{2m(V(x)-E)}$ für $\kappa a \gg 1$

x_1, x_2 sind die Schnittpunkte von Energie E mit Potential $V(x)$. Diese sind direkt aus der Abbildung ablesbar: $x_1 = -a$; $x_2 = +a$

Außerdem gilt: $E = V_0/2$

$$\Rightarrow \ln T = -\frac{2}{\hbar}\int_{-a}^{0} dx\,\sqrt{2m\left(\frac{V_0}{2a}x+\frac{V_0}{2}\right)} - \frac{2}{\hbar}\int_{0}^{a} dx\,\sqrt{2m\left(-\frac{V_0}{2a}x+\frac{V_0}{2}\right)} =$$

$$= -\frac{2}{\hbar}\frac{a}{V_0 m}\left(\left(2m\left(0+\frac{V_0}{2}\right)\right)^{3/2} - \left(2m\left(-\frac{V_0}{2}+\frac{V_0}{2}\right)\right)^{3/2}\right) - \frac{2}{\hbar}\frac{a}{V_0 m}\left(\left(2m\left(-\frac{V_0}{2}+\frac{V_0}{2}\right)\right)^{3/2} - \left(2m\left(-0+\frac{V_0}{2}\right)\right)^{3/2}\right) =$$

$$= -\frac{8a}{3\hbar}\sqrt{V_0 m}$$

$-a < x < 0: \quad V(x) = \frac{V_0}{2a}x + V_0$; $\quad 0 < x < a: \quad V(x) = -\frac{V_0}{2a}x + V_0$

Übungsblatt I

Aufgabe 4

$$\hat H = \hat T + \hat V \quad ; \quad \hat T = \frac{\hat{\vec p}^{\,2}}{2m} \quad ; \quad \hat V = V(\vec r)$$

a) $\langle \psi_0 | [\hat H, \hat A] | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat H \hat A - \hat A \hat H | \psi_0 \rangle \overset{\hat H \text{ hermitisch}}{=}$

$= \langle \hat H \psi_0 | \hat A | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat A | \hat H \psi_0 \rangle = E_0 \langle \psi_0 | \hat A | \psi_0 \rangle - E_0 \langle \psi_0 | \hat A | \psi_0 \rangle = 0$

b) $[\hat H, \hat{\vec p}\hat{\vec r}] = -[\hat{\vec p}\hat{\vec r}, \hat H] \neq -\{\hat{\vec p}[\vec r, \hat H] + [\vec p, \hat H]\vec r\}$ diesen Fehler darf man nicht machen.

Man muss erst das Skalarprodukt ausführen ; also:

$[\hat H, \hat{\vec p}\hat{\vec r}] = -[p_x x + p_y y + p_z z, \frac{\vec p^{\,2}}{2m} + V(\vec r)] = -\{p_x[x, \frac{\vec p^{\,2}}{2m} + V(\vec r)] + [p_x, \frac{\vec p^{\,2}}{2m} + V(\vec r)]x + y,z\text{-Terme}\} =$

$= -\{p_x[x, \frac{\vec p^{\,2}}{2m}] + [p_x, V(\vec r)]x + y,z\text{-Terme}\} =$

$= -\{-p_x[\frac{\vec p^{\,2}}{2m}, x] + [p_x, V(\vec r)]x + y,z\text{-Terme}\} =$

$[p_z, x] = [p_y, x] = 0$

$= -\{-\frac{p_x^2}{2m}[p_x, x] - \frac{p_x}{2m}[p_x, x]p_x + [p_x, V(\vec r)]x + y,z\text{-Terme}\} =$

$= -\{\frac{p_x^2}{2m} i\hbar + \frac{p_x^2}{2m} i\hbar - i\hbar(\frac{\partial}{\partial x}V(\vec r))x + y,z\text{-Terme}\} =$

$= -\{i\hbar\, 2\hat T - i\hbar\, \vec r \vec\nabla V(\vec r)\} = -2i\hbar \hat T + i\hbar\, \vec r \vec\nabla V(\vec r)$

mit Aufgabe a) gilt: $\langle \psi_0 | [\hat H, \hat{\vec p}\hat{\vec r}] | \psi_0 \rangle = 0$

$\Rightarrow \quad -2i\hbar \langle \hat T \rangle + i\hbar \langle \vec r \vec\nabla V(\vec r) \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad 2\langle \hat T \rangle = \langle \vec r \vec\nabla V(\vec r) \rangle$

c) Coulombpotential: $V(\vec r) = -\frac{e^2}{r}$ wobei $4\pi\varepsilon_0 = 1$ gesetzt wurde

$\Rightarrow \quad \vec\nabla V(\vec r) = -\vec\nabla \frac{e^2}{r} = -\vec\nabla \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = + \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}^{\,3}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{e^2 \vec r}{r^3}$

$\Rightarrow \quad \vec r \vec\nabla V(\vec r) = \frac{e^2 \vec r^{\,2}}{r^3} = \frac{e^2}{r} = -V(\vec r)$

$\Rightarrow \quad 2\langle \hat T \rangle = -\langle \hat V \rangle$

d) $\langle \frac{1}{r} \rangle$ für Wasserstoffgrundwellenfunktion:

$$\langle \tfrac{1}{r} \rangle = \langle \psi_0 | \tfrac{1}{r} | \psi_0 \rangle = \int d^3r \langle \psi_0 | \vec{r} \rangle \tfrac{1}{r} \langle \vec{r} | \psi_0 \rangle = \int d^3r \, \tfrac{1}{r} \, |\psi_0(\vec{r})|^2 =$$

$$= \int d^3r \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{r}{a_0}\cdot 2} = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty dr \, r \, e^{-\frac{2r}{a_0}} \underset{\alpha = \frac{2}{a_0}}{=} \frac{4}{a_0^3} \frac{1!}{(\frac{2}{a_0})^2} = \frac{1}{a_0}$$

$$\Rightarrow \langle V(r) \rangle = \langle -\frac{e^2}{r} \rangle = -\frac{e^2}{a_0}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{H} \rangle = \langle E_0 \rangle = \frac{e^2}{2a_0} - \frac{e^2}{a_0} = -\frac{e^2}{2a_0}$$

Für Wasserstoffatom gilt: $E_n^H = -R_y \frac{1}{n^2}$; $R_y = \frac{e^2}{2a_0}$

$\Rightarrow \langle E_0 \rangle = \langle \hat{H} \rangle = E_0$ Grundzustand des Wasserstoffatoms.

Üb Blatt 1

Aufgabe 3

a) $\langle m|\hat{O}|n\rangle = n \underbrace{\langle m|n\rangle}^{\delta_{mn}} = (\langle On|m\rangle)^* = (\langle n|O^+|m\rangle)^* =$

$= (\langle n|O|m\rangle)^* = m^* \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = \underline{\underline{n^* = n}} \Rightarrow \boxed{n = \text{Reell}}$

(Begründg: gilt $\forall$ n,m $\Rightarrow$ spannen den VR auf $\Rightarrow$ gilt $\forall$

alternativ $n = \langle n|\hat{O}|n\rangle = \ldots$ → dann δ_{nn} nicht nötig
besser sonst Orthogonalität nötig

b) $\langle m|\hat{O}|n\rangle = n\ \langle m|n\rangle = \langle \hat{O}^+ m|n\rangle = \underbrace{m^*}_{=m} \langle m|n\rangle$

$\Rightarrow\ 0 = (n - m)\ \langle m|n\rangle$

$\rightarrow$ für $m \neq n$ muss gelten $\langle m|n\rangle = 0$

c) $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesch: $[\hat{A},\hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ (*)

~~Wähle Eine Basis~~ Sei $|a_n\rangle$ Eigenzustand zu $\hat{A}$ mit $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$

dann gilt mit (*) $BA|a_n\rangle = a_n \underbrace{B|a_n\rangle} = \hat{A}\underbrace{B|a_n\rangle}$

$\Rightarrow$ $B|a_n\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{A}$ zum Eigenwert a_n. Gehen wir davon aus, dass die $|a_n\rangle$ nicht entartet sind, also zu jedem EWert a_n nur einen Eigenzustand $|a_n\rangle$ existiert können wir folgern:
$B|a_n\rangle$ ist bis auf Faktor gleich $|a_n\rangle$.

$\Longrightarrow$ $|a_n\rangle$ ist ebenfalls Eigenzustand B mit Eigenwert b_n.
Also sind die $|a_n\rangle$ gleichzeitig Eigenzustände zu $\hat{B}$ und $\hat{A}$.

d) $[A, A^+] = AA^+ - A^+A = 1$

Jede analytische Funktion $f(A^+)$ kann als Potenzreihe geschrieben werden:

$$f(A^+) = \sum_n c_n (A^+)^n$$

$$\Rightarrow A f(A^+) = \sum_n c_n A (A^+)^n$$

Untersuche: $A(A^+)^n = (AA^+)(A^+)^{n-1} = (A^+A + \underbrace{[A, A^+]}_{1})(A^+)^{n-1} =$

$$= (A^+)^{n-1} + A^+ \underbrace{(AA^+)}_{[A,A^+] + A^+A} A^{+(n-2)} =$$

$$= (A^+)^{n-1} + (A^+)^{(n-2)} + (A^+)^2 A (A^+)^{n-2} = \ldots \text{ usw.}$$

Schiebe A bis ganz nach ~~Rechts~~: $\Rightarrow$ n Schritte nötig ...

$$= n \cdot (A^+)^{n-1} + (A^+)^n \cdot A$$

$$\Rightarrow A f(A^+) |0\rangle = \sum_n c_n A (A^+)^n |0\rangle = \sum_n c_n (n \cdot (A^+)^{n-1} + (A^+)^n \underbrace{A) |0\rangle}_{=0}$$

$$= \sum_n c_n \, n (A^+)^{n-1} |0\rangle =$$

$$= \sum_n c_n \frac{d}{dA^+} [(A^+)^n] |0\rangle = \frac{d}{dA^+} \sum \ldots |0\rangle = \boxed{\frac{df(A^+)}{dA^+} |0\rangle}$$

e) $\exp(\lambda A) f(A^+) |0\rangle = \sum \frac{1}{n!} \lambda^n A^n f(A^+) |0\rangle =$

$\hookrightarrow$ n-faches Anwenden von A auf jeweils Funktionen von A^+

$\hookrightarrow$ n-fache Ableitg!

$$= \sum \frac{1}{n!} \lambda^n \frac{d^n f(A^+)}{(dA^+)^n}\Big|_{A^+} |0\rangle =$$

$$= f(A^+ + \lambda) |0\rangle \Leftarrow \text{Taylorentwickl. von } f \text{ um } A^+$$

[vgl. Taylorentw.: $f(x + \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(x')}{(dx')^n}\Big|_{x'=x} \cdot \lambda^n$]

f) $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesch

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}\{A,B\} + \frac{1}{2}[A,B]$$ Ist $\hat{A}\hat{B}$ auch hermitesch?

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \frac{1}{2}\{A,B\}^+ + \frac{1}{2}[A,B]^+ = \frac{1}{2}\{(AB)^+ + (BA)^+\} + \frac{1}{2}[(AB)^+ - (BA)^+]$$

$A^+ = A$, $B^+ = B$

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

Falls $[A,B] = 0$ dann ist $(\hat{A}\hat{B})$ auch hermitesch !!

g) s.o. : $\{A,B\}^+ = \{A,B\}$; $[A,B]^+ = -[A,B]$

Betrachte den Operator $i\hat{O}$ mit $\hat{O}$ hermitesch ; Dann gilt:
$$(i\cdot\hat{O})^+ = -i\hat{O}^+ = -(i\hat{O})$$
$\Rightarrow$ $[A,B]$ ist ein sog. antihermit. Operator!
Er lässt sich darstellen als $i\cdot\hat{O}$, mit $\hat{O}$ einen hermiteschen Operator!

5) Lösung des Harmonischen Oszillators mittels Operatoren

$$\hat{H} = \hbar\omega\left\{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right\} \quad (*)$$

a) $[x,p] = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x) = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar = \underline{\underline{i\hbar}}$

b) $\hat{a} = \hat{A} + i\hat{B} \Rightarrow \hat{a}^+ = \hat{A} - i\hat{B}$

$$a^+a = (\hat{A} - i\hat{B})(\hat{A} + i\hat{B}) = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i[\hat{A},\hat{B}]$$

c) Wir erkennen also Ähnlichkeit mit $(*)$ wenn $\alpha\hat{p} = \hat{B}$ und $\beta\hat{x} = \hat{A}$
mit a) $[x,p] = i\hbar$, also $[A,B] = $ const.
$\Rightarrow$ kann behoben werden!

$$\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega \hat{x}^2}{2\hbar}$$

$$\overset{\circ}{\parallel}$$

$$\hat{B}^2 + \hat{A}^2 = a^+a - i\underbrace{[\hat{A},\hat{B}]}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\hat{B} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\,;\ \hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}} \Rightarrow -i[\hat{A},\hat{B}] = \sqrt{\frac{m\omega}{4m\omega\hbar^2}}(-i)\overbrace{[\hat{x},\hat{p}]}^{=i\hbar} =$$

$$= \frac{1}{2}(-i)i = \underline{\frac{1}{2}};$$

$$\Downarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{2\hbar} = a^+a + \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \underline{\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)} \quad \text{mit } a = \hat{A} + i\hat{B}\ ;\ [\hat{A},\hat{B}] = \frac{i}{2}\ (**)$$

d) $[H, a^+] = \hbar\omega\,[a^+a, a^+] \Rightarrow$ Kommutator von $[a, a^+]$ nötig

$$[a, a^+] = [\hat{A} + i\hat{B}, \hat{A} - i\hat{B}] = -i[\hat{A},\hat{B}] + i[B, A] =$$

$$= -2i\,[A, B] \underset{(**)}{=} \underline{1};$$

$$\Rightarrow [H, a^+] = \hbar\omega\{a^+aa^+ - a^+a^+a\} = \hbar\omega\{a^+aa^+ - a^+(aa^+ - \underbrace{[a,a^+]}_{1})\} =$$

$$= \hbar\omega\{a^+aa^+ - a^+aa^+ + a^+\} = \underline{\hbar\omega a^+};$$

Alternativlösung mit Rechenregeln für Kommutator: $[ab, c] = a[b,c] + [a,c]b$

$$\hookrightarrow [H, a] = \hbar\omega\,[a^+a, a] = \hbar\omega\{a^+\underbrace{[a,a]}_{0} + \underbrace{[a^+,a]}_{-1}a\} = \underline{-\hbar\omega a};$$

e) Sei ψ ein beliebiger Zustand des Systems; Dann gilt

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

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

$$\left(\langle a\psi|a\psi\rangle = \||a\psi\rangle\|^2\right) = \hbar\omega\left(\underbrace{\||a\psi\rangle\|^2}_{\geq 0} + \frac{1}{2}\right) \geq \underline{\frac{\hbar\omega}{2}}$$

Die minimale Energie $\frac{\hbar\omega}{2}$ wird dann erreicht, wenn $\langle a\psi|a\psi\rangle = 0$ wegen positiver Definitheit des Skalarprodukts folgt: $\Leftrightarrow |a\psi\rangle = \underline{a|0\rangle = 0};$

Wir nennen dieses $\psi_0 = |0\rangle$, weil es die Minimalenergie / Grundzustandsenergie liefert!

In Ortsdarstellung:

für $\psi_0(x)$: $\langle x | a | 0 \rangle = 0$

$$a = A + iB = \alpha\hat{x} + i\beta\hat{p} = \alpha\hat{x} + \beta\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \left(\alpha\hat{x} + \beta\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0(x) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x) = -\frac{\alpha}{\beta\hbar}x\psi_0(x) = -kx\psi_0(x) \quad \underline{\text{DGL}}$$

<u>Ansatz</u>: $\psi_0(x) = N\exp\left(-\frac{k}{2}x^2\right) \Rightarrow \psi_0'(x) = -kx\psi_0(x)$ (V)

<u>Normierung</u>: $\|\psi_0(x)\|^2 \equiv \langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\psi_0(x)\,dx =$

$$= N^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-kx^2)\,dx = N^2\cdot\left(\frac{\pi}{k}\right)^{\frac{1}{2}} \overset{!}{=} 1$$

$$\Rightarrow N = \left(\frac{k}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\psi_0(x) = \left(\frac{k}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{k}{2}x^2\right)}}, \quad (\text{bis auf Phase})$$

f) $|n\rangle$ sei Eigenzustand zu $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ und normiert mit $\langle n|n\rangle = 1$

$a^+|n\rangle = ?$ $\qquad a|n\rangle = ?$

<u>Betrachte</u>: $H a^+|n\rangle = \left([H, a^+] + a^+H\right)|n\rangle =$ siehe <u>d)</u>

$$= \left(\hbar\omega a^+ + a^+E_n\right)|n\rangle =$$

$$= (E_n + \hbar\omega)a^+|n\rangle = \underbrace{\hbar\omega\left((n+1) + \tfrac{1}{2}\right)}_{= E_{n+1}} a^+|n\rangle$$

$\Rightarrow$ $a^+|n\rangle$ ist also Eigenzustand zu H mit Eigenwert E_{n+1}. Ohne Entartung gilt: $a^+|n\rangle$ ist also bis auf Faktor gleich der Eigenzustand $|n+1\rangle$

$$H a|n\rangle = \left([H,a] + aH\right)|n\rangle =$$

$$= \left(-\hbar\omega a + E_n a\right)|n\rangle =$$

$$= \underline{\underbrace{\hbar\omega\left((n-1)+\tfrac{1}{2}\right)}_{E_{n-1}} a|n\rangle};$$

$a|n\rangle$ ist also Eigenzustand zu E_{n-1} $\Rightarrow$ $a|n\rangle \sim |n-1\rangle$

<u>Normierung?</u> $\| a|n\rangle \|^2 = \langle an|an\rangle = \langle n|a^+a|n\rangle$ ($|n\rangle$ ist normiert)

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

$$\Rightarrow \langle n|a^+a|n\rangle = \langle n|\frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}|n\rangle = \left(n + \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2}\right)\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1} = n$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}}$$ Wenn $|n-1\rangle$ normiert angenommen!

Ebenso: $\| a^+|n\rangle \|^2 = \langle a^+n|a^+n\rangle = \langle n|aa^+|n\rangle$

und $\cancel{a^+a}$ $aa^+ = \underbrace{[a,a^+]}_{1} + a^+a = \frac{H}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow \langle n|aa^+|n\rangle = \langle n|\frac{H}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}|n\rangle = (n+1)$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}};$$ ($|n+1\rangle$ normiert auf 1)

<u>g)</u> Mit obigen Betrachtungen können wir sehen:
a^+ angewendet auf einen Zustand $|n\rangle$ erzeugt den um 1 höheren Zustand $|n+1\rangle$. Deshalb nennt man a^+ Aufsteigeoperator oder Erzeuger.
a verringert $|n\rangle$ auf $|n-1\rangle$. Deshalb nennt man a Absteigeoperator oder Vernichter.

Wir können jeden Zustand $|n\rangle$ also durch n-maliges Anwenden auf den Grundzustand $|0\rangle$ bekommen.
$|0\rangle$ ist durch $a|0\rangle = 0$ definiert!

$$\Rightarrow |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} a^+ |0\rangle \quad \text{usw}$$

↳ Normierungsfaktoren aus Aufgabe f)

$$\hookrightarrow |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ \left(\frac{1}{\sqrt{n-1}} a^+ |n-2\rangle\right) = \text{usw.}$$

$$\underline{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+n} |0\rangle^{(n-n)}};$$

h)

$$a = A + iB \qquad a^+ = A - iB \Leftrightarrow iB = A - a^+$$

$A \sim \hat{x}$, $B \sim \hat{p}$

$$\Rightarrow a + a^+ = 2A = 2 \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, \hat{x}$$

$$\Rightarrow \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^+) =: \Gamma\, (a + a^+)$$

$$(a - a^+) = 2iB = 2i \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\, \hat{p}$$

$$\Rightarrow \hat{p} = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{2i} (a - a^+) = K\, (a - a^+)$$

Erwartungswerte für x^k:

$$\langle x^k \rangle = \langle n | \underbrace{x^k}_{k\text{-Operatoren}} | n \rangle = \Gamma^k \langle n | (a + a^+)^k | n \rangle$$

$(a+a^+)^k$ ergibt $\sum_{\text{Permutiert.}} a a a^+ \ldots a^+ \ldots a$ aus allen Permutationen von Kombinationen aus a und a^+ mit jeweils k Operatoren a, a^+.
Wir wissen dass die Anwendung von a^+ auf $|n\rangle$ einen Zustand prop. zu $|n+1\rangle$ liefert und $a|n\rangle \sim |n-1\rangle$.
D.h. die sukzessive Anwendung a, a^+ macht aus $|n\rangle$ einen anderen Zustand $|n^*\rangle$. Wenn die Anzahl von a und a^+ nicht gleich ist, so ist $|n^*\rangle \neq |n\rangle$ und der Erwartungswert $\langle n | a a^+ \ldots a \ldots a^+ \ldots | n \rangle \sim \langle n | n^* \rangle = \delta_{nn^*} = 0$

D.h. Es tragen nur die Produkte $a_{..} a^+_{..} a_{..}$ bei, bei denen die Anzahl a und a^+ gleich ist.
Deshalb verschwinden alle Erwartungswerte für x^k mit k ungerade. Denn ~~...~~ da die Anzahl k sich als Summe der Anzahlen von a und a^+, ergibt können nur Kombinationen (ungerade, gerade) auftreten, also ungleiche ~~...~~ Anzahlen von a und a^+.

Bei geraden k treten nur Kombinationen (gerade, gerade) auf. $\Rightarrow$ Die Permutationen mit $\# a^+ = \# a = \frac{k}{2}$ tragen zu $\langle x^k \rangle$ bei!

z.B. $\langle x^1 \rangle_n = \hat{r} \langle n | (a + a^+) | n \rangle =$
$$= \hat{r}\left(\underbrace{\langle n | n-1 \rangle}_{0} \sqrt{n} + \underbrace{\langle n | n+1 \rangle}_{0} \sqrt{n+1} \right) = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \hat{r}^2 \left(\langle n | (a + a^+)^2 | n \rangle \right) =$$
$$= \hat{r}^2 \left(\underbrace{\langle n | a^2 | n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n | (a^+)^2 | n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n | a a^+ | n \rangle}_{= n+1} + \underbrace{\langle n | a^+ a | n \rangle}_{= n} \right)$$
$$= \underline{\underline{\hat{r}^2 (2n+1)}}.$$

(Analoges gilt für $\hat{p}^k$!)

Übungsblatt I

Aufgabe 6

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

a)

Die Lösung der dazugehörigen Schrödingergleichung $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = E\psi(x) \text{ für } 0\leq x\leq a\right)$ ist einfach, und wurde bestimmt schon behandelt. Es muss natürlich noch beachtet werden, dass die Lösungen bei $x=0$ und $x=a$ verschwinden müssen. Dann ergeben sich folgende Lösungen:

$$\psi_n(x) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\cdot\pi\cdot\hbar}{a}\right)^2 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Die Lösungen müssen noch normiert werden (nach den Postulaten der QM sind die ψ_n's schon orthogonal und vollständig)

$$1 = \int_0^a dx\, \psi_n^*(x)\psi_n(x) = \langle\psi_n|\psi_n\rangle = |C_n|^2\int_0^a dx\, \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = |C_n|^2\frac{1}{2}\int_0^a dx\left[1-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{2}|C_n|^2\left[a - \frac{a}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\Big|_{x=0}^{a}\right] = \frac{1}{2}|C_n|^2 a \quad \Rightarrow \quad C_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

b) Zunächst betrachten wir die Funktion $\phi(x)$

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \overset{\text{Hinweis}}{=} \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_2(x)\right] = \sqrt{\frac{4}{5}}\left[\psi_1(x) + \psi_2(x)\cdot\frac{1}{2}\right]$$

Um die $A_n(t=0)$ zu bekommen muss man aufgrund der Vollständigkeit der $\varphi_n(x)$ nur wissen, dass:

$$\phi(x,t=0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left[\varphi_1(x) + \frac{1}{2}\varphi_2(x)\right] \overset{!}{=} \sum_n A_n(t=0)\,\varphi_n(x)$$

$$\Rightarrow A_n(t=0) = \langle \varphi_n | \phi \rangle_{t=0} = \int_0^a dx\, \varphi_n^*(x)\cdot\phi(x,t=0) = \int_0^a \sqrt{\frac{4}{5}}\left[\varphi_n^*(x)\varphi_1(x) + \frac{1}{2}\varphi_n^*(x)\varphi_2(x)\right]dx =$$

$$= \sqrt{\frac{4}{5}}\left[\delta_{n1} + \frac{1}{2}\delta_{n2}\right]$$

$$\Rightarrow A_1(t=0) = \sqrt{\frac{4}{5}} \quad ; \quad A_2(t=0) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{4}{5}} \quad ; \quad A_n(t=0) = 0 \quad \forall n \geq 3$$

Die zeitliche Entwicklung der $A_n(t)$ lautet:

$A_n(t) = A_n(t=0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$ mit den in a) berechneten Energieeigenwerten

Wir haben also:

$$\phi(x,t) = \sum_n A_n(t)\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left[\varphi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \frac{1}{2}\varphi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right] \xrightarrow[t\to 0]{} \phi(x,t=0)$$

c) $$\langle E(t)\rangle = \langle \phi(t) | i\hbar\frac{\partial}{\partial t} | \phi(t)\rangle = \int dx \left[A_1(t)\varphi_1(x) + A_2(t)\varphi_2(x)\right]^* \cdot \left[E_1 A_1(t)\varphi_1(x) + E_2 A_2(t)\varphi_2(x)\right] =$$

$$\underset{\text{orthogonal}}{=} E_1|A_1(t)|^2 + E_2|A_2(t)|^2 = E_1|A_1(t=0)|^2 + E_2|A_2(t=0)|^2 = \frac{1}{5}(4E_1 + E_2)$$

der Erwartungswert ist also zeitunabhängig.