Ferienkurs Quantenmechanik - Probeklausur Lösungsvorschlag

Sommersemester 2013

Daniel Rosenblüh und Florian Häse
Fakultät für Physik
Technische Universität München

13. September 2013

Probeklausur

Aufgabe 1
Beantworten Sie stichpunktartig folgende kurze Fragen

(i) Warum kann die Schrödingergleichung keine relativistische Dynamik beschreiben?

(ii) Zeigen Sie

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

(iii) Leiten Sie die stationäre Schrödingergleichung aus der allgemeinen Schrödingergleichung her!

(iv) Zeigen Sie, dass für den einen dreidimensionalen quantenmechanischen Drehimpuls jede Drehimpulskomponente mit dem Quadrat des Drehimpulses kommutiert!

(v) Welche Werte können beim Wasserstoffatom die Quantenzahlen l und m bei gegebenem n annehmen?

(vi) Beweisen Sie: Wenn A nicht explizit zeitabhängig ist und $[H, A] = 0$ ist, dann ist auch $\langle A \rangle$ zeitunabhängig.

(vii) Gegeben sei ein Operator A mit $[A, L_x] = [A, L_y] = 0$. Berechne $[A, L_z]$.

Lösung:

(i) Die Schrödingergleichung ist eine Differentialgleichung erster Ordnung bezüglich der Zeit, allerdings zweiter Ordnung bezüglich des Ortes. Demnach ist sie nicht invariant unter einer Lorentztransfromation und kann nicht zur Beschreibung relativistischer Dynamik dienen.

(ii) Der Nachweis erfolgt durch Nachrechnen

$$\begin{aligned}[A, BC] &= ABC - BCA \\ &= ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= [A, B]C + B[A, C]\end{aligned}$$

(iii) Für die Herleitung der stationären Schrödingergleichung benutzt man einen Separationsansatz einer allgemeinen Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = \Phi(x)U(t)$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$-i\hbar\frac{\dot{U}(t)}{U(t)} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Phi''(x)}{\Phi(x)} + V(x)$$

Nun sehen wir, dass die linke Seite von t abhängt und die rechte Seite von x abhängt. Demnach müssen beide Seiten identisch einer Konstanten sein, die wir E nennen wollen. Damit erhalten wir die stationäre Schrödingergleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Phi''(x) + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$$

(iv) Ein quantenmechanischer Drehimpuls J erfüllt mit seinen Komponenten J_i die Kommutatorrelation

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$$

Zu zeigen ist

$$[J_i, J^2] = 0$$

für ein beliebiges J_i. Dazu berechnet man lediglich

$$\begin{aligned}[J_i, J^2] &= [J_i, J_i^2 + J_j^2 + J_k^2] \\ &= [J_i, J_i^2] + [J_i, J_j^2] + [J_i, J_k^2] \\ &= [J_i, J_i]J_i + J_i[J_i, J_i] + [J_i, J_j]J_j + J_j[J_i, J_j] + [J_i, J_k]J_k + J_k[J_i, J_k] \\ &= 0 + 0 + i\hbar J_kJ_j + J_ji\hbar J_k - J_ji\hbar J_k - i\hbar J_kJ_j \\ &= 0\end{aligned}$$

(v) Die beiden Quantenzahlen l und m sind ganzzahlig und können folgende Werte annehmen:

$$l = 0, 1, \ldots, n - 1 \qquad \text{und} \qquad m = -l, \ldots, l$$

(vi) Mit dem Ehrenfesttheorem

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle$$

folgt sofort

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = 0$$

(vii)

$$i\hbar[A, L_z] \underset{\text{Vertauschungsrelation}}{=} [A,[L_x,L_y]] \underset{\text{Jacobi-Identität}}{=} -[L_y,[A,L_x]] - [L_x[L_y,A]] = 0$$

.

Aufgabe 2 [10 min]

(i) In einem dreidimensionalen Hilbertraum sind folgende Zustände gegeben:

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle.$$

Dabei sind $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ die orthonormierten Basiszustände.

- *Berechnen Sie die Skalarprodukte $\langle\alpha|\beta\rangle$ und $\langle\beta|\alpha\rangle$ und zeigen Sie, dass $\langle\alpha|\beta\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle$ gilt.*
- *Finden Sie alle Matrixelemente des Operators $A = |\alpha\rangle\langle\beta|$ und geben Sie die Matrixdarstellung von A an.*
- *Ist der Operator A hermitesch? (Begründung)*

(ii) Ein Teilchen mit dem Spin $S = \frac{1}{2}$ befindet sich in dem Spinzustand

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix} \quad \textit{(In der z-Basis)}$$

- *Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei Messungen der z-Komponente des Teilchenspins die Werte $+\frac{1}{2}\hbar$ bzw. $-\frac{1}{2}\hbar$ bekommt?*
- *Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei Messungen der x-Komponente des Teilchenspins die Werte $+\frac{1}{2}\hbar$ bzw. $-\frac{1}{2}\hbar$ bekommt?*

Lösung:

(i)
- Für die Bras gilt:

$$\langle\alpha| = -i\langle 1| - 2\langle 2| + i\langle 3| \quad \langle\beta| = -i\langle 1| + 2\langle 3|$$

und damit

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 1 + 2i \qquad \langle\beta|\alpha\rangle = 1 - 2i$$

also gerade $\langle\alpha|\beta\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle$

- In Matrixdarstellung:

$$|\alpha\rangle\langle\beta| = \begin{pmatrix} i \\ -2 \\ -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix}$$

- Die Matrix ist nicht hermitesch, $A^\dagger \neq A$

(ii)
- Für die z-Komponente lautet die Wahrscheinlichkeit für $\pm\frac{1}{2}\hbar$: $|\langle\pm|\chi\rangle|^2$
Es ist
$$|\langle+|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1+i}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{3}, \qquad |\langle-|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{2}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{2}{3}$$

- Die Eigenzustände der x-Komponente sind $|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$, $|S_x,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$.Damit lautet die Wahrscheinlichkeit in x-Richtung $\pm\frac{1}{2}\hbar$ zu messen: $|\langle S_x;\pm|\chi\rangle|^2$
Es ist
$$|\langle S_x;+|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1+i+2}{\sqrt{2}\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{5}{6}, \quad |\langle S_x;-|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1+i-2}{\sqrt{2}\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{6}$$

Aufgabe 3 *Ein Teilchen mit $E < 0$ (gebundener Zustand) befinde sich in folgendem Potential*

$$V(q) = \begin{cases} \infty & \textit{für } q \leq 0 \quad (I) \\ -V_0 & \textit{für } 0 < q < q_0 \quad (II) \\ 0 & \textit{für } q_0 \leq q \quad (III) \end{cases}$$

(i) *Geben Sie die Lösungen der stationären Schrödingergleichung in drei Bereichen (I), (II) und (III) an!*

(ii) *Welche Bedingungen muss die Lösung bei $q = 0$, $q = q_0$ und $q \to \infty$ erfüllen?*

(iii) *Berechnen Sie die Energieeigenwerte!*

(iv) *Welche Bedingung muss das Potential, bzw. V_0 und q erfüllen, damit mindestens ein gebundener Zustand existiert?*

Lösung:

(i) Bevor wir mit der Berechnung der Wellenfunktion in den drei Bereichen beginnen, können wir bereits feststellen, dass die Wellenfunktion im Bereich (I) aufgrund des unendlich hohen Potentials verschwinden muss. Wir halten deshalb fest

$$\Psi_I(q) = 0 \qquad \text{für} \quad q \leq 0$$

Nun können wir für die Bereiche (II) und (III) die Schrödingergleichung aufschreiben. Es ist

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}\Psi(q) + (E - V)\Psi(q) = 0$$

für eine allgemeine Wellenfunktion Ψ. Nun verschwindet das Potentials lediglich im Bereich (III), so dass wir als allgemeine Lösung für den Bereich (II) zunächst ansetzen können

$$\begin{aligned} \Psi''_{II}(q) + k^2\Psi_{II}(q) = 0 \qquad &\text{mit} \qquad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \\ \text{daher} \qquad &\Psi_{II}(q) = A\sin kq + B\cos kq \end{aligned}$$

Darüber hinaus können wir für den Bereich (III) einen Ansatz finden und dabei gleich benutzen, dass wir lediglich normierbare Lösungen suchen. Es ist

$$\begin{aligned} \Psi''_{III}(q) - \kappa^2\Psi_{III}(q) = 0 \qquad &\text{mit} \qquad \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \\ &\Psi_{III}(q) = Ce^{-\kappa q} \end{aligned}$$

Damit sind allgemeine Ansätze gefunden.

(ii) Für $q = 0$ muss Ψ stetig sein, wobei die Stetigkeit der Ableitung aufgrund des unendlichen Sprunges des Potentials nicht erfüllt sein muss. Es ist daher

$$\Psi_I(q = 0) = \Psi_{II}(q = 0) = 0 \qquad \Rightarrow \quad B = 0$$

Somit konnte bereits ein erster Koeffizient ermittelt werden. Darüber hinaus sehen wir, dass für $q = q_0$ sowohl die Wellenfunktion Ψ als auch die Ableitung Ψ' stetig sein müssen. Damit folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} A\sin kq_0 &= Ce^{-\kappa q_0} \\ kA\cos kq_0 &= -\kappa Ce^{-\kappa q_0} \end{aligned}$$

Diese beiden Gleichungen kann man nun durcheinander teilen, um so den Koeffizienten A zu eliminieren. Wir erhalten damit eine Gleichung, durch die die Energieeigenwerte berechnet werden können

$$\frac{1}{k}\tan kq_0 = -\frac{1}{\kappa} \qquad \Rightarrow \qquad \cot kq_0 = -\frac{\kappa}{k}$$

Da die eingeführten Größen k und κ jeweils von der Energie E abhängen, stellt die eben hergeleitete Gleichung also eine Bedingung an Energieeigenzustände des Systems.
Es bleiben die Koeffizienten A und C zu bestimmen. Dazu betrachten wir das asymptotische Verhalten $q \to 0$. Die Wellenfunktion muss genügend schnell ver-

schwinden, um Normierbarkeit zu garantieren. Aus der Normierbarkeit folgern wir

$$\int_0^{q_0} AA^* \sin^2 kq \, dq + \int_{q_0}^{\infty} CC^* e^{-2\kappa q} \, dq \stackrel{!}{=} 1$$

Definiert man den Koeffizienten C als $C = A \sin kq_0 \, e^{\kappa q_0}$ kann man die Normierbarkeitsbedingung wie folgt umformen

$$AA^* \left[\int_0^{q_0} \sin^2 kq \, dq + \frac{\sin^2 kq_0}{e^{-2\kappa q_0}} \int_{q_0}^{\infty} e^{-2\kappa q} \, dq \right] = 1$$

Bis auf eine unphysikalische Phase kann also A bestimmt werden

$$\begin{aligned} AA^* \left[\frac{q_0}{2} - \frac{\sin 2kq_0}{4k} + \frac{\sin^2 kq_0}{e^{-2\kappa q_0}} \frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa q_0} \right] &= 1 \\ AA^* \left[\frac{q_0}{2} + \frac{\sin^2 kq_0}{2\kappa} - \frac{\sin 2kq_0}{2k} \right] &= 1 \end{aligned}$$

Somit ist auch C determiniert.

(iii) Zur Bestimmung der Energieeigenwerte benutzen wir die bereits hergeleitete Gleichung

$$\cot kq_0 = -\frac{\kappa}{k}$$

Diese Gleichung soll im Folgenden etwas umgeformt werden

$$\cot^2 kq_0 = \frac{1}{\sin^2 kq_0} - 1 = \frac{\kappa^2}{k^2} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{1}{\sin^2 kq_0} = \frac{\kappa^2}{k^2} + 1$$

Damit sehen wir nun, dass gilt

$$\sin^2 kq_0 = \frac{V_0 + E}{V_0} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{q_0^2 V_0} k^2 q_0^2$$

Demnach ist

$$\sin kq_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mq_0^2 V_0}} \, kq_0$$

Lösungen existieren also nur, sofern es Schnittpunkte des Sinus der linken Seite der Gleichung mit der linearen Funktion derrechten Seite der Gleichung existieren.

(iv) Für die Existenz mindestens eines gebundenen Zustandes muss mindestens ein Schnittpunkt existieren. Demnach ist insbesondere der Anstieg der linearen Funktion zu betrachten. Dieser ist

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mq_0^2V_0}}$$

In Teil (ii) haben wir gesehen, dass der Cotangens des Produktes qk_0 negativ sein muss, da

$$\cot kq_0 = -\frac{\kappa}{k} \leq 0$$

gelten muss. Daraus können wir schlussfolgern, dass das Produkt $kq_0 \leq \pi/2$ erfüllen muss. Demnach gilt für den Anstieg der Geraden

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mq_0^2V_0}} < \frac{1}{\frac{\pi}{2}} = \frac{2}{\pi}$$

was die gesuchte Bedingung liefert.

Aufgabe 4 [$\sim$ 10 min]
Ein starrer Rotator mit Trägeitsmoment I wird durch den Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{1}{2I}L^2$$

beshcrieben. L^2 ist das Betragsquadrat des Drehimpulsoperators.

(i) *Welche Werte kann die Energie des Systems annehmen und wie ist der Entartungsgrad der Energieeigenwerte?*

(ii) *Der Rotator besitze nun ein magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}$. In einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ führt das zu einem Wechselwirkungsterm*

$$H_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos(\theta).$$

H_1 soll als Störung behandelt werden. Berechnen Sie die erste nichtverschwindende Korrektur für die Grundzustandsenergie des Rotators.
Tipp: Es gilt für die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$:
$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$.

Lösung:

(i) Eigenfunktionen vom Hamiltonoperator sind die Kugelflächenfunktionen Y_{lm}. Damit ergibt sich für die Energieeigenwerte:

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

Da zu jedem l-Wert $2l+1$ m-Werte möglich sind, ist der Energieeigenwert E_l auch $(2l+1)$-fach entartet.

(ii) Der Grundzustand Y_{00} mit Energie $E_0 = 0$ ist *nicht* entartet. Unsere einfache Störungstheorie kann also angewendet werden. Die Energiekorrektur erster Ordnung lautet damit

$$\Delta_1 = \int d\Omega Y_{00}^* H_1 Y_{00} = -\mu B \int d\Omega \frac{\cos(\theta)}{\sqrt{4\pi}} Y_{00} = -\frac{\mu B}{\sqrt{3}} \underbrace{\int d\Omega Y_{10}^* Y_{00}}_{=0 \text{ Orthogonalität}} = 0$$

und verschwindet damit. Die Energiekorrektur zweiter Ordnung jedoch nicht. Sie lautet:

$$\begin{aligned}
\Delta_2 &= \sum_{(l,m)\neq(0,0)} \frac{|\langle l,m|H_1|0,0\rangle|^2}{E_0 - E_l} = \sum_{(l,m)\neq(0,0)} \frac{1}{-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}} |\langle l,m|H_1|0,0\rangle|^2 \\
&= \sum_{(l,m)\neq(0,0)} -\frac{2I}{l(l+1)\hbar^2} \left| \int d\Omega Y_{lm}^* (-\mu B \cos(\theta)) Y_{00} \right|^2 \\
&= \sum_{(l,m)\neq(0,0)} -\frac{2I\mu^2 B^2}{l(l+1)\hbar^2} \left| \int d\Omega Y_{lm}^* \frac{\cos(\theta))}{\sqrt{4\pi}} \right|^2 \\
&= \sum_{(l,m)\neq(0,0)} -\frac{2I\mu^2 B^2}{l(l+1)\hbar^2} \frac{1}{3} \underbrace{\left| \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{10} \right|^2}_{=\delta_{l1}\delta_{m0}} = -\frac{\mu^2 B^2 I}{3\hbar^2}
\end{aligned}$$

Aufgabe 5 *Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m, das sich frei in einer Dimension auf einem Kreis mit Umfang L bewegen kann, beispielsweise eine Kugel auf einem Ring.*

(i) Zeigen Sie, dass stationäre Zustände als

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x/L}$$

geschrieben werden können, mit $-L/2 < x < L/2$ und $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ und die erlaubten Energien dazu

$$E_n = \frac{2}{m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

sinid. Beachten Sie, dass mit Ausnahme des Grundzustandes alle Energiezustände doppelt entartet sind.

(ii) Nun führen wir eine Störung ein mit

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}$$

wobei wir fordern, dass $a \ll L$. Dadurch wird an die Position $x = 0$ eine kleine Grube im Potential eingefügt. Berechnen Sie die Energiekorrektur in erster Ordnung $E_n^{(1)}$

(iii) Was sind "gute" Linearkombinationen von Ψ_n und Ψ_{-n} für dieses Problem?

Lösung:

(i) Zur Lösung dieses Problem betrachten wir die Schrödingergleichung mit der Ortsvariablen x entlang des Rings

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi = E\Psi \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{d^2}{dx^2}\Psi = -k^2\Psi$$

wobei wir die neue Größe $k^2 = 2mE/\hbar$ eingeführt haben. Die Lösung dieser Differentialgleichung ist offensichtlich

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

wobei wir allerdings die Periodizitätsbedingung $\Psi(x+L) = \Psi(x)$ beachten müssen. Nutzt man diese Bedingung, dann findet man

$$Ae^{ikx}e^{ikL} + Be^{-ikx}e^{-ikL} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

was für alle x erfüllt sein muss. Insbesondere gilt diese Gleichung also für $x = 0$, so dass wir schlussfolgern können

$$Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = A + B$$

Darüber hinaus muss die Gleichung auch für $x = \pi/2k$ erfüllt sein, so dass wir folgendes erhalten

$$Ae^{i\pi/2}e^{ikL} + Be^{-i\pi/2}e^{-ikL} = Ae^{i\pi/2} + Be^{-i\pi/2} \qquad \text{bzw.} \qquad Ae^{ikL} - Be^{-ikL} = A - B$$

Addiert man nun die beiden aus der Periodizitätsbedingung abgeleiteten Gleichungen, dann erhält man

$$2Ae^{ikL} = 2A$$

so dass man entweder $A = 0$ schlussfolgern kann, oder $e^{ikL} = 1$ erfüllt sein muss, so dass $kL = 2n\pi$ gelten muss. Sollte allerdings $A = 0$, dann würde analog gelten

$$Be^{-ikL} = B$$

was auf die gleiche Schlussfolgerung führt. Demnach gibt es für jede Position zwei Lösungen

$$\Psi_n^+(x) = Ae^{i(2n\pi x/L)} \qquad \text{und} \qquad \Psi_n^+(-) = Be^{-i(2n\pi x/L)}$$

Normalisierung dieser Gleichungen führt auf $A = B = 1/\sqrt{L}$, so dass wir als Lßoungen finden

$$\Psi_n^\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm i(2n\pi x/L} \qquad \text{mit} \qquad E_n = \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{mL^2}$$

(ii) Um die Energiekorrekturen erster Ordnung durch die Störung zu ermitteln, muss zunächst folgende Matrix berechnet werden

$$\begin{pmatrix} \langle\Psi_n|H'|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_n|H'|\Psi_{-n}\rangle \\ \langle\Psi_{-n}|H'|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_{-n}|H'|\Psi_{-n}\rangle \end{pmatrix}$$

wobei H' der Störoperator ist und $\Psi_{\pm n}$ die eben berechneten Eigenfunktionen beschreiben. Bei dieser Berechnung nutzen wir, dass $a \ll L$ ist

$$\langle \Psi_n | H' | \Psi_n \rangle = -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-L/2}^{L/2} e^{-x^2/a^2}\, dx \approx -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2}\, dx = -\frac{V_0}{L} a\sqrt{\pi}$$

$$\langle \Psi_{-n} | H' | \Psi_{-n} \rangle = -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-L/2}^{L/2} e^{-x^2/a^2}\, dx \approx -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2}\, dx = -\frac{V_0}{L} a\sqrt{\pi}$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_n | H' | \Psi_{-n} \rangle &= -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-L/2}^{L/2} e^{-x^2/a^2} e^{-4\pi n i x/L}\, dx \approx -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2 - 4\pi n i x/L}\, dx \\ &= -\frac{V_0}{L} a\sqrt{\pi} e^{-(2\pi n a/L)^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{-n} | H' | \Psi_n \rangle &= -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-L/2}^{L/2} e^{-x^2/a^2} e^{-4\pi n i x/L}\, dx \approx -\frac{V_0}{L} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2 - 4\pi n i x/L}\, dx \\ &= -\frac{V_0}{L} a\sqrt{\pi} e^{-(2\pi n a/L)^2}\end{aligned}$$

Nun gilt es die Eigenwerte dieser Matrix zu bestimmen. Für eine 2×2 Matrix lauten die Eigenwerte ganz allgemein

$$\det \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{pmatrix} = ad - (a+d)\lambda + \lambda^2 - bc \stackrel{!}{=} 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{a-d}{2}\right]^2 + bc}$$

Demnach sind die Energiekorrekturen zur ersten Ordnung gerade

$$\begin{aligned}E_{\pm}^{(1)} &= \langle \Psi_n | H' | \Psi_n \rangle \pm |\, \langle \Psi_n | H' | \Psi_{-n} \rangle \,| \\ &= -\sqrt{\pi} \frac{V_0 a}{L} \left(1 \mp e^{-(2\pi n a/L)^2} \right)\end{aligned}$$

(iii) Zur Lösung dieser Aufgabe suchen wir die Eigenvektoren der bereits berechneten Matrix

$$\begin{pmatrix} \langle \Psi_n | H' | \Psi_n \rangle & \langle \Psi_n | H' | \Psi_{-n} \rangle \\ \langle \Psi_{-n} | H' | \Psi_n \rangle & \langle \Psi_{-n} | H' | \Psi_{-n} \rangle \end{pmatrix} = -\frac{V_0}{L} a\sqrt{\pi} \begin{pmatrix} 1 & e^{-(2\pi n a/L)^2} \\ e^{-(2\pi n a/L)^2} & 1 \end{pmatrix}$$

zu den gefundenen Energieeigenwerten $E_{\pm}^{(1)}$. Man sieht schnell ein, dass die Eigenvektoren $\Psi_{\pm}$ wie folgt aus den Eigenfunktionen $\Psi_{\pm}$ gebildet werden können

$$\begin{aligned}
\Psi_{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{n} - \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{-n} = \ldots = i\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) \\
\Psi_{-} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{n} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{-n} = \ldots = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)
\end{aligned}$$