

Theoretische Quantenmechanik

Klausurvorbereitende Aufgaben

von Leo Maximov & Annika Schott

10.08.2018

Inhaltsverzeichnis

1 Wellen-Mechanik & Schrödinger Gleichung	3
1.1 Wiederholte Messungen	3
1.2 Unschärferelation	4
2 Eindimensionale Potentialprobleme	4
2.1 Harmonischer Oszillator	4
2.1.1 Harmonischer Oszillator 1	4
2.1.2 Harmonischer Oszillator 2	5
2.2 Wahrscheinlichkeitsdichte	6
2.3 Potentialtopf	6
2.3.1 Potentialtopf 1	6
2.3.2 Potentialtopf 2	7
2.3.3 Bosonen in Potentialtopf	7
2.4 Allgemeines Teilchen im Potential	8
3 Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik	9
3.1 Eigenwertproblem	9
3.2 Spektralzerlegung einer Matrix	11
3.3 Spins	11
3.3.1 Spinzustände	11
3.3.2 Unpolarisiertes Licht	13
3.4 Bra und Ket	14
3.5 Spin 1/2	15
3.6 Lineare Algebra	15
3.6.1 Matrixeigenschaften	15
3.6.2 Glaubersche Formel	17
3.7 Fouriertransformation	17
4 Dreidimensionale Probleme	19
4.1 Das Wasserstoffatom	19
4.1.1 Stark-Effekt	19
4.1.2 Überlagerung von Wasserstoffeigenzuständen	21
4.1.3 Bahndrehimpuls	22
4.2 Spinpräzession im Heisenbergbild	22

5	Quantenmechanische Störungsrechnung	23
5.1	Spin-Spin-Kopplung	23
5.2	Diagnagnetismus	25
5.3	Harmonischer Oszillator mit harmonischer Störung	26

1 Wellen-Mechanik & Schrödinger Gleichung

1.1 Wiederholte Messungen

Der Hamiltonoperator \hat{H} sei zeitunabhängig und habe Eigenvektoren $\{|\nu\rangle\}$ mit nicht entarteten Eigenwerten E_ν . Die Observable \hat{A} habe Eigenvektoren $\{|m\rangle\}$ mit nicht entarteten Eigenwerten a_m .

a) Geben Sie die Spektraldarstellungen von \hat{H} und \hat{A} sowie diejenige des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ an.

In der Spektraldarstellung sitzen alle Matrixelemente auf der Diagonalen der Matrix. In BraKet Schreibweise ergibt sich:

$$\hat{O} = \sum_i \text{Eigenwert}_i |E\nu_i\rangle\langle E\nu_i| \quad (1)$$

Dabei steht $E\nu$ für Eigenvektoren und wir summieren über die i -ten Matrixelemente.

Lösung:

$$\hat{H} = \sum_\nu E_\nu |\nu\rangle\langle\nu|, \quad \hat{A} = \sum_m a_m |m\rangle\langle m|, \quad \hat{U}(t, t_0) = \sum_\nu \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_\nu\right] |\nu\rangle\langle\nu|$$

b) Zunächst sei das betrachtete System im Zustand $|\nu\rangle$. Zum Zeitpunkt t_0 wird \hat{A} gemessen. Bestimmen Sie den Erwartungswert von \hat{A} und die Wahrscheinlichkeit, den Wert a_m zu messen.

Lösung: *Der Erwartungswert ist gegeben durch:*

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\nu|\hat{A}|\nu\rangle = \sum_m a_m \langle\nu|m\rangle\langle m|\nu\rangle = \sum_m a_m \underbrace{|\langle\nu|m\rangle|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeit } P}$$

c) Bei der ersten Messung habe sich a_m ergeben. In welchem Zustand befindet sich das System unmittelbar nach der Messung? Geben Sie mit Hilfe der Spektraldarstellung von \hat{H} den Zustand für alle späteren Zeiten an.

Was ergibt sich speziell für $|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\nu_1\rangle + |\nu_2\rangle)$?

Lösung: *Unmittelbar nach der Messung ist das System im Zustand $|m\rangle$. Für die alle späteren Zeitpunkte ergibt sich:*

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |m\rangle = \sum_\nu \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_\nu\right] |\nu\rangle\langle\nu|m\rangle$$

Es folgt also für den Zustand $|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\nu_1\rangle + |\nu_2\rangle)$ durch einsetzen:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_{\nu_1}\right) |\nu_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_{\nu_2}\right) |\nu_2\rangle$$

d) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit, bei einer weiteren Messung zu einem späteren Zeitpunkt t , wieder den Wert a_m zu finden.

Lösung: *Man projiziert, wie schon in Aufgabe b) den alten auf den neuen Zustand und erhält:*

$$|\langle m|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \sum_\nu \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_\nu\right] \langle m|\nu\rangle\langle\nu|m\rangle \right|^2 = \left| \sum_\nu \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) E_\nu\right] |\langle\nu|m\rangle|^2 \right|^2,$$

1.2 Unschärferelation

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Proton und einem Elektron. Das Proton kann als ruhend angesehen werden, da es aufgrund seiner um den Faktor 1834 größeren Masse eine sehr viel größere Trägheit hat. Auf das Elektron wirkt die anziehende Kraft des Protons. Nehmen Sie klassisch an, dass das Elektron auf einer Bahn um den Kern kreist. Zeigen Sie mit Hilfe der Unschärferelation, dass für das Elektron ein endliches Energieminimum existiert und schätzen Sie den minimalen Wert a_0 des Bahnradius a ab.

Lösung: Die Hamiltonfunktion lautet

$$H = E_{\text{kin}} + V = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E$$

Die untere Grenze für den Bahnradius ist gegeben durch die Unschärferelation $\Delta q \Delta p > \hbar/2$. Damit ist

$$a \geq \Delta r, \quad p \geq \Delta p$$

und wir können abschätzen:

$$ap \geq \frac{\hbar}{2} \iff p \geq \frac{\hbar}{2a}$$

Für die zugehörige Energie gilt dann:

$$\begin{aligned} E = E(a) &= \frac{\hbar^2}{8ma^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \\ \left. \frac{dE}{da} \right|_{a_0} &= -\frac{\hbar^2}{4ma_0^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} = 0 \\ \implies a_0 &= \frac{1}{4} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \end{aligned}$$

Die vollständig quantenmechanische Berechnung ergibt als untere Grenze für den Bahnradius den Bohr'schen Radius

$$a_B = 4a_0$$

Mit diesem kleinsten Radius ist ein Energieminimum verbunden.

2 Eindimensionale Potentialprobleme

2.1 Harmonischer Oszillator

2.1.1 Harmonischer Oszillator 1

Zeigen Sie, dass

$$\varphi(q) = \alpha (2q^2 - 1) e^{-\frac{q^2}{2}}, \quad q = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

eine Eigenfunktion des linearen harmonischen Oszillators ist und geben Sie den zugehörigen Energieeigenwert an.

Lösung: Der Hamilton-Operator lautet:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Es ist ferner

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dq^2} \implies H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \\ \frac{d}{dq} \varphi(q) &= \alpha (4q - 2q^3 + q) e^{-\frac{q^2}{2}} \\ \frac{d^2}{dq^2} \varphi(q) &= \alpha (5 - 6q^2 - 5q^2 + 2q^4) e^{-\frac{q^2}{2}} \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
 -\left(\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right)\varphi(q) &= \alpha(-5 + 11q^2 - 2q^4 + 2q^4 - q^2)e^{-\frac{q^2}{2}} \\
 &= 5\alpha(2q^2 - 1)e^{-\frac{q^2}{2}} = 5\varphi(q)
 \end{aligned}$$

sowie

$$H\varphi(q) = \frac{5}{2}\hbar\omega\varphi(q)$$

$\varphi(q)$ ist also Eigenfunktion zum Eigenwert $(5/2)\hbar\omega$

2.1.2 Harmonischer Oszillator 2

Betrachten Sie ein geladenes Teilchen im Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators. Nehmen Sie an, dass nun ein elektrisches Feld eingeschaltet wird, sodass die potentielle Energie um den Betrag $\hat{H}' = -qEx$ angehoben wird.

a) Die Schrödingergleichung lässt sich in diesem Fall durch einen Variablenwechsel direkt lösen: $y := x - (qE/m\omega^2)$. Bestimmen Sie die exakten Energieniveaus.

Lösung:

Aufstellen der Schrödingergleichung und lösen mit dem Hinweis bringt folgendes Ergebnis:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - qEx\right)\psi = E\psi \quad (2)$$

Mit dem vorgeschlagenen Variablenwechsel gilt für den potentiellen Energieteil:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - qEx\right) &= \frac{1}{2}m\omega^2\left[y + \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)\right]^2 - qE\left[y + \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)\right] \\
 &= \frac{1}{2}m\omega^2y^2 + m\omega^2y\frac{qE}{m\omega^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{(qE)^2}{m^2\omega^4} - qEy - \frac{(qE)^2}{m\omega^2} = \frac{1}{2}m\omega^2y^2 - \frac{1}{2}\frac{(qE)^2}{m\omega^2}
 \end{aligned}$$

Es folgt für die Schrödingergleichung und somit die Energieeigenwerte:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx'^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2\psi &= \left[E + \frac{1}{2}\frac{(qE)^2}{m\omega^2}\right]\psi \\
 E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}\frac{(qE)^2}{m\omega^2}
 \end{aligned}$$

b) Berechnen Sie die Korrekturen der Energieniveaus in 1. und 2. Ordnung.

Lösung:

Da wir den Operator \hat{x} als Kombination von Auf- und Absteigeoperator schreiben können gilt für die Korrektur erster Ordnung:

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle = -qE\langle n|x|n\rangle = 0$$

Folglich müssen wir die Korrektur 2. Ordnung auch berechnen. Diese entspricht genau der Abweichung in den Energieeigenwerten aus a), was durch die folgende Rechnung belegt wird:

$$E_n^2 = (qE)^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|x|n\rangle|^2}{(n-m)\hbar\omega} = \frac{(qE)^2}{\hbar\omega} \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m \neq n} \frac{[\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}]^2}{(n-m)} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(qE)^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{[(n+1)\delta_{m,n+1} + n\delta_{m,n-1}]}{(n-m)} = \frac{(qE)^2}{2m\omega^2} \left[\frac{(n+1)}{n-(n+1)} + \frac{n}{n-(n-1)} \right] = \\
&= \frac{(qE)^2}{2m\omega^2} [-(n+1) + n] = -\frac{(qE)^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

In der ersten Zeile wurde verwendet, dass nur die Zustände von Interesse sind für die gilt, dass $m=n+1$, respektive $m=n-1$ ist. Alle anderen Projektionen sind per Definition null. Ferner lässt sich dies in einem Kronecker-Delta ausdrücken.

In der zweiten Zeile verschwindet das Summenzeichen, da wir bereits wissen, dass $m \neq n$ ist.

2.2 Wahrscheinlichkeitsdichte

Der Parameter x stelle die Position eines Teilchens dar. Kann der Erwartungswert von x jemals gleich einem Wert sein, für den die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x)$ null ist? Nennen Sie ggf. ein geeignetes Beispiel hierfür.

Lösung: Ja. Wir betrachten z.B. ein Teilchen in einem eindimensionalen Kasten der Länge d . Das Teilchen befinde sich auf der x -Achse irgendwo in dem Intervall $0 \leq x \leq d$. Die Wellenfunktion eines Teilchens in dem Zustand $n = 2$ ist gegeben durch

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(2\pi \frac{x}{d}\right)$$

Der Erwartungswert von x ist $\langle x \rangle = d/2$, und die Wahrscheinlichkeitsdichte bei $d/2$ ist $P(d/2) = 0$.

2.3 Potentialtopf

2.3.1 Potentialtopf 1

Ein Teilchen in einem unendlich tiefen Potenzialtopf hat die anfängliche Wellenfunktion

$$\psi(x, 0) = A \sin^3(\pi x/a), \quad 0 \leq x \leq a$$

Bestimmen Sie A , finden Sie $\psi(x, t)$ und berechnen Sie $\langle x \rangle$ als Funktion der Zeit.

Lösung: Wir ersetzen zunächst die Anfangsbedingung $\psi(x, 0)$ durch stationäre Zustände des unendlich hohen Potenzialtopfs. Dazu verwenden wir das Additionstheorem

$$\sin(3\theta) = 3\sin(\theta) - 4\sin^3(\theta)$$

Mit diesem gelingt es, die dritte Potenz des Sinus in der Anfangsbedingung durch einfache Potenzen des Sinus zu schreiben:

$$\sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{3}{4} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{1}{4} \left(3 \frac{\pi x}{a}\right)$$

Damit lautet die Anfangsbedingung:

$$\psi(x, 0) = A \sqrt{\frac{a}{2}} \left[\frac{3}{4} \psi_1(x) - \frac{1}{2} \psi_3(x) \right]$$

wobei ψ_1 und ψ_3 der erste bzw. der dritte stationäre Zustand des Teilchens im unendlich hohen Potenzialtopf sind. Die Normierungskonstante erhält man durch Berechnung des Betragsquadrats von ψ . Zu beachten ist hierbei, dass die Eigenzustände Teilchens im unendlich hohen Potenzialtopf orthonormal sind und Mischterme daher nicht berücksichtigt werden müssen:

$$|\psi|^2 = |A|^2 \frac{a}{2} \left(\frac{9}{16} + \frac{1}{16} \right) = \frac{5a}{16} |A|^2 = 1$$

Damit ist die Normierungskonstante $A = 4/\sqrt{5a}$, und wir können das zeitliche Verhalten von ψ bestimmen:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{10}} \left[2\psi_1(x)e^{iEt/\hbar} - \psi_3(x)e^{iEt/\hbar} \right]$$

Der Erwartungswert von x ist dann:

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty x |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{9}{\sqrt{10}} \langle x \rangle_1 + \frac{1}{\sqrt{10}} \langle x \rangle_3 - \frac{3}{5} \cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar} t\right) \int_0^\infty x \psi_1(x) \psi_3(x) dx$$

Mit $\langle x \rangle_n$ bezeichnen wir den Erwartungswert bezüglich des n -ten Eigenzustands. Dieser ist für alle n identisch gleich $a/2$, wovon man sich leicht überzeugen kann.

2.3.2 Potentialtopf 2

Der Eigenzustand eines Elektrons im Kasten der Breite a mit unendlich hohen Wänden wird durch die Wellengleichung

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{5}} \psi_{1,0}(x) \psi_1(t) + \sqrt{\frac{4}{5}} \psi_{2,0}(x) \psi_2(t)$$

beschrieben. Bestimmen Sie unter der Annahme einer harmonische Anregung

- die Gesamtwellenfunktion (zeitabhängiger und zeitunabhängiger Anteil),
- daraus die Eigenwerte für die Energie,
- den Mittelwert der Energie.

Lösung:

a)

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{5}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) e^{-iEt/\hbar} + \sqrt{\frac{4}{5}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right) e^{-i2Et/\hbar}$$

b) $H\psi_n = E_n\psi_n$. Für die normierten Eigenfunktionen

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

ergeben sich die Eigenwerte

$$\langle \psi_n^* | H | \psi_n \rangle = E_n \langle \psi_n^* | \psi_n \rangle$$

Damit erhalten wir

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_0 a^2} \langle \psi_n^* | \psi_n \rangle$$

Es ist also:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8m_0 a^2}, \quad \text{und} \quad E_2 = 4E_1 = 4 \frac{\hbar^2}{8m_0 a^2}$$

c)

$$\langle E \rangle = \frac{1}{3} E_1 + \frac{4}{3} E_2 = 3,4 \cdot E_1$$

2.3.3 Bosonen in Potentialtopf

Zwei identische Bosonen werden in einem unendlich hohen Potenzialtopf mit Wänden bei $x = 0$ und $x = a$ platziert. Ihr Zustand sei das symmetrische Produkt der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen

$$|n_1 n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle)$$

Die Ein-Teilchen-Wellenfunktion in der Ortsdarstellung lautet:

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Über ein Potenzial erfahren die beiden Teilchen eine schwache Wechselwirkung

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1, x_2)$$

mit konstantem V_0 . Berechnen Sie die Grundzustandsenergie in erster Ordnung der Störungstheorie.

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin(bx)dx = \frac{3}{8}x - \frac{1}{4b} \sin(2bx) + \frac{1}{32} \sin(4bx)$$

Lösung: Die Energiekorrektur in erster Ordnung der Störungstheorie ist:

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \langle 00 | -aV_0\delta(x_1, x_2) | 00 \rangle \\ &= -a \int_0^a \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right)^2 V_0 \sin^2\left(\frac{n_1\pi x_1}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n_2\pi x_2}{a}\right) \delta(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a \sin^4\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \end{aligned}$$

Mit dem Hinweis ergibt sich

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= -\frac{4V_0}{a} \left[\frac{3}{8}x - \frac{a}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) + \frac{1}{32} \sin\left(\frac{4n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \\ &= -\frac{4V_0}{a} \frac{3a}{8} = -\frac{3V_0}{2} \end{aligned}$$

Die Energie in erster Ordnung der Störungstheorie ist

$$E_0 \approx E_{n_1}^0 + E_{n_2}^0 - \frac{3V_0}{2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} (1^2 + 1^2) - \frac{3V_0}{2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} - \frac{3V_0}{2}$$

2.4 Allgemeines Teilchen im Potential

Aufgabe: Betrachten Sie ein Teilchen in einer Dimension, das durch den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

beschrieben sei. Beweisen Sie folgende Relation:

$$\sum_{a'} |\langle a | \hat{x} | a' \rangle|^2 (E_{a'} - E_a) = \frac{\hbar^2}{2m}$$

indem Sie $[[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}], \hat{x}]$ berechnen. Dabei bezeichne $|a\rangle$ den Eigenzustand von $\hat{\mathcal{H}}$ zur Eigenenergie E_a .

Lösung:

$$[[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}], \hat{x}] = \left[\frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{x}], \hat{x} \right] = -\frac{i\hbar}{m} [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{-\hbar^2}{m}$$

$$\langle a | [[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}], \hat{x}] | a \rangle = \langle a | \hat{\mathcal{H}}\hat{x}^2 - 2\hat{x}\hat{\mathcal{H}}\hat{x} + \hat{x}^2\hat{\mathcal{H}} | a \rangle = \langle a | 2E_a\hat{x}^2 - 2\hat{x}\hat{\mathcal{H}}\hat{x} | a \rangle =$$

mit $\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1$:

$$\begin{aligned}
 &= 2 \sum_{a'} \langle a | E_a \hat{x} | a' \rangle \langle a' | \hat{x} | a \rangle - 2 \sum_{a'} \underbrace{\langle a | \hat{x} \hat{\mathcal{H}} | a' \rangle}_{\hat{\mathcal{H}} \langle a' | = E_{a'} \langle a' |} \langle a' | \hat{x} | a \rangle = \\
 &= 2 \sum_{a'} \langle a | \hat{x} | a' \rangle \langle a' | \hat{x} | a \rangle (E_a - E_{a'}) = 2 \sum_{a'} |\langle a | \hat{x} | a' \rangle|^2 (E_a - E_{a'})
 \end{aligned}$$

3 Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik

3.1 Eigenwertproblem

Aufgabe: Gegeben sei ein normierter Vektor $n \in \mathbb{R}^3$, der durch die im Bild 1 gezeigten Winkel α und β charakterisiert ist.

Konstruieren Sie einen Eigenvektor des Operators $\hat{S} \cdot n$, den wir im Folgenden mit $|S \cdot n, +\rangle$ bezeichnen, mit der Eigenschaft:

$$\hat{S} \cdot n |S \cdot n, +\rangle = \frac{\hbar}{2} |S \cdot n, +\rangle.$$

Drücken Sie den Vektor als Linearkombination der Basisvektoren $|+\rangle$ und $|-\rangle$ des Spin-1/2-Systems mit Spin-Operator $\hat{S} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z)$ aus. Dabei ist $\hat{S}^\mu = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}^\mu$ durch die Paulimatrizen $\hat{\sigma}^\mu$, für $\mu = x, y, z$ gegeben.

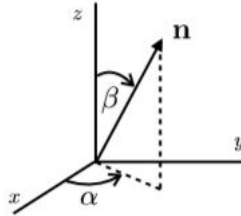


Abbildung 1

Hinweis: Die Lösung ist:

$$|S \cdot n, +\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha} |-\rangle$$

Behandeln Sie das Problem jedoch als Eigenwertproblem (es genügt nicht zu verifizieren, dass die Lösung die Eigenwertglg. erfüllt.) Es ist nicht nötig Rotationsoperatoren zu verwenden.

Lösung:

$$\vec{n} = (\cos(\alpha) \sin(\beta), \sin(\alpha) \sin(\beta), \cos(\beta))$$

$$\begin{aligned}
 \frac{2}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{n} &= \hat{\sigma}^x \cos(\alpha) \sin(\beta) + \hat{\sigma}^y \sin(\alpha) \sin(\beta) + \hat{\sigma}^z \cos(\beta) \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\beta) & \cos(\alpha) \sin(\beta) - i \sin(\alpha) \sin(\beta) \\ \cos(\alpha) \sin(\beta) + i \sin(\alpha) \sin(\beta) & -\cos(\beta) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(\beta) & \sin(\beta)e^{-i\alpha} \\ \sin(\beta)e^{i\alpha} & -\cos(\beta) \end{pmatrix}$$

Wir suchen Eigenvektor zu Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ von $\hat{S} \cdot \vec{n}$. Wir schreiben diesen als:

$$|\vec{S} \cdot \vec{n}, +\rangle = \Psi_+ |+\rangle + \Psi_- |-\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}$$

Mit

$$\begin{aligned} \hat{S} \cdot \vec{n} |\vec{S} \cdot \vec{n}, +\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\vec{S} \cdot \vec{n}, +\rangle \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \cos(\beta) - 1 & \sin(\beta)e^{-i\alpha} \\ \sin(\beta)e^{i\alpha} & -1 - \cos(\beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} &= 0 \end{aligned}$$

D.h.:

$$\Psi_+ \frac{\sin(\beta)e^{-i\alpha}}{\cos(\beta) - 1} \Psi_- = 0$$

Bzw:

$$\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \frac{\sin(\beta)e^{-i\alpha}}{1 - \cos(\beta)} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} |\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2 = |\mathcal{N}|^2 \left(1 + \frac{\sin^2(\beta)}{(1 - \cos(\beta))^2} \right) = \\ |\mathcal{N}|^2 \frac{1 + \cos^2(\beta) - 2\cos(\beta) + \sin^2(\beta)}{(1 - \cos(\beta))^2} &= |\mathcal{N}|^2 \frac{2}{1 - \cos(\beta)} \\ \Rightarrow \mathcal{N} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \cos(\beta)} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sin(\beta)e^{-i\alpha} \cdot (1 - \cos(\beta))^{-1/2} \\ (1 - \cos(\beta))^{1/2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Nun gilt: $\beta \in [0, \pi] \rightarrow \sin(\beta/2) \geq 0, \cos(\beta/2) \geq 0$

$$\sin(\beta/2) = (\sin^2(\beta/2))^{1/2} = \left(\frac{1}{2}(1 - \cos(\beta)) \right)^{1/2}$$

$$\cos(\beta/2) = (1 - \sin^2(\beta/2))^{1/2} = \left(\frac{1}{2}(1 + \cos(\beta)) \right)^{1/2}$$

und : $\sin(\beta) \geq 0$.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sin(\beta)}{\sqrt{1 - \cos(\beta)}} = \left(\frac{\sin^2(\beta)}{2(1 - \cos(\beta))} \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \cos(\beta))}$$

D.h.:

$$\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) \end{pmatrix}$$

3.2 Spektralzerlegung einer Matrix

Betrachten Sie die folgende Matrix:

$$A = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 27 & 12 & -24 \\ 12 & 59 & 8 \\ -24 & 8 & 47 \end{pmatrix}$$

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte und die Eigenvektoren der Matrix.

Lösung:

Die Wurzeln des charakteristischen Polynoms sind die Eigenwerte. Man findet

$$\det(\lambda \mathcal{K} - A) = \lambda^3 - 19\lambda^2 + 99\lambda - 81$$

Mit den Eigenwerten $\lambda_1 = \lambda_2 = 9$ und $\lambda_3 = 1$. Somit erhält man die Eigenvektoren:

$$c_{(1)} = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad c_{(2)} = \frac{1}{\sqrt{35}} \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}, \quad c_{(3)} = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

(b) Wie lauten die Spektralprojektoren?

Lösung:

Der Spektralprojektor auf den Eigenraum von $\lambda = 9$ ist

$$P_9 = c_{(1)}c_{(1)}^\top + c_{(2)}c_{(2)}^\top = \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 5 & 3 & -6 \\ 3 & 13 & 2 \\ -6 & 2 & 10 \end{pmatrix}$$

und der Projektor auf den Eigenraum $\lambda = 1$ ist

$$P_1 = c_{(3)}c_{(3)}^\top = \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 9 & -3 & 6 \\ -3 & 1 & -2 \\ 6 & -2 & 4 \end{pmatrix}$$

(c) Überzeugen Sie sich, dass diese alle Eigenschaften von Spektralprojektoren erfüllen.

Lösung:

Die Spektralprojektoren sind offensichtlich hermitesch und haben die Eigenschaften:

$$P_{1,9}^2 = P_{1,9}, \quad P_1P_9 = P_9P_1 = 0, \quad P_1 + P_9 = I$$

(d) Berechnen Sie \sqrt{A} mithilfe der Spektralzerlegung.

Lösung:

Mit den Eigenwerten und Spektralprojektoren können wir eine beliebige Funktion der Matrix berechnen:

$$f(A) = f(9)P_{\lambda=9} + f(1)P_{\lambda=1}$$

Zum Beispiel ist

$$\sqrt{A} = 3P_9 + P_1 = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 12 & 3 & -6 \\ 3 & 20 & 2 \\ -6 & 2 & 17 \end{pmatrix}$$

3.3 Spins

3.3.1 Spinzustände

Betrachten Sie ein Spin-1/2 Teilchen im Zustand

$$\psi = A \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 2 \end{pmatrix}$$

a) Bestimmen Sie die Konstante A

$$1 = |A|^2(1 + 4 + 4) = 9|A|^2; \quad A = 1/3$$

b) Wenn Sie S_z an diesem Teilchen messen würden, welche Werte würden Sie dann erhalten, und welche Wahrscheinlichkeiten hätten diese? Was ist der Erwartungswert von S_z ?

Es ist möglich die Wellenfunktion ψ in eine Linearkombination von Spin-up und Spin-down Zuständen zu zerlegen.

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 2 \end{pmatrix} = (1 - 2i) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (1 - 2i)|\uparrow\rangle + 2|\downarrow\rangle = (1 - 2i)|+z\rangle + 2|-z\rangle \quad (3)$$

Um die Wahrscheinlichkeit zu erhalten müssen wir den alten auf den neuen Zustand projizieren. Allgemein gilt:

$$P_{\pm\hbar/2} = |\langle \pm z_{neu} | \psi_{alt} \rangle|^2 \quad (4)$$

Es gilt also für $+\hbar/2$:

$$P_{+\hbar/2} = |\langle +z | \psi \rangle|^2 \quad (5)$$

und $-\hbar/2$, respektive:

$$P_{-\hbar/2} = |\langle -z | \psi \rangle|^2 \quad (6)$$

Folglich ist $P_{+\hbar/2}$:

$$P_{+\hbar/2} = |\langle +z | \psi \rangle|^2 = |\langle +z | \cdot [(1 - 2i)|+z\rangle + 2|-z\rangle]|^2 = |1 - 2i|^2 = \frac{5}{9} \quad (7)$$

Da die Wahrscheinlichkeit insgesamt 1 sein muss, folgt $P_{-\hbar/2} = \frac{4}{9}$ automatisch. Der Erwartungswert kann wie bereits bekannt aus $\langle \psi | S_z | \psi \rangle$ errechnet werden. Interessanterweise erhält man dasselbe Ergebnis, wenn man die Wahrscheinlichkeiten mit den jeweiligen Wahrscheinlichkeiten multipliziert und anschließend addiert. Also:

$$\langle S_z \rangle = \frac{5\hbar}{9 \cdot 2} + \frac{4}{9} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{\hbar}{18}. \quad (8)$$

c) Für S_x und S_y ?

Analog geht man nun für S_x und S_y vor. Zu beachten ist, dass $|\pm x\rangle$ und $|\pm y\rangle$ als Linearkombination von $|\pm z\rangle$ darzustellen ist.

Es gilt für $|\pm x\rangle$:

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\pm +z\rangle \pm |\pm -z\rangle) \quad (9)$$

bzw. für $|\pm y\rangle$:

$$|\pm y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\pm +z\rangle \pm i|\pm -z\rangle) \quad (10)$$

Für die Wahrscheinlichkeiten erhält man analog zu b):

$$P_{+\hbar/2;x} = |\langle +x | \psi \rangle|^2 = \frac{13}{18}$$

$$P_{-\hbar/2;x} = |\langle -x | \psi \rangle|^2 = \frac{5}{18}$$

$$P_{+\hbar/2;y} = |\langle +y|\psi\rangle|^2 = \frac{17}{18}$$

$$P_{-\hbar/2;y} = |\langle -y|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{18}$$

Woraus folgt, dass die Erwartungswerte folgende Werte annehmen:

$$\langle S_x \rangle = \frac{13}{18} \frac{\hbar}{2} + \frac{5}{18} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{2\hbar}{9}$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{17}{18} \frac{\hbar}{2} + \frac{1}{18} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{4\hbar}{9}$$

3.3.2 Unpolarisiertes Licht

Aufgabe: Wir betrachten eine realistische Lichtquelle. Zur Vereinfachung sei der Lichtstrahl gemischt aus Photonen aus 2 Quellen, wobei jede Quelle Photonen in einem bestimmten Polarisationszustand $|\Psi_1\rangle$ bzw $|\Psi_2\rangle$ aussendet. Ein beliebiges Photon kommt mit Wahrscheinlichkeit p_i aus Quelle i , $\sum p_i = 1$, $i = 1, 2$.

a) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert für den Spin eines Photons aus diesem Strahl (als das über viele Photonen gemittelte Messergebnis) durch

$$p_1 \langle \Psi_1 | \hbar \hat{S} | \Psi_1 \rangle + p_2 \langle \Psi_2 | \hbar \hat{S} | \Psi_2 \rangle$$

gegeben ist.

Hinweis: Mit welcher Wahrscheinlichkeit ist ein einzelnes Photon links oder rechts polarisiert?

b) Wie lautet der Erwartungswert für den Spin eines Photons im Zustand

$$|\Psi\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle?$$

Zeigen Sie damit, dass viele Photonen in diesem einen ZUstand im Allgemeinen von dem in a) betrachteten Gemisch verschieden sind. Wie müsste man die Form des obigen Zustands "relaxieren", d.h. von Photon zu Photon variieren lassen, so dass über viele Photonen gemittelt das Ergebnis von a) erhalten wird? Interpretieren Sie physikalisch.

c) Unpolarisiertes Licht ist Licht, das mit gleicher Wahrscheinlichkeit in einem beliebigen Polarisationszustand gefunden wird. Zeigen Sie, dass Licht unpolarisiert ist, wenn für eine Orthonormalbasis $\{|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle\}$ das Licht mit gleicher Wahrscheinlichkeit im Zustand $|\Phi_1\rangle$ bzw $|\Phi_2\rangle$ ist.

Lösung: a) p_i : Wahrscheinlichkeit für Photon in $|\Psi_i\rangle \Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit für Polarisation $|R\rangle$ (Spin $S = +1$) ist:

$$p_1 \cdot |\langle R|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 \cdot |\langle R|\Psi_2\rangle|^2$$

Und für $|L\rangle$ (Spin $S = -1$):

$$p_1 \cdot |\langle L|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 \cdot |\langle L|\Psi_2\rangle|^2$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \langle S \rangle &= \left(p_1 |\langle R|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 |\langle R|\Psi_2\rangle|^2 \right) \cdot (+1) + \left(p_1 |\langle L|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 |\langle L|\Psi_2\rangle|^2 \right) \cdot (-1) = \\ &= p_1 [\langle \Psi_1 | (|R\rangle \langle R| - |L\rangle \langle L|) | \Psi_1 \rangle] + p_2 [\langle \Psi_2 | (|R\rangle \langle R| - |L\rangle \langle L|) | \Psi_2 \rangle] = \end{aligned}$$

$$= p_1 \langle \Psi_1 | \hat{S} | \Psi_1 \rangle + p_2 \langle \Psi_2 | \hat{S} | \Psi_2 \rangle.$$

b) $|\Psi\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle \rightarrow$ Spin-Erwartungswert:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle &= \left(\alpha^* \langle \Psi_1 | + \beta^* \langle \Psi_2 | \right) \hat{S} \cdot \left(\alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle \right) = \\ &= |\alpha|^2 \langle \Psi_1 | \hat{S} | \Psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \Psi_2 | \hat{S} | \Psi_2 \rangle + \alpha^* \beta \langle \Psi_1 | \hat{S} | \Psi_2 \rangle + \alpha \beta^* \langle \Psi_2 | \hat{S} | \Psi_1 \rangle \end{aligned}$$

Wenn die Mischterme verschwinden, könnten wir identifizieren (siehe a)):

$$p_1 = |\alpha|^2, p_2 = |\beta|^2$$

Für festes $|\alpha|^2, |\beta|^2$ hängen $\alpha^* \beta$ und $\beta^* \alpha$ von der relativen Phase der komplexen Zahlen $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ab: $\alpha = |\alpha| e^{i\phi_\alpha}, \beta = |\beta| e^{i\phi_\beta}$.

$$\Rightarrow \alpha^* \beta = |\alpha| |\beta| e^{i(\phi_\beta - \phi_\alpha)}$$

$(\phi_\beta - \phi_\alpha)$ ist von 0 bis 2π variabel.

\Rightarrow Wenn wir für jedes Photon eine zufällige Phasendifferenz $(\phi_\beta - \phi_\alpha) \in [0, 2\pi]$ wählen, und über viele Photonen mitteln, erhalten wir im Mittel: $\alpha^* \beta = 0$.

Dann also:

$$\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle = |\alpha|^2 \langle \Psi_1 | \hat{S} | \Psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \Psi_2 | \hat{S} | \Psi_2 \rangle$$

D.h. die Phasenkohärenz (feste Phasenbeziehung) zwischen Zuständen 1 und 2 ist verloren gegangen.

c) Sei p_1 Wahrscheinlichkeit für $|\Phi_1\rangle$, p_2 Wahrscheinlichkeit für $|\Phi_2\rangle$. Sei $p_1 = p_2 = p$. Wahrscheinlichkeit eine beliebige Polarisation $|\Psi\rangle$ zu messen:

$$p_1 |\langle \Psi | \Phi_1 \rangle|^2 + p_2 |\langle \Psi | \Phi_2 \rangle|^2 = p \left(\underbrace{\langle \Psi | (|\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + |\Phi_2\rangle \langle \Phi_2|) | \Psi \rangle}_{=1 \text{ da ONB}} \right) = p \underbrace{\langle \Psi | \Psi \rangle}_{=1} = p$$

Merke: unabhängig von $|\Psi\rangle$!

3.4 Bra und Ket

Betrachten Sie einen dreidimensionalen Vektorraum, der durch die Orthonormalbasis $|1\rangle, |2\rangle$ und $|3\rangle$ aufgespannt wird. Folgende Vektorzustände sind gegeben:

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle$$

$$|\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

a) Konstruieren Sie $\langle \alpha|$ und $\langle \beta|$

Lösung:

$$\langle \alpha| = -i\langle 1| - 2\langle 2| + i\langle 3|; \quad \langle \beta| = -i\langle 1| + 2\langle 3| \quad (11)$$

b) Bestimmen Sie $\langle \alpha|\beta\rangle$ und $\langle \beta|\alpha\rangle$ und Zeigen Sie, dass $\langle \alpha|\beta\rangle = \langle \beta|\alpha\rangle^*$ gilt.

Lösung:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = (-i\langle 1| - 2\langle 2| + i\langle 3|)(i|1\rangle + 2|3\rangle) = (-i)(i)\langle 1|1\rangle + (i)(2)\langle 3|3\rangle = 1 + 2i \quad (12)$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = (-i\langle 1| + 2\langle 3|)(i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle) = (-i)(i)\langle 1|1\rangle + (2)(-i)\langle 3|3\rangle = 1 - 2i \quad (13)$$

Es folgt automatisch $\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$

c) Bestimmen Sie die Matrixelemente des Operators \hat{A} in dieser Basis. Ist dieser hermitisch?

Lösung:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix}$$

Wie man sehen kann ist A nicht hermitisch

3.5 Spin 1/2

Für zwei Teilchen mit Spin 1/2 berechne man den Erwartungswert

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \rangle$$

im Singulettzustand (Straumann 8.2)

Lösung: Wir interessieren uns für den Erwartungswert $\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \rangle_\psi$. Dieser muss rotationssymmetrisch und bilinear in \mathbf{a} und \mathbf{b} , also proportional zu $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ sein. Zur Bestimmung des Proportionalitätsfaktors wählen wir $\mathbf{a} = \mathbf{b} = (0, 0, 1)$. Dann ist $\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \rangle_\psi = -\psi$, also gilt für beliebige Einheitsvektoren \mathbf{a}, \mathbf{b}

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \rangle_\psi = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

Die Rechnung könnte man natürlich auch direkt für beliebige \mathbf{a}, \mathbf{b} durchführen

3.6 Lineare Algebra

3.6.1 Matriceigenschaften

Aufgabe: Wir bezeichnen die normierten Basisvektoren eines unitären Vektorraums V mit dem Symbol $|n\rangle, n = 1, \dots, \dim(V)$, und die dazu konjugierte Basisvektoren mit $\langle n|$. Das Skalarprodukt zweier Vektoren wird mit $\langle u|v\rangle$ notiert, und wir betrachten Basisvektoren für die gilt $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$. Eine Matrix A wird *hermitesch* genannt, falls $A^\dagger = A$, eine Matrix wird unitär genannt, falls $U^{-1} = U^\dagger$ gilt. Die Spur einer Matrix ist die Summe über ihre Diagonalelemente, d.h. in unserer Notation: $\text{tr}(A) = \sum_n \langle n|A|n\rangle$.

a) Zeigen Sie, dass alle Eigenwerte einer hermiteschen Matrix reell sind und, dass Eigenvektoren $|\lambda\rangle, |\lambda'\rangle$ zu verschiedenen Eigenwerten $\lambda \neq \lambda'$ orthogonal sind.

b) Zeigen Sie, dass $[\exp(iA)]^\dagger = \exp(-iA^\dagger)$ und, dass für B hermitesche $\exp(iB)$ unitär ist. Beachten Sie dabei, dass das Exponential einer Matrix einfach durch die Exponentialreihe definiert

wird, als $\exp(A) = 1 + A + \frac{1}{2}A^2 + \dots$

c) Zeigen Sie, dass $\text{tr}(ABCD\dots YZ) = \text{tr}(ZAB\dots Y)$, d.h. unter der Spur darf zyklisch vertauscht werden.

Lösung: a)

$$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

Die hermitesch konjugierte Matrix A^\dagger ist definiert durch ihre Wirkung im Skalarprodukt:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle A^\dagger\alpha|\beta\rangle \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle$$

Wir schreiben dies als:

$$\langle\alpha|A|\beta\rangle = (A^\dagger|\alpha\rangle)^\dagger|\beta\rangle \quad \left[\Rightarrow (A^\dagger)_{n,m} = A_{m,n}^* \right]$$

$$\langle\lambda|A|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle^{(1)}$$

und

$$\begin{aligned} \langle\lambda|A^\dagger|\lambda\rangle &= \langle A\lambda|\lambda\rangle = (\langle\lambda|A\lambda\rangle)^* = \\ &= (\langle\lambda|A|\lambda\rangle)^* \stackrel{(1)}{=} \lambda^* \langle\lambda|\lambda\rangle \end{aligned}$$

D.h. für $A^\dagger = A$: $\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$.

$$\langle\lambda|A|\lambda'\rangle = \lambda'\langle\lambda|\lambda'\rangle$$

$$\langle\lambda|A|\lambda'\rangle = \langle A^\dagger\lambda|\lambda'\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda'\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda'\rangle$$

Wegen $\lambda \neq \lambda'$ folgt: $\langle\lambda|\lambda'\rangle = 0$.

b)

$$(e^{iA})^\dagger = \left(\sum_n \frac{1}{n!} (iA)^n \right)^\dagger = \sum_n \frac{1}{n!} (-iA^\dagger)^n = e^{-iA^\dagger}$$

$B^\dagger = B$, dann:

$$(e^{iB})^\dagger e^{iB} = e^{-iB^\dagger} e^{iB} = e^{-iB} e^{iB} = \mathbf{1}.$$

(Weil B mit sich selbst kommutiert, d.h. gewöhnliche Rechenregeln gelten.)

c)

$$\begin{aligned} \text{tr}(ABC\dots YZ) &= \sum_{n_A} \langle n_A|ABC\dots YZ|n_A\rangle = \sum_{n_A, \dots, n_Z} \langle n_A|A|n_B\rangle \langle n_B|B|n_C\rangle \dots \langle n_Z|Z|n_A\rangle = \\ &= \sum_{n_A, \dots, n_Z} \langle n_Z|Z|n_A\rangle \langle n_A|A|n_B\rangle \langle n_B|\dots Y|n_Z\rangle = \sum_{n_Z} \langle n_Z|ZAB\dots Y|n_Z\rangle \\ &= \text{tr}(ZAB\dots Y) \end{aligned}$$

3.6.2 Glaubersche Formel

Aufgabe: Zeigen Sie mit Hilfe von $\frac{d}{dt}(e^{At}e^{Bt})$ und einer daraus abgeleiteten Differentialgleichung die Glaubersche Formel:

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

unter der Voraussetzung $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$
($A = \hat{A}$ und $B = \hat{B}$ sind Operatoren)

Lösung:

Def.: $\hat{U}(A, B, t) = e^{At}e^{Bt}$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\hat{U}(A, B, t) = e^{At}(A+B)e^{Bt} = (A+B)\hat{U}(A, B, t) - [B, \hat{U}(A, B, t)]$$

$$[B, \hat{U}(A, B, t)] = [B, e^{At}e^{Bt}] = [B, e^{At}]e^{Bt} = [B, A]te^{At}e^{Bt} = t[B, A]\hat{U}(A, B, t)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\hat{U}(A, B, t) = (A+B-t[B, A])\hat{U}(A, B, t)$$

Lösung der DGL:

$$\hat{U}(A, B, t) = e^{(A+B)t}e^{-\frac{1}{2}t^2[B, A]} + U_0$$

(beachte dabei: $[A+B, [B, A]] = 0$)

Vergleich mit Def. bei $t = 0$ gibt: $U_0 = 0$

Bei $t = 1$ erhalten wir so:

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

3.7 Fouriertransformation

Aufgabe: In der QM wird uns die Fourier-Transformation regelmäßig begegnen, wenn wir zwischen Orts- und Impulsdarstellung der quanten-mechanischen Wellenfunktion wechseln. Dies wird uns erlauben Differentialgleichungen auf einfache algebraische Gleichungen zurückzuführen und Symmetrien quantenmechanischer Systeme (Translationen in Raum und Zeit) auszunutzen.

Wir definieren die Fouriertransformation für Funktionen f , die im Unendlichen ausreichend schnell verschwinden:

$$F(k) = \mathcal{F}f = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x)$$

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}F = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} F(k).$$

a) Zeigen Sie die Konsistenz unserer Definition, d.h. dass:

$$\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f = f \text{ und } \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}F = F.$$

b) Zeigen Sie die Parsevalsche Identität:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk F^*(k)G(k).$$

c) Zeigen Sie, dass Ableitungen von der Fourier-Transformation in Produkte verwandelt werden:

$$F(k) = \mathcal{F}f \Rightarrow \mathcal{F}(df/dx) = ikF(k).$$

d) Gegeben sei

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' p(x-x')f(x').$$

Zeigen Sie das Faltungstheorem:

$$\mathcal{F}g(k) = \sqrt{2\pi}\mathcal{F}p(k) \cdot \mathcal{F}f(k).$$

Lösung:

a)

$$\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{iky} \mathcal{F}f(k) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{iky} \int dx e^{-ikx} f(x)$$

Wir wissen:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{ixt} \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(y-x)} = \delta(y-x)$$

$$\Rightarrow \mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f(y) = \int dx f(x)\delta(y-x) = f(y)$$

D.h. $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = 1$.

b) Lösung 1:

- Zeige, dass $\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)$ ein Skalarprodukt auf dem Raum der Funktionen bildet.
- Zeige, dass \mathcal{F} ein linearer Operator ist, der auf Funktionen wirkt.
- Zeige, dass $\mathcal{F}^\dagger = \mathcal{F}^{-1}$ (siehe a))

\Rightarrow Nachdem $\int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x) = \langle f|g \rangle$ und $\int_{-\infty}^{\infty} dk F^*(k)G(k) = \langle \mathcal{F}f|\mathcal{F}g \rangle$ und $\langle \mathcal{F}f|\mathcal{F}g \rangle = \langle f|\mathcal{F}^\dagger\mathcal{F}g \rangle = \langle f|g \rangle$.

Lösung 2: explizite Rechnung

$$\int dk F^*(k)G(k) = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx \int dy e^{ikx} e^{-iky} f^*(x)g(y) = \int dx \int dy \delta(x-y) f^*(x)g(y) = \int dx f^*(x)g(x)$$

c) $F(k) = \mathcal{F}f$

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dx}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f'(x) \stackrel{p.I.}{=} -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx f(x) \underbrace{(-ik)e^{-ikx}}_{=\partial_x e^{-ikx}} = ik\mathcal{F}f(k)$$

d) Faltungstheorem:

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' p(x-x')f(x')$$

$$\mathcal{F}g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dx' p(x-x')f(x') = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\pi} \int dx \int dx' e^{-ik(x-x')} p(x-x') \cdot e^{-ikx'} f(x') =$$

$$\stackrel{\tilde{x}=x-x'}{=} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} e^{-ik\tilde{x}} p(\tilde{x}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'} f(x') = \sqrt{2\pi}\mathcal{F}p(k) \cdot \mathcal{F}f(k)$$

4 Dreidimensionale Probleme

4.1 Das Wasserstoffatom

4.1.1 Stark-Effekt

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom in einem homogenen elektrischen Feld entlang der z-Achse. Der gesamte Hamiltonoperator für diese Versuchsanordnung besteht aus einem Beitrag H_0 für das Wasserstoffatom und einer Störung $H_1 = e\vec{E}\vec{r}$, sodass

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}|} + e|\vec{E}|\hat{z}$$

a) Bestimmen Sie die Energieverschiebung des Grundzustands $|100\rangle$ des Wasserstoffatoms in nicht-entarteter Störungstheorie.

Lösung:

Zunächst wird die Wellenfunktion konstruiert (siehe Wikipedia, Formelblatt, etc.):

$$|100\rangle = \psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (14)$$

Man erhält für die Energieverschiebung (Jacobi-Determinante nicht vergessen!)

$$E_s^1 = \langle 100 | H' | 100 \rangle = |\vec{E}| \int x \cos(\theta) |\psi_{100}(\vec{r})|^2 d^3x = eE_{\text{ext}} \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-2r/a} (r \cos \theta) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

Das Integral ist leicht lösbar, weil $\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = \frac{\sin^2 \theta}{2} \Big|_0^\pi = 0$. Folgt für die Energieverschiebung $E_s^1 = 0$

b) Der erste angeregte Zustand ist vierfach entartet: $|2, 0, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 1, -1\rangle, |2, 1, 1\rangle$. Bestimmen Sie mit Hilfe der entarteten Störungstheorie die Korrekturen erster Ordnung für die Energie. In wie viele Energieniveaus wird E_2 aufgespalten?

Lösung:

Wieder ermittelt man die Wellenfunktionen:

$$|1\rangle = \psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

$$|2\rangle = \psi_{211} = -\frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{1}{8a^2} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$|3\rangle = \psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{4a^2} r e^{-r/2a} \cos \theta$$

$$|4\rangle = \psi_{21-1} = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{1}{8a^2} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\phi}$$

Die Diagonalelemente entfallen alle, da die θ -Integrale zu Null werden:

$$\int_0^\pi \sin^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta = 0; \int_0^\pi \cos^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta = 0$$

Die nicht Diagonalelemente mit ϕ -Integrale verschwinden ebenfalls:

$$\int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = 0; \int_0^{2\pi} e^{-i\phi} d\phi = 0$$

Das einzige nichtverschwindende Element ist $\langle 1 | H'_s | 3 \rangle$ bzw. das komplex-konjugierte davon. Wir lösen einfach mal und behalten im Hinterkopf (*) $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$:

$$\begin{aligned} \langle 1 | H'_s | 3 \rangle &= eE_{\text{ext}} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{2a} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{4a^2} \int \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} r e^{-r/2a} \cos \theta (r \cos \theta) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \frac{eE_{\text{ext}}}{2\pi a 8a^3} (2\pi) \left[\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \right] \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} r^4 dr \\ &= \frac{eE_{\text{ext}}}{8a^4} \frac{2}{3} \left\{ \int_0^\infty r^4 e^{-r/a} dr - \frac{1}{2a} \int_0^\infty r^5 e^{-r/a} dr \right\} = \frac{eE_{\text{ext}}}{12a^4} \left(4!a^5 - \frac{1}{2a} 5!a^6 \right) (*) \\ &= \frac{eE_{\text{ext}}}{12a^4} 24a^5 \left(1 - \frac{5}{2} \right) = eaE_{\text{ext}}(-3) = -3aeE_{\text{ext}} \end{aligned}$$

Die Matrix ergibt sich also zu:

$$W = -3aeE_{\text{ext}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \text{ oder } M = -3e|\vec{E}|a_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

c) Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren dieser Matrix. Was ist die Interpretation der Eigenwerte? Geben Sie die korrigierten Energien des vollständigen Problems bis zur ersten Ordnung an. Welchen Effekt hat das elektrische Feld?

Lösung:

Um die Determinante zu berechnen kann man nur die ober linke 2 x 2 Matrix von M betrachten:

$$0 = \det(M - \lambda 1) = \lambda^2 \left(\lambda^2 - (3eEa_0)^2 \right)$$

Die Eigenwerte sind also $0, \pm 3 e E a_0$. Wie man Eigenvektoren ist aus LinAlg bekannt und es folgt:

$$0 : |2, 1, -1\rangle, \quad 0 : |2, 1, 1\rangle, \quad 3eEa_0 : \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle), \quad -3eEa_0 : \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle)$$

The eigenvalues of M are the first order energy corrections to the unperturbed energies, and the eigenvectors of it are linear combinations of the eigenvectors of the unperturbed problem. The electric field thus splits two of the energy levels proportionally to its strength, lifting the degeneracy. the proportionality is a direct result of using first order perturbation theory and justifies the name 'linear' Stark effect.

d) Berechnen Sie den Erwartungswert für das elektrische Dipolmoment in jedem dieser Zustände.

Lösung:

Das Dipolmoment ist definiert als $\vec{p}_e = -e\vec{r}$. Für die Eigenzustände mit Eigenwert 0, gelten wieder die selben Symmetrieargumente wie in b) (ϕ -Integral, diesmal aber cos und sin statt e-Funktion), also verschwindet hier das Dipolmoment:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_e \rangle_{2/4} &= -e \frac{1}{\pi a} \frac{1}{64a^4} \int r^2 e^{-r/a} \sin^2 \theta \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &\int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi = \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi = 0, \\ &\int_0^\pi \sin^3 \theta \cos \theta d\theta = \left| \frac{\sin^4 \theta}{4} \right|_0^\pi = 0 \end{aligned}$$

Also ist $\langle \mathbf{p}_e \rangle_{2/4} = 0$. Es müssen also noch die Dipolmomente für die Eigenwerte ungleich 0 berechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_e \rangle_{\pm} &= -\frac{1}{2} e \int (\psi_1 \pm \psi_3)^2 (\mathbf{r}) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= -\frac{1}{2} e \frac{1}{2\pi a} \frac{1}{4a^2} \int \left[\left(1 - \frac{r}{2a}\right) \pm \frac{r}{2a} \cos \theta \right]^2 e^{-r/a} r (\sin \theta \cos \phi \hat{i} + \sin \theta \sin \phi \hat{j} + \cos \theta \hat{k}) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \end{aligned}$$

Nur die k -Richtung wird nicht 0:

$$= -\frac{e}{2} \frac{\hat{k}}{2\pi a} \frac{1}{4a^2} 2\pi \int \left[\left(1 - \frac{r}{2a}\right) \pm \frac{r}{2a} \cos \theta \right]^2 r^3 e^{-r/a} \cos \theta \sin \theta dr d\theta$$

Weil $\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = 0$, bleibt nur noch der mittlere Teil der binomischen Formel zu berechnen

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_e \rangle_{\pm} &= -\frac{e}{8a^3} \hat{k} \left(\pm \frac{1}{a} \right) \int \left(1 - \frac{r}{2a}\right) r \cos \theta r^3 e^{-r/a} \cos \theta \sin \theta dr d\theta \\ &= \mp \left(\frac{e}{8a^4} \hat{k} \right) \left[\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \right] \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a}\right) r^4 e^{-r/a} dr = \mp \left(\frac{e}{8a^4} \hat{k} \right) \frac{2}{3} \left[4! a^5 - \frac{1}{2a} 5! a^6 \right] \\ &= \mp e \hat{k} \left(\frac{1}{12a^4} \right) 24a^5 \left(1 - \frac{5}{2}\right) = \pm 3ae \hat{k} \end{aligned}$$

4.1.2 Überlagerung von Wasserstoffeigenzuständen

Es seien $|nlm\rangle$ die auf eins normierten Eigenzustände des Wasserstoffatoms. Dieses befinde sich in dem durch den Ket

$$|\psi\rangle = \frac{1}{6} (4|100\rangle + 3|211\rangle - |210\rangle + \sqrt{10}|21, -1\rangle)$$

beschriebenen Zustand.

a) Was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, den Wert $\hat{L}_z = 0$ zu finden?

Lösung:

Die Terme des Zustandes sind gemeinsame Eigenvektoren der verträglichen Observablen \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z , und deshalb sind die Quadrate der Entwicklungskoeffizienten gleich den Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der verschiedenen Kombinationen von Quantenzahlen:

$$\begin{aligned} p_{100} &= \frac{16}{36}, & p_{211} &= \frac{9}{36} \\ p_{210} &= \frac{1}{36}, & p_{21-1} &= \frac{10}{36} \end{aligned}$$

Somit ist die Wahrscheinlichkeit für die Messung von $m = 0$ gleich $p_{100} + p_{210} = 17/36$.

b) Was sind die Erwartungswerte von \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z ?

Lösung:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi} = R_y \left(p_{100} + \frac{1}{4} (p_{211} + p_{210} + p_{21-1}) \right) = \frac{21}{36} R_y$$

$$\langle \hat{L}^2 \rangle_{\psi} = 2\hbar^2 (p_{211} + p_{210} + p_{21-1}) = \frac{10\hbar^2}{9}$$

$$\langle \hat{L}_z \rangle_{\psi} = \hbar (p_{211} - p_{21-1}) = -\frac{\hbar}{36}$$

4.1.3 Bahndrehimpuls

Warum hat das Elektron im 1s-Zustand keinen Bahndrehimpuls?

Lösung: Der Drehimpuls ist

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

und nach der Bohr'schen Theorie gilt

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

Damit hätte ein s-Elektron einen Bahndrehimpuls. Dann würde aber nach der ersten Gleichung gelten:

$$L = \hbar, \quad L_x = 0, \quad L_y = 0, \quad L_z = \hbar$$

d.h. alle Komponenten und der Gesamtwert von L wären scharf bestimmt, im Widerspruch zur Unschärferelation. Nach der Quantentheorie ist aber der Gesamtdrehimpuls einfach

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

und damit für das s-Elektron (mit $l = 0$) gleich null.

4.2 Spinpräzession im Heisenbergbild

Betrachten Sie die Spinpräzession eines Elektrons im in einem homogenen Magnetfeld beliebiger Raumrichtung im Heisenberg-Bild.

a) Zeigen Sie dafür zunächst, dass (für $g = 2$) gilt:

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \omega_L \hat{\mathbf{e}} \times \hat{\mathbf{S}}$$

wobei ω_L die Larmorfrequenz und $\hat{\mathbf{e}}$ ein Einheitsvektor des Magnetfelds ist. Leiten Sie daraus die explizite Form von $\hat{\mathbf{S}}$ ab.

Lösung:

Die Heisenberg-Gleichung für die Zeitentwicklung der Komponenten des Spinoperators ist

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_i}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{S}_i] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{ge}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{S}_i \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{ge}{2\mu c} \sum_j B_j [\hat{S}_j, \hat{S}_i] \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{ge}{2\mu c} \sum_{j,k} B_j i\hbar \varepsilon_{jik} \hat{S}_k \\ &= \frac{ge}{2\mu c} \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} B_j \hat{S}_k \end{aligned}$$

also

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \frac{ge}{2\mu c} \mathbf{B} \times \hat{\mathbf{S}} = \omega_L \hat{\mathbf{e}} \times \hat{\mathbf{S}}$$

Man hat somit

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \omega_L \hat{\mathbf{e}} \times \hat{\mathbf{S}}$$

Man hat somit

$$d\hat{\mathbf{S}} = \omega_L dt \hat{\mathbf{e}} \times \hat{\mathbf{S}}$$

Dies beschreibt eine infinitesimale Drehung um die Achse $\hat{\mathbf{e}}$ um den Winkel $-\omega_L dt$. Für die Zeitabhängigkeit von $\hat{\mathbf{S}}$ folgt

$$\hat{\mathbf{S}}(t) = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{e}}, -\omega_L t) \hat{\mathbf{S}}(0)$$

mit der Drehmatrix \mathbf{R} .

b) Untersuchen Sie dann speziell die Erwartungswerte der Spinkomponenten für den Fall, dass $\langle \hat{S}_1 \rangle(0) = \hbar/2$ ist und das Magnetfeld in z -Richtung zeigt.

Lösung:

Für die Erwartungswerte folgt

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{e}}, -\omega_L t) \langle \hat{\mathbf{S}}(0) \rangle$$

und für eine Drehung um die z -Achse ist speziell

$$\mathbf{R}(\hat{\mathbf{e}}_z, -\omega_L t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_L t) & -\sin(\omega_L t) & 0 \\ \sin(\omega_L t) & \cos(\omega_L t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_1(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos(\omega_L t) \\ \langle \hat{S}_2(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin(\omega_L t) \\ \langle \hat{S}_3(t) \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Der Spinvektor dreht sich also in der x - y -Ebene

5 Quantenmechanische Störungsrechnung

5.1 Spin-Spin-Kopplung

Das Positronium ist ein Zwei-Teilchen-System aus einem Elektron und einem Positron, dessen gebundene Zustände denen des Wasserstoffatoms ähneln. Betrachten Sie nur die Spin-Freiheitsgrade des Systems, die unter Einwirkung eines externen magnetischen Feldes durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben werden:

$$\hat{H} = A \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \frac{eB}{mc} (\hat{S}_{1z} - \hat{S}_{2z})$$

A ist eine positive Konstante und \hat{S}_1 (\hat{S}_2) der Spinoperator des Elektrons (Positrons). Der Gesamtspin ist $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$

a) Drücken Sie die Eigenzustände $|sm\rangle$ von \hat{S}^2 und \hat{S}_z durch die Eigenzustände der nicht gekoppelten Einteilchen-Spins aus.

Lösung:

Komisch formulierte Frage. Was die Aufgabe sehen wollte sind die Linearkombinationen von Spin-up und Spin-down in einem Zwei-Teilchen-System. Es gibt vier Einstellungsmöglichkeiten, wenn man die Reihenfolge beachtet:

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle & \quad (m = 1) \\ |\uparrow\downarrow\rangle & \quad (m = 0) \\ |\downarrow\uparrow\rangle & \quad (m = 0) \\ |\downarrow\downarrow\rangle & \quad (m = -1) \end{aligned}$$

Für $l = 1$ ergeben sich also folgende Zustände:

$$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|1-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Und weil der $|10\rangle$ senkrecht auf $|00\rangle$ stehen muss:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

b) Bestimmen Sie die Eigenwerte von \hat{H} bei verschwindender Magnetfeldstärke, $B=0$. Der Energieunterschied zwischen dem Grundzustand ($S=0$) und dem angeregten Zustand ($S=1$) wurde experimentell bestimmt und beträgt $\Delta E = 8.41 \times 10^{-4} \text{eV}$. Bestimmen Sie die Konstante A .

Lösung:

Aus $B = 0$ folgt $m = 0$. Wir müssen uns also nur die Zustände anschauen mit Magnetquantenzahl $m = 0$. Mit Hilfe von:

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

Also lässt sich der Hamiltonian schreiben als:

$$\hat{H} = A\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2) \quad (15)$$

Erinnerung: $S^2|s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m\rangle$. Also folgt für $|10\rangle, |00\rangle$

$$S^2|10\rangle = 2\hbar^2|10\rangle \quad S^2|00\rangle = 0|00\rangle$$

Für die anderen gilt:

$$S_1^2|00\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|00\rangle \quad S_1^2|10\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|10\rangle$$

$$S_2^2|00\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|00\rangle \quad S_2^2|10\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|10\rangle$$

Wie kommt man darauf? Wichtig ist das diese Operatoren nur auf einen der Spins wirken. S_1^2 wirkt also nur auf den ersten Spin von $|\uparrow\uparrow\rangle$. Beispiel:

$$S_1^2|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_1^2|\uparrow\downarrow\rangle + S_1^2|\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|(S_1^2\uparrow)\downarrow\rangle + |(S_1^2\downarrow)\uparrow\rangle)$$

Ab jetzt geht es wieder normal weiter wie beim S^2 Operator. Obacht: Spin-up und Spin-down haben beide $s=\frac{1}{2}$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{3\hbar^2}{4}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{3\hbar^2}{4}|\downarrow\uparrow\rangle \right) = \frac{3\hbar^2}{4}|00\rangle$$

Analog für die anderen. Setzt man das nun ein erhält man für die Energiedifferenz:

$$\Delta E = \frac{A}{2} \left(2\hbar^2 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4} \right) - \frac{A}{2} \left(0 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4} \right) = \frac{\hbar^2}{4}A + \frac{3\hbar^2}{4}A, \quad A = 8.41 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\hbar^2}$$

c) Bei endlicher Magnetfeldstärke betrachten wir den zweiten Term auf der rechten Seite des Hamiltonian als Störung. Stellen Sie die Matrix des Störoperators in der Basis $|sm\rangle$ auf. Zeigen Sie, dass die Energieverschiebungen in erster Ordnung Störungstheorie verschwinden.

Lösung:

Wie man leicht zeigen kann verschwinden alle Matrixelemente, außer wenn $|00\rangle$ auf $|10\rangle$ abgebildet wird und umgekehrt (da komplex-konjugiert).

$$(S_{1z} - S_{2z})|00\rangle = (S_{1z} - S_{2z})\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Wieder wirken die Operatoren nur auf den ersten bzw. zweiten Spin. Es folgt:

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \right) + \frac{\hbar}{2} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle = \hbar |10\rangle$$

Die Matrix ist also:

$$W = \frac{\hbar e B}{mc} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

d) Berechnen Sie die durch das Magnetfeld verursachten Energieverschiebungen in 2. Ordnung Störungstheorie.

Lösung:

Da nur die Zustände $|00\rangle$ und $|10\rangle$ aufeinander abgebildet werden, sind nur diese ungleich null.

$$E_{|00\rangle}^{(2)} = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2 m^2 c^2}, \quad E_{|10\rangle}^{(2)} = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2 m^2 c^2}, \quad E_{|1\pm 1\rangle}^{(2)} = 0$$

5.2 Diamagnetismus

a) Berechnen Sie die Energieverschiebung durch den diamagnetischen Term $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{q}{2\mu c} B \hat{L}_3 + \frac{q^2}{8\mu c^2} B^2 \varrho^2 + q\phi$ in einem wasserstoffartigen Atom im Grundzustand in der ersten Ordnung Störungstheorie.

Lösung:

Der Störoperator ist hier

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{e^2}{8\mu c^2} B^2 \varrho^2 = \frac{e^2}{8\mu c^2} B^2 r^2 \sin^2 \vartheta$$

In der ersten Ordnung der Störungstheorie ist der Erwartungswert dieses Ausdrucks zu bilden, d. h. das folgende Integral zu berechnen:

$$E_{100}^{(1)} = \frac{e^2}{8\mu c^2} B^2 \int dV |\psi_{100}(x)|^2 r^2 \sin^2 \vartheta$$

Da die Grundzustandswellenfunktion sphärisch symmetrisch ist, können die Winkelintegrationen sofort ausgeführt werden:

$$\int d\Omega \sin^2 \vartheta = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos \vartheta (1 - \cos^2 \vartheta) = \frac{8\pi}{3}$$

und man hat

$$E_{100}^{(1)} = \frac{\pi e^2}{3\mu c^2} B^2 \int_0^\infty r^2 dr |\psi_{100}(x)|^2 r^2$$

bzw., wenn man die explizite Form der Grundzustandswellenfunktion einsetzt,

$$E_{100}^{(1)} = \frac{e^2}{3\mu c^2 a_B^3} B^2 \int_0^\infty dr e^{-2r/a_B} r^4$$

Mit der Substitution $r = x a_B / 2$ vereinfacht sich dies zu

$$E_{100}^{(1)} = \frac{e^2 a_B^2}{96\mu c^2} B^2 \int_0^\infty dx e^{-x} x^4$$

Das Integral ergibt einen Faktor $4! = 24$; insgesamt hat man

$$E_{100}^{(1)} = \frac{e^2 a_B^2}{4\mu c^2} B^2$$

b) Zeigen Sie, dass der Störoperator im Unterraum der ersten angeregten Zustände ($n = 2$) diagonal ist.

Lösung:

Der Störoperator hat positive Parität, die Zustände jeweils die Parität $(-1)^\ell$. Insgesamt hat man somit

$$\hat{P}\langle 2\ell m | \hat{H}^{(1)} | 2\ell' m' \rangle = (-1)^{\ell+\ell'} \langle 2\ell m | \hat{H}^{(1)} | 2\ell' m' \rangle$$

Die Matrixelemente verschwinden also nur dann nicht, wenn $\ell + \ell'$ eine gerade Zahl ist. Dies ist bei $n = 2$ nur möglich, wenn $\ell = \ell' = 0$ oder $\ell = \ell' = 1$ ist.

Außerdem hängt $\hat{H}^{(1)}$ nicht von ϕ ab. Bei der Berechnung der Matrixelemente wird also nur über $e^{i(m-m')\varphi}$ integriert. Dieses Integral verschwindet nur für $m = m'$ nicht. Die einzigen Matrixelemente, die für $n = 2$ nicht verschwinden, sind deshalb diejenigen mit $\ell = \ell'$ und $m = m'$, und damit ist der Störoperator im Unterraum dieser Zustände diagonal.

c) Ermitteln Sie welche Matrixelemente bei den zweiten Zuständen ($n = 3$) mit magnetischer Quantenzahl $m = 0$ nicht verschwinden. Warum ist es möglich, sich auf diese zu beschränken? Finden Sie die Energieverschiebungen in erster Ordnung.

Lösung:

Zunächst muss wie in Teilaufgabe (b) $m = m'$ gelten; Zustände mit verschiedenem m mischen untereinander also nicht, und damit ist es möglich, sich auf einen bestimmten Wert von m (hier: $m = 0$) zu beschränken. Wie in Teilaufgabe (b) folgt auch, dass $\ell = \ell'$ eine gerade Zahl sein muss. Im Gegensatz zu Teilaufgabe (b) hat man nun aber auch nicht verschwindende Matrixelemente für $\ell = 0$ und $\ell' = 2$ bzw. umgedreht, zusätzlich zu denen mit $\ell = \ell' = 0$, $\ell = \ell' = 1$ und $\ell = \ell' = 2$. Führen wir die Abkürzungen

$$E_{\ell\ell'} := \langle 3\ell 0 | \hat{H}^{(1)} | 3\ell' 0 \rangle$$

ein, so bleibt eine Matrix der Form

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{00} & 0 & E_{02} \\ 0 & E_{11} & 0 \\ E_{20} & 0 & E_{22} \end{pmatrix}$$

Dabei muss $E_{02} = E_{20}^*$ gelten. Genauer: Da $m = 0$ ist, sind die Wellenfunktionen alle reell, also sind alle $E_{\ell\ell'}$ reell und damit muss sogar $E_{02} = E_{20}$ gelten.

Diese Matrix muss nun noch diagonalisiert werden. Die Eigenwertgleichung ist hier

$$\det \begin{pmatrix} E_{00} - \lambda & 0 & E_{02} \\ 0 & E_{11} - \lambda & 0 \\ E_{20} & 0 & E_{22} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

was auf

$$(E_{00} - \lambda)(E_{11} - \lambda)(E_{22} - \lambda) - E_{02}(E_{11} - \lambda)E_{20} = 0$$

führt. Eine Lösung dieser Gleichung ist offensichtlich $\lambda_1 = E_{11}$; es bleibt dann noch die quadratische Gleichung

$$\lambda^2 - (E_{00} + E_{22})\lambda + E_{00}E_{22} - E_{02}E_{20} = 0$$

mit den Lösungen

$$\lambda_{2,3} = \frac{E_{00} + E_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{00} - E_{22}}{2}\right)^2 + E_{02}E_{20}}$$

Diese Eigenwerte $\lambda_{1,2,3}$ sind die gesuchten Energieverschiebungen in der ersten Ordnung der Störungstheorie.

5.3 Harmonischer Oszillator mit harmonischer Störung

Auf einen eindimensionalen harmonischen Oszillator (Masse m , Eigenfrequenz ω_0), der in x -Richtung schwingt, wirke nur zwischen den Zeiten t_1 und t_2 das zusätzliche Potenzial

$$V(x) = -xF \cos(\omega t)$$

ein mit einer reellen Konstanten F . Berechnen Sie in der ersten Ordnung der zeitabhängigen Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit, dass das System zur Zeit $t > t_2$ im angeregten Zustand n befindet, wenn es für $t < t_1$ im Grundzustand war. Betrachten Sie auch die Übergangsraten im Grenzfall $\Delta t = t_2 - t_1 \rightarrow \infty$

Hinweis: Verwenden Sie für die Berechnung des Matrixelements Auf- und Absteigeoperatoren.

Lösung:

Der Störterm im Hamilton-Operator ist durch das zusätzliche Potenzial gegeben:

$$\hat{H}^{(1)}(t) = -\hat{x}F \cos(\omega t)$$

Wir benötigen die Matrixelemente

$$\langle n | \hat{H}^{(1)}(t) | 0 \rangle = -F \langle n | \hat{x} | 0 \rangle \cos(\omega t)$$

Drücken wir den Ortsoperator durch Auf- und Absteigeoperatoren aus:

$$\langle n | \hat{H}^{(1)}(t) | 0 \rangle = -F \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \cos(\omega t)$$

Der Absteigeoperator angewendet auf den Grundzustand ergibt null; es bleibt also nur der Term mit dem Aufsteigeoperator. Dieser ergibt

$$\langle n | \hat{H}^{(1)}(t) | 0 \rangle = -F \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n | 1 \rangle \cos(\omega t)$$

es können somit nur Übergänge in den ersten angeregten Zustand stattfinden.

Nun ist noch das zeitintegral zu berechnen, um den entsprechenden Entwicklungskoeffizienten zu erhalten:

$$c_{10} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \langle n | \hat{H}^{(1)}(t) | 0 \rangle e^{-i\omega_0 t} dt$$

mit

$$\omega_{10} = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar\omega_0 \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\hbar} = \omega_0$$

also

$$c_{10} = \frac{iF}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \int_{t_1}^{t_2} \cos(\omega t) e^{-i\omega_0 t} dt$$

Das Integral kann leicht ausgeführt werden, wenn man den Cosinus mittels der komplexen Exponentialfunktion ausdrückt:

$$\begin{aligned} c_{10} &= \frac{iF}{2\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \int_{t_1}^{t_2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{-i\omega_0 t} dt \\ &= \frac{iF}{2\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \int_{t_1}^{t_2} \left(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t} \right) dt \\ &= \frac{F}{2\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(\frac{e^{i(\omega-\omega_0)t/2} - e^{i(\omega-\omega_0)t}}{\omega - \omega_0} \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{-i(\omega+\omega_0)t_2} - e^{-i(\omega+\omega_0)t_1}}{\omega + \omega_0} \right) \end{aligned}$$

Nun schreiben wir

$$\begin{aligned} &e^{i(\omega-\omega_0)t_2} - e^{-i(\omega+\omega_0)t_1} \\ &= e^{i(\omega-\omega_0)(t_2+t_1)/2} \\ &\quad \cdot \left(e^{i(\omega-\omega_0)(t_2-t_1)/2} - e^{-i(\omega+\omega_0)(t_2-t_1)/2} \right) \\ &= 2ie^{i(\omega-\omega_0)\bar{t}} \sin\left(\frac{(\omega-\omega_0)\Delta t}{2}\right) \end{aligned}$$

Mit $\tilde{t} = (t_1 + t_2)/2$ und $\Delta t = t_2 - t_1$ und entsprechend beim zweiten Summanden. Es bleibt

$$c_{10} = \frac{iF}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(\frac{e^{i(\omega-\omega_0)\tilde{t}}}{\omega - \omega_0} \sin\left(\frac{(\omega - \omega_0)\Delta t}{2}\right) + \frac{e^{-i(\omega+\omega_0)\tilde{t}}}{\omega + \omega_0} \sin\left(\frac{(\omega + \omega_0)\Delta t}{2}\right) \right)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich dann als Betragsquadrat dieses Ausdrucks:

$$P_{10} = \frac{F^2}{2m\hbar\omega_0} \left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega-\omega_0)\Delta t}{2}\right)}{(\omega - \omega_0)^2} + \frac{\sin^2\left(\frac{(\omega+\omega_0)\Delta t}{2}\right)}{(\omega + \omega_0)^2} + 2 \cos(2\omega\tilde{t}) \frac{\sin\left(\frac{(\omega-\omega_0)\Delta t}{2}\right)}{\omega - \omega_0} \frac{\sin\left(\frac{(\omega+\omega_0)\Delta t}{2}\right)}{\omega + \omega_0} \right)$$

Für $\Delta t \rightarrow \infty$ ergibt dies

$$P_{10} = \frac{F^2}{2m\hbar\omega_0} \left(\frac{\pi\Delta t}{2} \delta(\omega - \omega_0) + \frac{\pi\Delta t}{2} \delta(\omega + \omega_0) + 2 \cos(2\omega\tilde{t}) \cdot \pi\delta(\omega - \omega_0) \cdot \pi\delta(\omega + \omega_0) \right)$$

Da sicher $\omega + \omega_0 > 0$ gilt, bleibt schließlich nur der erste Term übrig und man hat die Übergangsraten

$$\Gamma_{n0} = \frac{\pi F^2}{4m\hbar\omega_0} \delta(\omega - \omega_0) \delta_{n1}$$

Die Übergangsraten verschwinden also entweder (für $\omega \neq \omega_0$) oder sind unendlich groß. Dieses physikalisch eigentlich unsinnige Ergebnis folgt, da wir hier ja Übergänge in ein diskretes Spektrum betrachten statt in ein Kontinuum.