

Einführung in die Quantentheorie

Leibniz Universität Hannover, Sommer 2021

TILL BARGHEER, KLEMENS HAMMERER

Hausübungen

Inhaltsverzeichnis

Hausübung Blatt 1	1.1
1.1. Gauß-Integrale	1.1
1.2. Fouriertransformation	1.1
1.3. Dirac-Delta-Distribution	1.2
Hausübung Blatt 2	2.1
2.1. Unendlich tiefer Potentialtopf in 3D	2.1
2.2. Comptonstreuung	2.1
2.3. Gaußsches Wellenpaket	2.2
Hausübung Blatt 3	3.1
3.1. Delta-Potentialtopf („Atomkern“)	3.1
3.2. Unendlich tiefer Potentialtopf mit Stufe	3.1
3.3. Teilchenfalle	3.2
Hausübung Blatt 4	4.1
4.1. Doppelter Delta-Potentialtopf („Molekül“)	4.1
4.2. Skalarprodukt in $L^2(\mathbb{R}^n)$	4.2
4.3. Basisentwicklung in L^2	4.2
Computerübung Blatt 5	5.1
5.1. Zeitentwicklung eines Wellenpakets	5.1
Hausübung Blatt 6	6.1
6.1. Kommutierende Operatoren II	6.1
6.2. Kommutatorrelationen des Drehimpulses	6.1
6.3. Baker–Campbell–Hausdorff Relation	6.2
Hausübung Blatt 7	7.1
7.1. Kohärente Zustände	7.1
7.2. Klassische Wahrscheinlichkeitsdichte eines harmonischen Oszillators	7.1
7.3. Hermite-Polynome und Vollständigkeit	7.2

Hausübung Blatt 8	8.1
8.1. Drehimpuls im zweidimensionalen harmonischen Oszillator	8.1
8.2. Penning-Falle für geladene Teilchen	8.2
8.3. Kronig–Penney Modell	8.3
Hausübung Blatt 9	9.1
9.1. Observablen im Zweiniveausystem	9.1
9.2. Sequenz von Messungen	9.1
9.3. Verallgemeinerte Unschärferelation und freie Zeitentwicklung II	9.2
Hausübung Blatt 10	10.1
10.1. Generatoren von Drehungen II	10.1
10.2. Wellenfunktion und Drehimpuls	10.1
10.3. Teilchen im sphärisch symmetrischen Potentialtopf endlicher Tiefe	10.2
Hausübung Blatt 11	11.1
11.1. Magnetresonanz	11.1
11.2. Zwei Spin-1/2 Systeme im Singulett-Zustand	11.2
Computerübung Blatt 12	12.1
12.1. Zweiteilchensystem mit Kontaktterm	12.1
Zusatzmaterial Blatt 12	12.7

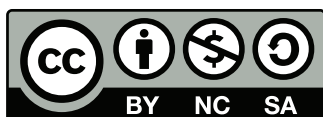
© 2021 Till Bargheer

This document and all of its parts are protected by copyright.

This work is licensed under the Creative Commons

“Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International”

License (CC BY-NC-SA 4.0).



A copy of this license can be found at

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

1.1. Gauß-Integrale (10 P)

- a) Einfaches Gauß-Integral: Zeigen Sie, dass für $a \in \mathbb{C}$, $\operatorname{Re}(a) > 0$ gilt: 4 P

$$I(a) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (1.1)$$

Betrachten Sie dazu das zweidimensionale Integral $I(a)^2$ in Polarkoordinaten.

- b) Zeigen Sie nun, dass für $a, b, c \in \mathbb{C}$, $\operatorname{Re}(a) > 0$ gilt: 6 P

$$I(a, b, c) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/(4a)+c}. \quad (1.2)$$

Hinweis: Der *Cauchysche Integralsatz* ist ein fundamentales Resultat der komplexen Analysis. Er besagt: Ist eine Funktion $f(z)$ einer Variable $z \in \mathbb{C}$ in jedem Punkt eines Gebiets $D \subset \mathbb{C}$ (komplex) differenzierbar, dann verschwindet das Linienintegral über den Rand ∂D von D : $\int_{\partial D} f(z) dz = 0$. Benutzen Sie diesen Satz mit einer Parallelogrammkontur, um das Integral auf Fall a) zurückzuführen.

- c) *Bonusaufgabe:* Betrachten Sie schließlich den Fall eines rein imaginären $a \in i\mathbb{R}_{\neq 0}$. Zeigen Sie, dass auch für diesen Fall gilt: +4 P

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (1.3)$$

Hinweis: Benutzen Sie wieder den Cauchyschen Integralsatz. Zeigen Sie diesmal, dass das Integral über den Achtelkreisbogen im Unendlichen verschwindet.

1.2. Fouriertransformation (10 P)

Die Fourier-Transformation $f(x) \mapsto \tilde{f}(k)$ und ihre inverse Transformation $\tilde{f}(k) \mapsto f(x)$ sind gegeben durch

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx, \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk. \quad (1.4)$$

Berechnen Sie die Fourier-Transformierten $\tilde{f}(k)$ der folgenden Funktionen:

- a) Rechteckfunktion ($a > 0$): 2 P

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{a} & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (1.5)$$

- b) Abfallendes Potential ($a > 0$): 2 P

$$f(x) = e^{-a|x|}, \quad (1.6)$$

- c) Gauß-Funktion ($a \in \mathbb{C}$, $\operatorname{Re}(a) > 0$ und $b, x_0 \in \mathbb{R}$): 2 P

$$f(x) = e^{-a(x-x_0)^2+ibx}. \quad (1.7)$$

- d) Berechnen Sie für die Beispiele b) und c) auch das Produkt $\Delta x \cdot \Delta k$ der Halbwertsbreiten Δx von $|f(x)|$ und Δk von $|\tilde{f}(k)|$. Für Beispiel c) dürfen Sie $x_0 = 0$ annehmen. 4 P

1.3. Dirac-Delta-Distribution (10 P)

- a) Zeigen Sie, dass für die Fourier-Transformierte $\tilde{\delta}_{x_0}$ der Delta-Distribution $\delta_{x_0} := \delta(x - x_0)$ 4 P gilt:

$$\tilde{\delta}_{x_0}(k) = \frac{e^{-ikx_0}}{\sqrt{2\pi}} . \quad (1.8)$$

Folgern Sie hieraus, dass

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk . \quad (1.9)$$

- b) Benutzen Sie die Darstellung (1.9), um die Formel für die inverse Fourier-Transformation 6 P zu verifizieren, d. h. die Konsistenz der beiden Gleichungen in (1.4) zu zeigen, sowie um die Parseval–Plancherel Identität

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk \quad (1.10)$$

zu beweisen.

Hinweis: Punktzahlen der Form $a + bP$ bedeuten a reguläre Punkte plus b Bonuspunkte.

2.1. Unendlich tiefer Potentialtopf in 3D (10 P)

Ein Teilchen bewegt sich in drei Dimensionen in einem Potential der Form $V(\vec{x}) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)$, wobei

$$V_i(x_i) = \begin{cases} 0 & |x_i| < a_i \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $a_1, a_2, a_3 > 0$. D. h. das Potential $V(\vec{x})$ verschwindet für $|x_1| < a_1, |x_2| < a_2, |x_3| < a_3$ und ist überall sonst unendlich hoch.

- a) Lösen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung durch einen Separationsansatz $\psi(\vec{x}) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$. Bestimmen Sie die Energieeigenfunktionen und Energieeigenwerte. 6 P
- b) Diskutieren Sie den Fall $a_1 \rightarrow \infty$ und $a_2, a_3 \rightarrow 0$. Inwieweit entspricht die Lösung aus Teil a) einer freien Bewegung des Teilchens in einer Dimension? 4 P

2.2. Comptonstreuung (10 P)

Ein Photon mit Frequenz $\omega/(2\pi) = c/\lambda$ wird an einem ruhenden Elektron elastisch gestreut. Der Streuwinkel des Photons sei ϑ , und die Frequenz des Photons nach der Streuung sei $\omega'/(2\pi)$.

- a) Schreiben Sie den Energieerhaltungssatz sowie den Impulserhaltungssatz für das System. Beachten Sie, dass die Energie des Elektrons relativistisch betrachtet werden muss. 4 P

Hinweis: Für das Photon gilt $E_\gamma = \hbar\omega = |\vec{p}_\gamma|c$. Für das Elektron ist die relativistische Energie gegeben durch $E_e = c\sqrt{\vec{p}^2 + (mc)^2}$ mit der Elektronen-Ruhemasse m .

- b) Bestimmen Sie daraus die Comptonbeziehung für die Wellenlänge des Photons vor und nach der Streuung, 4 P

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc} (1 - \cos\vartheta). \quad (2.1)$$

Diskutieren Sie diese Beziehung. Erklären Sie, wieso diese Beziehung mit der Idee unverträglich ist, dass hier eine elektromagnetische Welle an freien oder gebundenen Elektronen gestreut wird.

Hinweis: Man kann die Rechnung in Komponenten $E_e, E_\gamma, \mathbf{p}_e, \mathbf{p}_\gamma$ durchführen. Sie bietet aber eine gute Gelegenheit, den Umgang mit relativistischen Viererimpulsen $p_\mu = (E, \mathbf{p})$ zu üben. Betrachten Sie die relativistisch invariante Norm $(p'_e)^\mu (p'_e)_\mu$ des Elektronen-Viererimpulses nach dem Stoß.

- c) Berechnen Sie den Streuwinkel φ zwischen auslaufendem Elektron und einfallendem Photon. Drücken Sie φ nur durch ϑ, ω und die Elektronenmasse m aus. 2 P

→

2.3. Gaußsches Wellenpaket (10+2 P)

Der Zustand eines freien Teilchens in einer Dimension sei zum Zeitpunkt $t = 0$ als Gaußsches Wellenpaket

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{a^2\pi} \right)^{1/4} e^{ik_0x - x^2/a^2} \quad (2.2)$$

präpariert. Wir wollen die Zeitentwicklung dieses Zustands untersuchen.

- a) Finden Sie zuerst durch Anwendung der Fouriertransformation die zugehörige Impulswellenfunktion $\varphi(p, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$. 2 P

Hinweis: Nutzen Sie die Formel für das Gauß-Integral vom vorigen Übungszettel.

- b) Transformieren Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein freies Teilchen 2 P

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (2.3)$$

in den Impulsraum, das heißt in eine Gleichung für $\varphi(p, t)$, indem Sie auf beiden Seiten des Gleichheitszeichens die Fourier-Transformation anwenden.

- c) Finden Sie die allgemeine Lösung der Gleichung, die Sie in b) gefunden haben, und passen Sie dann den Integrationsparameter so an, dass die Impulswellenfunktion $\phi(p, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ mit dem Ergebnis in a) übereinstimmt. 2 P

- d) Transformieren Sie schließlich die in c) gefundene Impulswellenfunktion zurück in den Ortsraum, um die zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(x, t)$ zu erhalten. 2+2 P

Bonuspunkte: Zeigen Sie, dass sich das Ergebnis auf die in der Vorlesung gezeigte Form bringen lässt:

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} \frac{e^{i(k_0x - \varphi)}}{(1 + \gamma^2 t^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2(1 + i\gamma t)} \right] \quad (2.4)$$

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad \gamma = \frac{2\hbar}{a^2 m}, \quad \varphi = \theta + k_0 v_0 \frac{t}{2}, \quad \tan(2\theta) = \gamma t. \quad (2.5)$$

- e) Berechnen Sie den Wahrscheinlichkeitsstrom 2 P

$$j(x, t) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[\psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right) \right]. \quad (2.6)$$

Bestimmen Sie das Verhalten von $j(x, t)$ (i) für $t \gg 1$ und (ii) für $a \rightarrow \infty$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

3.1. Delta-Potentialtopf („Atomkern“) (10 P)

Für $\alpha > 0$ sei der Hamiltonoperator eines Teilchens der Masse m in einer Dimension

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x).$$

- a) Erklären Sie, wieso dieser Hamiltonoperator ein stark vereinfachtes Modell für die Bewegung eines Protons im Umfeld eines Atomkerns darstellt. 1 P
- b) Rekapitulieren Sie, warum die erste Ableitung $\psi'(x)$ der Wellenfunktion bei $x = 0$ eine Sprungstelle besitzt: 2 P

$$\lim_{\epsilon \searrow 0} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] = a \psi(0), \quad (3.1)$$

und warum die Wellenfunktion $\psi(x)$ selbst stetig ist (auch bei $x = 0$). In welchem Zusammenhang steht a mit α ? Integrieren Sie hierfür die zeitunabhängige Schrödingergleichung über $x \in [-\epsilon, \epsilon]$ mit $0 < \epsilon \ll 1$.

- c) Betrachten Sie den Fall gebundener Zustände, d. h. $E < 0$. Begründen Sie, warum in diesem Fall der allgemeine Ansatz 2 P

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\mu x} + Be^{-\mu x} & \text{für } x < 0, \\ Ce^{\mu x} + De^{-\mu x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

gemacht werden kann. Bestimmen Sie μ als Funktion von E und m .

- d) Zeigen Sie mit (i) den Anschlussbedingungen für $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ bei $x = 0$ aus Teilaufgabe b) und (ii) der Forderung, dass $\psi(x)$ quadratintegrabel sein muss, dass nur ein einziger negativer Eigenwert E existiert, und bestimmen Sie die zugehörige Eigenfunktion $\psi(x)$ (inklusive Normierung). Skizzieren Sie die Eigenfunktion. 5 P

3.2. Unendlich tiefer Potentialtopf mit Stufe (10 P)

Ein Teilchen der Masse m bewegt sich in einer Dimension in einem Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a < x < 0 \quad (\text{Bereich I}) \\ V_0 & 0 \leq x < a \quad (\text{Bereich II}) \\ \infty & a \leq |x| \end{cases} \quad (3.3)$$

mit $V_0 > 0$. Es sollen die Eigenzustände und Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung gefunden werden.

- a) Betrachten Sie zunächst den Fall $0 < E < V_0$. Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion die allgemeine Form 2 P

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & (\text{Bereich I}) \\ \psi_{\text{II}}(x) = C e^{\mu x} + D e^{-\mu x} & (\text{Bereich II}) \end{cases} \quad (3.4)$$

mit $k, \mu \in \mathbb{R}$ hat. In welchem Zusammenhang stehen k und μ mit der Energie E und der Höhe der Potentialstufe V_0 ?

- b) Welche Bedingungen muss die Wellenfunktion aus a) an den Sprungstellen des Potentials erfüllen? Zeigen Sie, dass der Vektor der Amplituden $\vec{v} = (A, B, C, D)$ mit einer geeigneten 4×4 Matrix M eine Gleichung folgender Form erfüllt:

$$M\vec{v} = 0. \quad (3.5)$$

- c) Unter welcher Bedingung besitzt Gleichung (3.5) eine nicht-triviale Lösung (mit $\vec{v} \neq 0$)? Zeigen Sie, dass diese Bedingung auf

$$-\tan(ak) = \frac{k}{\mu} \tanh(a\mu) \quad (3.6)$$

führt. Dies ist als Gleichung für die zulässigen diskreten Energieeigenwerte E_n zu interpretieren. Die Gleichung kann nicht analytisch gelöst werden. Diskutieren Sie die Lösung graphisch: Betrachten Sie die linke und die rechte Seite von Gleichung (3.6) jeweils als Funktion der Energie. Werden beide Kurven im selben Bild gegen die Energie aufgetragen, so ergeben sich die Lösungen von Gleichung (3.6) als Schnittpunkte der beiden Graphen. Wovon hängt es ab, wie viele solche Schnittpunkte es gibt? Es ist nützlich, dafür dimensionslose Größen

$$z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}, \quad z = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (3.7)$$

einzuführen.

- d) Lösen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für $E > V_0$. Was ändert sich im Vergleich zu $E < 0$? Welche Bedingung erfüllen die Energieeigenwerte? Lösen Sie die Gleichung graphisch.
- e) Zeigen Sie, dass für $E \gg V_0$ das Energiespektrum mit dem des unendlich tiefen Potentialtopfes ohne Stufe übereinstimmt.

3.3. Teilchenfalle (10 P)

Betrachten Sie für $V_0 < 0$ das Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ V_0 & 0 < x < a \quad (\text{Bereich I}) \\ 0 & a \leq x \quad (\text{Bereich II}), \end{cases} \quad (3.8)$$

welches einen endlich tiefen Potentialtopf neben einer unendlich hohen Potentialbarriere beschreibt. In diesem Potentialtopf existieren gebundene Zustände mit $V_0 < E < 0$, die wir untersuchen möchten.

- a) Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung für $V_0 < E < 0$ in den Bereichen I und II. Nutzen Sie für den Bereich I den Ansatz

$$\psi_{\text{I}}(x) = \alpha \sin(kx + \beta), \quad (3.9)$$

wobei $\beta \in]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. Fordern Sie außerdem die Quadratintegrabilität der Lösungen.

- b) Leiten Sie aus der Schrödingergleichung die Stetigkeitsbedingungen ab und nutzen Sie letztere, um eine Bedingung für die erlaubten Energien zu finden.
- c) Bringen Sie die Gleichung aus Teilaufgabe b) in die Form

$$\sin(ka) = \dots, \quad (3.10)$$

wobei $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ ist und auf der rechten Seite ein rationaler Ausdruck steht. Plotten Sie beide Seiten dieser Gleichung, um die möglichen Energieeigenwerte zu bestimmen.

Hinweis: Beachten Sie, dass Sie in b) unter anderem gefunden haben, dass $\tan(ka) < 0$.

- d) Bestimmen Sie, wie klein V_0 höchstens sein darf, damit in der Falle bei gegebener Breite a ein Teilchen der Masse m einfangen werden kann. (D. h. geben Sie eine untere Schranke für V_0 an, damit ein gebundener Zustand existiert.)

4.1. Doppelter Delta-Potentialtopf („Molekül“) (10+2 P)

Der Hamiltonoperator eines Teilchens sei

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad V(x) = -\alpha[\delta(x) + \delta(x-a)], \quad (4.1)$$

mit $\alpha > 0$. Das Potential $V(x)$ beschreibt zwei Potentialtöpfe bei $x = 0$ und $x = a$ mit Breite l und Tiefe V_0 im Grenzfall $l \rightarrow 0$ und $V_0 \rightarrow \infty$ wobei $lV_0 = \alpha > 0$ konstant gehalten wird.

- a) Bestimmen Sie aus der Schrödinger-Gleichung die Anschlussbedingungen der Wellenfunktion und ihrer Ableitung für dieses Problem. Geben Sie explizit an, wie sich die Ableitung der Wellenfunktion bei $x = 0$ und bei $x = a$ verhält. 1 P
- b) Wir suchen nach gebundenen Zuständen, d.h. wir suchen nach Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für Energien $E < 0$. Finden Sie die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung in den drei Bereichen $x < 0$, $0 < x < a$ und $a < x$. Welche Komponenten der allgemeinen Lösung müssen ausgeschlossen werden, damit die Wellenfunktion normierbar ist? 2 P
- c) Zeigen Sie mit den Anschlussbedingungen aus Teil a), dass die Energie die Bedingung 4 P

$$e^{-\mu a} = \pm \left(1 + \frac{2\mu}{b}\right) \quad (4.2)$$

erfüllen muss, wobei $b = -2m\alpha/\hbar^2$ und $2mE = -\hbar^2\mu^2$. Stellen Sie beide Seiten dieser Gleichung graphisch dar, um mögliche Lösungen zu bestimmen. Interpretieren Sie ihr Ergebnis. Wie viele Lösungen gibt es?

- d) Zeigen Sie, dass die Eigenzustände mit $E < 0$ unter der Reflexion $x \mapsto (a-x)$ entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein müssen, also $\psi(x) \mapsto \pm\psi(x)$. Welcher der in Teil c) gefundenen Zustände ist symmetrisch, welcher ist antisymmetrisch? Skizzieren Sie die Wellenfunktionen qualitativ. 3 P

Hinweis: Folgern Sie erst aus der Schrödinger-Gleichung, dass es eine symmetrische und eine antisymmetrische Lösung geben muss. Stellen sie dann entsprechende Symmetrie-Bedingungen an die allgemeine Lösung aus Teil b). Zeigen Sie, dass die symmetrische/antisymmetrische Wellenfunktion den beiden Lösungen von (4.2) entspricht.

- e) Wir können dieses Potential als ein stark vereinfachtes Modell für ein H_2^+ -Molekül verwenden: Die Bewegung des Elektrons im Potential der Protonen an den festen Positionen $x = 0$ und $x = a$ wird durch den Hamiltonoperator (4.1) beschrieben. Wie variiert die Energie der beiden Bindungszustände mit dem Abstand a der Kerne (qualitativ)? Betrachten Sie die Grenzfälle $a \rightarrow 0$ und $a \rightarrow \infty$: Was passiert mit den Eigenzuständen und Energie-Eigenwerten? Vergleichen Sie mit dem einfachen delta-Potentialtopf (Aufgabe 3.1). +2 P

Was ändert sich qualitativ, wenn Sie den (klassischen) Energiebeitrag der Coulomb-Abstoßung der Kerne hinzunehmen? Wie variiert die Gesamtenergie mit a (qualitativ)? Erklären Sie in wenigen Worten, wie damit das Prinzip einer chemischen Verbindung und der Gleichgewichtsabstand der Kerne in einem Molekül verstanden werden kann.

→

4.2. Skalarprodukt in $L^2(\mathbb{R}^n)$ (10 P)

Im Raum $L^2(\mathbb{R}^n)$ der quadratintegriblen Funktionen $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ lässt sich ein Skalarprodukt definieren. Jedem Paar $\psi, \phi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ordnen wir eine komplexe Zahl $(\psi, \phi) \in \mathbb{C}$ zu, mit

$$(\psi, \phi) = \int \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) d^n \vec{x} . \quad (4.3)$$

a) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften des Skalarproduktes für $\psi, \phi, \chi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$: 3 P

$$\begin{aligned} (1) \quad & (\psi, \phi)^* = (\phi, \psi) , \\ (2) \quad & (\psi, \lambda\phi + \mu\chi) = \lambda(\psi, \phi) + \mu(\psi, \chi) , \\ (3) \quad & (\lambda\psi + \mu\phi, \chi) = \lambda^*(\psi, \chi) + \mu^*(\phi, \chi) . \end{aligned} \quad (4.4)$$

b) Für das Skalarprodukt gilt die Cauchy-Schwarz-Ungleichung 7 P

$$|(\psi, \phi)| \leq \sqrt{(\psi, \psi)} \sqrt{(\phi, \phi)} . \quad (4.5)$$

Zeigen Sie damit, dass $L^2(\mathbb{R}^n)$ ein Vektorraum ist.

4.3. Basisentwicklung in L^2 (10+1 P)

Betrachte die Eigenzustände $\phi_n(x)$ des Hamiltonoperators für einen unendlich tiefen Potentialtopf im Intervall $[-a, a]$ (vgl. Präsenzübung 2.1):

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi(x+a)}{2a}\right), \quad n \in \mathbb{Z}_{>0} . \quad (4.6)$$

a) Analog zu (4.3) ist ein Skalarprodukt auf $L^2([-a, a])$ definiert via 3 P

$$(\psi, \phi) := \int_{-a}^a \psi^*(x) \phi(x) dx \quad (4.7)$$

Zeigen Sie, dass die Eigenzustände $\phi_n(x)$ bezüglich dieses Skalarprodukts orthonormiert sind, also dass $(\phi_n, \phi_m) = \delta_{m,n}$ für alle $n, m \in \mathbb{Z}_{>0}$.

b) Entwickeln Sie den Zustand 3 P

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin^3\left(\frac{\pi(x+a)}{2a}\right) \quad (4.8)$$

bezüglich der Orthonormalbasis $\{\phi_n(x) \mid n \in \mathbb{Z}_{>0}\}$.

c) Finden Sie die Zeitentwicklung $\psi(x, t)$ des Zustands $\psi(x, 0) = \psi(x)$ mit $\psi(x)$ wie in (4.8), indem Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung lösen. Nutzen Sie dazu Ihr Ergebnis aus Teil b). Geben Sie die Periode der Zeitentwicklung an. 4 P

d) Welche Periode hat die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustands ψ ? Skizzieren Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte für $t = 0$ und für $t = ma^2/(\pi\hbar)$. +1 P

Die Computerübungen dürfen wahlweise mit **Mathematica** oder **Python** gelöst werden. Für den Einstieg in Python stehen auf der Stud.IP-Seite der Übungsveranstaltung ein kleines Tutorial sowie ein Jupyter-Notebook mit Hinweisen zu den für diese Übung relevanten **Python**-Befehlen bereit. Bitte speichern Sie Ihre Lösung in einer einzigen (Archiv)Datei und laden Sie diese in den dafür vorgesehenen Ordner auf Stud.IP hoch.

5.1. Zeitentwicklung eines Wellenpakets (30+5 P)

Bisher haben wir Beispiele behandelt, in denen sich die zeitabhängige Schrödingergleichung analytisch lösen lässt. Für allgemeine Potentiale $V(x)$ ist das nicht der Fall, so dass auf numerische Lösungsmethoden zurückgegriffen werden muss. Ein beliebtes Verfahren ist die *Split-Operator-Methode*, bei der Potentialterme und kinetische Terme im Hamilton-Operator abwechselnd im Ortsraum und im Impulsraum ausgewertet werden, so dass alle Operatoren einfache Multiplikationen werden. Hierzu wird in jedem Zeitschritt mit der Fouriertransformation zwischen Ortsraum und Impulsraum transformiert. Durch geschickte Wahl der Diskretisierung lässt sich der systematische Fehler auf Terme der Größenordnung Δt^3 reduzieren.

In dieser Übung wollen wir uns mit der Zeitentwicklung eines Wellenpakets in einer Dimension beschäftigen. Zunächst werden wir die relevanten Techniken und Konzepte anhand der Zeitentwicklung eines freien Teilchens kennenlernen und diese dann auf die Reflektion an einer Potentialstufe anwenden. Die Übung kann als einzelner Zeitschritt der Split-Operator-Methode aufgefasst werden.

Für ein freies Teilchen gilt die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t). \quad (5.1)$$

Die Energieeigenzustände (Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung) sind die ebenen Wellen

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad (5.2)$$

mit Energien

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (5.3)$$

welche eine vollständige Basis für den Raum aller Zustände bilden. Die Zeitentwicklung eines allgemeinen Zustands ψ kann also durch Zerlegung in diese Eigenzustände berechnet werden:

$$\psi(x, t) = \int g(k) \phi_k(x) e^{-i\omega_k t} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{-i\omega_k t} e^{ikx} dk, \quad \omega_k = E_k/\hbar. \quad (5.4)$$

Die Koeffizientenfunktion

$$g(k) = \int \phi_k^*(x) \psi(x, 0) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (5.5)$$

ist dabei die Fouriertransformierte der ursprünglichen Wellenfunktion $\psi(x, 0)$.

a) Definieren Sie als Anfangszustand ein Gaußsches Wellenpaket der Form

3 P

$$\psi(x, 0) = N_\psi e^{-(x-x_0)^2/(2\sigma^2)} e^{ik_0 x}, \quad (5.6)$$

mit (m ist die Masse des Elektrons)

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar}, \quad \sigma = \frac{20}{k_0}, \quad x_0 = -\frac{120}{k_0}, \quad E_0 = 1,4 \text{ eV}, \quad m = 0,511 \text{ MeV}/c^2. \quad (5.7)$$

Normieren Sie das Wellenpaket durch ein geeignetes N_ψ . Stellen Sie seinen Realteil, Imaginärteil und den Betrag graphisch als Funktion von x/x_0 dar.

Das Fourierintegral (5.4) kann im allgemeinen nicht analytisch bestimmt werden, es muss also für jeden Zeitpunkt t numerisch berechnet werden. Bei einer Diskretisierung mit N Punkten (für t und k) würde der Zeitaufwand mit $\mathcal{O}(N^2)$ skalieren. Ein deutlich effizienterer Algorithmus ist die *Fast Fourier Transform* (FFT), die mit $\mathcal{O}(N \log N)$ skaliert. Die FFT ist eine diskrete Fouriertransformation, welche aus einer Liste von Funktionswerten im Ortsraum $(f(x_1), \dots, f(x_N))$ eine Liste von Funktionswerten im Impulsraum $(\hat{f}(k_1), \dots, \hat{f}(k_N))$ erzeugt. Für ein Gitter der Länge $L = x_N - x_1$ ist dabei $k_i = (i - 1)/L$. In **Mathematica** ist die FFT und die inverse FFT (IFFT) in den Funktionen **Fourier[]** und **InverseFourier[]** implementiert.

- b) Definieren Sie ein Ortsraumgitter für das Intervall $x \in [-L/2, L/2]$ mit $L = 40\sigma$ und $N = 10001$ Gitterpunkten sowie ein entsprechendes Impulsraumgitter. Definieren Sie eine Funktion, welche die FFT realisiert, welche also eine Liste von Funktionswerten f auf dem Ortsraumgitter auf eine Liste von Funktionswerten $\hat{f}$ auf dem Impulsraumgitter abbildet, und welche die Normalisierung erhält. Definieren Sie eine entsprechende Funktion für die inverse FFT. In **Mathematica** ist hierbei darauf zu achten, dass die Funktion **Fourier[]** den Funktionswert an der Stelle $x = 0$ auf dem ersten Listenplatz erwartet (in **Python** ist es ähnlich). Das Ortsraumgitter muss also entsprechend zyklisch verschoben werden. Weiter muss man die FFT in **Mathematica** mit folgenden Befehlen an unsere Definition anpassen:

```
SetOptions[Fourier, FourierParameters -> {0, -1}]
SetOptions[InverseFourier, FourierParameters -> {0, -1}]
```

Nutzen Sie Ihre FFT-Funktion, um die Fouriertransformierte $g(k)$ (5.5) von $\psi(x, 0)$ aus Teil a) zu berechnen. Verifizieren Sie, dass $g(k)$ L^2 -normiert ist. Stellen Sie den Realteil, den Imaginärteil und den Betrag von $g(k)$ in einem geeigneten Intervall um das Zentrum der Verteilung graphisch dar. Transformieren Sie $g(k)$ mittels Ihrer IFFT-Funktion zurück in den Ortsraum. Verifizieren Sie, dass das Ergebnis mit $\psi(x, 0)$ übereinstimmt, indem Sie die Real- und Imaginärteile beider Funktionen in jeweils einem gemeinsamen Plot darstellen.

Bonusaufgabe: Vergleichen Sie graphisch die Realteile, Imaginärteile und Beträge Ihrer Koeffizientenfunktion $g(k)$ mit der analytischen Fouriertransformation von $\psi(x, 0)$.

- c) Verwenden Sie Ihre inverse FFT-Funktion, um die Zeitentwicklung $\psi(x, t)$ (5.4) für 5 P

$$t = \frac{2m}{\hbar k_0^2} \tilde{t} \quad \text{für alle Werte} \quad \tilde{t} \in \{0, 60, 120, 180\} \quad (5.8)$$

zu berechnen. Stellen Sie die Beträge der Wellenfunktionen graphisch dar. Beachten Sie hierbei, dass **Mathematica**s diskrete Fourier-Transformation **Fourier[]** und **InverseFourier[]** bezüglich Wellenzahlen $2\pi k$ definiert sind (das gilt auch für **numpy.fft** in **Python**). Um die korrekte Wellenfunktion zu erhalten, müssen die Wellenzahlen k in (5.4) entsprechend skaliert werden.

- d) Wir betrachten nun das gleiche anfängliche Wellenpaket $\psi(x, 0)$, welches sich aber nun in einem Stufenpotential $V(x) = V_0 \theta(x)$ mit $V_0 = 1 \text{ eV}$ bewegt, wobei $\theta(x)$ die Heaviside-Funktion ist. Die Eigenfunktionen für mit $k > \sqrt{2mV_0}/\hbar$ von links in das Stufenpotential einlaufende Teilchen sind aus der Vorlesung bekannt: 5 P

$$\tilde{\phi}_k(x) = \theta(-x) \left(e^{ikx} + \frac{k-q}{k+q} e^{-ikx} \right) + \theta(x) \frac{2k}{k+q} e^{iqx}, \quad q = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (5.9)$$

Nutzen Sie Ihre FFT- und IFFT-Funktionen, um die Koeffizientenfunktion

$$\tilde{g}(k) = \int \tilde{\phi}_k^*(x) \psi(x, 0) dx \quad (5.10)$$

der Entwicklung von $\psi(x, 0)$ in die Eigenfunktionen $\tilde{\phi}_k(x)$ zu berechnen. Sie können hierbei annehmen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte des anfänglichen Wellenpakets $\psi(x, 0)$ für $x > 0$ vernachlässigbar ist. Zeigen Sie, dass $\tilde{g}(k)$ im Rahmen der numerischen Genauigkeit normiert ist, sowie dass $\tilde{g}(k)$ nur für $k > \sqrt{2mV_0}/\hbar$ signifikant ungleich Null ist. Dies bestätigt die Konsistenz der Entwicklung.

e) Berechnen Sie die zeitentwickelte Wellenfunktion

10 P

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int \tilde{g}(k) \tilde{\phi}_k(x) e^{-i\omega_k t} dk, \quad \omega_k = \frac{E_k}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (5.11)$$

für alle Zeitpunkte

$$t = \frac{2m}{\hbar k_0^2} \tilde{t}, \quad \tilde{t} \in \{0, 50, 70, 120, 180\}. \quad (5.12)$$

Beschränken Sie sich hierbei auf den Bereich links der Potentialstufe, also $x < 0$. Verwenden Sie Ihre FFT- und IFFT-Funktionen, und nutzen Sie aus, dass die Multiplikation mit der Heaviside-Funktion $\theta(\pm x)$ mit der Integration über k vertauscht. Stellen Sie Realteil, Imaginärteil und Betrag von $\tilde{\psi}(t)$ für die obigen Zeitpunkte graphisch dar. Berechnen Sie die Norm des auf $x < 0$ eingeschränkten Wellenpakets und interpretieren Sie diese.

Bemerkung: Die Zeitentwicklung des Wellenpakets für $x > 0$ kann als Fouriertransformation in q aufgefasst werden. Um diese zu berechnen, muss die Diskretisierung in k in eine Diskretisierung in q umgewandelt werden (durch Interpolation). (Dies ist nicht Teil der Aufgabe.)

f) Erzeugen Sie eine Animation, welche die Zeitentwicklung des Wellenpakets (Realteil, Imaginärteil und Betrag) im Bereich $x \in [x_0 - 4\sigma, 0]$ für den Zeitraum $0 \leq \tilde{t} \leq 120$ zeigt. Verwenden Sie eine zeitliche Auflösung von $\Delta \tilde{t} \leq 1$. +4 P

6.1. Kommutierende Operatoren II (10 P)

Wir betrachten erneut ein System mit dem Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^3 \quad \text{mit Skalarprodukt} \quad (\psi, \phi) = \sum_{i=1}^3 \psi_i^* \phi_i, \quad (6.1)$$

wobei ψ_i und ϕ_i die Komponenten der Vektoren $\psi, \phi \in \mathbb{C}^3$ in einer Basis bezeichnen. Bezüglich einer fest gewählten Basis $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle)$ des Hilbertraums seien zwei Operatoren L und S definiert als

$$\begin{aligned} L|e_1\rangle &= 0, & L|e_2\rangle &= -|e_2\rangle, & L|e_3\rangle &= |e_3\rangle, \\ S|e_1\rangle &= |e_1\rangle, & S|e_2\rangle &= |e_3\rangle, & S|e_3\rangle &= |e_2\rangle. \end{aligned} \quad (6.2)$$

- a) Geben Sie die Matrizen an, welche in der gewählten Basis die Operatoren L , L^2 , S und S^2 beschreiben. 3 P
- b) Sind diese Operatoren selbstadjungiert? 1 P
- c) Geben Sie für jeden der Operatoren L , L^2 und S^2 den allgemeinsten selbstadjungierten Operator in Matrixdarstellung an, welcher mit dem jeweiligen Operator kommutiert. 3 P
- d) Geben sie eine gemeinsame Eigenbasis von L^2 und S an. 1 P
- e) Welche der Mengen $\{L^2\}$, $\{S\}$ und $\{L^2, S\}$ bildet einen vollständigen Satz kommutierender Observablen? 2 P

Hinweis: Die Definition eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen finden Sie auf dem Präsenzübungsblatt.

6.2. Kommutatorrelationen des Drehimpulses (10 P)

Der Drehimpulsoperator $\hat{L}$ ist komponentenweise definiert durch

$$\hat{L}_k = \epsilon_{klm} \hat{x}_l \hat{p}_m \quad (k = 1, 2, 3), \quad (6.4)$$

wobei ϵ_{klm} der total antisymmetrische Tensor ist (mit $\epsilon_{123} = 1$) und die Einsteinsche Summenkonvention verwendet wird (d.h. über wiederholte Indizes wird summiert).

- a) Zeigen Sie, dass aus den kanonischen Kommutatorrelationen für Ort und Impuls die Kommutatorrelation für den Drehimpuls 6 P

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{L}_m \quad (6.5)$$

folgt. Benutzen Sie hierzu die Relation $\epsilon_{klm} \epsilon_{kij} = \delta_{li} \delta_{mj} - \delta_{lj} \delta_{mi}$.

- b) Zeigen Sie weiter, dass $[(\hat{L})^2, L_k] = 0$ für alle k ist. 4 P

→

6.3. Baker–Campbell–Hausdorff Relation (10 P)

Gegeben seien zwei Operatoren A und B , für die gilt

$$[A, [A, B]] = 0 = [B, [A, B]] . \quad (6.6)$$

Dies ist insbesondere der Fall für $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$.

a) Zeigen Sie, dass

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + t[A, B] . \quad (6.7) \quad 5 \text{ P}$$

b) Zeigen Sie die *Baker–Campbell–Hausdorff Relation*

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} . \quad (6.8) \quad 5 \text{ P}$$

Betrachten Sie dazu die Funktion $F(t) = \exp[(A+B)t]$ und machen Sie einen Ansatz

$$F(t) = e^{p(t)A} e^{q(t)B} e^{r(t)[A,B]} \quad (6.9)$$

mit zu bestimmenden Funktionen p , q und r . Finden Sie durch Ableiten nach t eine Differentialgleichung für F , und lesen Sie durch Koeffizientenvergleich Differentialgleichungen für die gesuchten Funktionen p , q und r ab. Die Lösung des Gleichungssystems ausgewertet bei $t = 1$ ergibt die gesuchte Relation.

7.1. Kohärente Zustände (10 P)

Die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators sind

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (7.1)$$

Zeigen Sie, dass diese Zustände folgende Eigenschaften erfüllen:

- a) Die kohärenten Zustände sind Eigenzustände des Vernichtungsoperators: $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, und es gilt: $\langle\alpha|a^\dagger = \alpha^*\langle\alpha|$. 1 P

Hinweis: Benutzen Sie die Absteigerrelation $a|\psi_n\rangle = \sqrt{n}|\psi_{n-1}\rangle$.

- b) Mit $\alpha = (\alpha_1 + i\alpha_2)/\sqrt{2}$ sind die Mittelwerte des Ortes und Impulses 2 P

$$\langle\hat{x}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \alpha_1 =: x_0 \quad \text{und} \quad \langle\hat{p}\rangle = \sqrt{\hbar m\omega} \alpha_2 =: p_0. \quad (7.2)$$

Hinweis: Stellen Sie $\hat{x}$ und $\hat{p}$ durch $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ dar, und benutzen Sie die Auf- und Absteigerrelationen für die angeregten Zustände.

- c) Die Varianzen erfüllen 2 P

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \text{und} \quad \Delta p^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (7.3)$$

- d) Berechnen Sie die mittlere Energie $\langle\hat{H}\rangle$ und die Varianz ΔH^2 . Zeigen Sie, dass die relative Abweichung $\Delta H/\langle\hat{H}\rangle$ für große Amplituden klein wird. 3 P

- e) Die Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators zur Anfangsbedingung $|\alpha\rangle$ ist der kohärente Zustand $e^{-i\omega t/2}|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$. 2 P

7.2. Klassische Wahrscheinlichkeitsdichte eines harmonischen Oszillators (10 P)

Ein klassischer harmonischer Oszillator der Masse m und Frequenz ω mit bekannter Amplitude x_0 und Phase ϕ befindet sich zum Zeitpunkt t am Ort $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \phi)$. Seine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte entspricht also einer Deltafunktion

$$\rho(x, t) = \delta(x - x(t)). \quad (7.4)$$

- a) Welchen Wert hat die Amplitude x_0 für eine vorgegebene Energie E ? 1 P

- b) Bestimmen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Zeitmittel über eine Schwingungsperiode $T = 2\pi/\omega$, d. h. 3 P

$$\bar{\rho}(x) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho(x, t') dt'. \quad (7.5)$$

Benutzen Sie, dass für Funktionen $g(x)$ mit einfachen Nullstellen x_i $\delta(g(x)) = \sum_i \delta(x - x_i)/|g'(x_i)|$ gilt.

→

- c) Berechnen Sie analog die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses $\bar{\rho}(p)$ im Zeitmittel über eine Schwingungsperiode. 3 P
- d) Vergleichen Sie die Ergebnisse für $\bar{\rho}(x)$ und $\bar{\rho}(p)$ graphisch mit den Wahrscheinlichkeitsdichten für Ort und Impuls eines quantenmechanischen Oszillators in einem Energieeigenzustand mit der gleichen Energie $E = \hbar\omega(n + 1/2)$ für $n = 1$ und $n = 100$. (Verwenden Sie die Orts- und Impulsdarstellung der Energieeigenzustände $|n\rangle$ aus der Vorlesung bzw. aus der Präsenzübung.) 3 P

7.3. Hermite-Polynome und Vollständigkeit (10 P)

Die Hermite-Polynome H_n sind definiert als

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}. \quad (7.6)$$

- a) Zeigen Sie, dass 3 P

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x). \quad (7.7)$$

Man nennt die Funktion e^{-t^2+2tx} aufgrund dieses Zusammenhangs die erzeugende Funktion der Hermite-Polynome.

Hinweis: Betrachten Sie eine Taylor-Entwicklung der linken Seite, ergänzen Sie quadratisch im Exponenten und nutzen Sie die Kettenregel, um die Koeffizienten der Taylor-Entwicklung in die Form (7.6) zu bringen.

- b) Zeigen Sie mittels (7.7), dass die folgenden Rekursionsformeln gelten: 2 P

$$H'_n(x) = 2n H_{n-1}(x) \quad \text{und} \quad H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x). \quad (7.8)$$

Hinweis: Leiten Sie (7.7) ab.

- c) Die angeregten Zustände des harmonischen Oszillators sind gegeben durch 5 P

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\tilde{x}^2/2} H_n(\tilde{x}), \quad (7.9)$$

wobei $\tilde{x} = \sqrt{m\omega/\hbar} x$ ist. Zeigen Sie, dass diese folgende Vollständigkeitsrelation erfüllen:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(x') = \delta(x - x') \quad (7.10)$$

Hinweis: Benutzen Sie (7.6). Drücken Sie den letzten Faktor e^{-x^2} durch seine Fourier-Transformierte aus, um die Ableitungen in (7.6) in Impulse umzuwandeln. Setzen Sie dann alles in (7.10) ein. Sie können dann die Summe in (7.10) wieder in eine Exponentialfunktion umwandeln. Jetzt müssen Sie die Exponenten noch geschickt sortieren. Dabei könnte Ihnen auch eine Substitution von $\bar{p} := p + p'$ helfen, wobei p und p' die Impulse bezeichnen, die Sie im ersten Schritt einführen.

8.1. Drehimpuls im zweidimensionalen harmonischen Oszillator (10 P)

Der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators lautet (siehe Präsenzübung):

$$H = H_1 + H_2, \quad H_i = \hbar\omega \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right), \quad i = 1, 2. \quad (8.1)$$

Die Energieeigenwerte sind $E_n = \hbar\omega(n+1)$. Die Eigenzustände zum Eigenwert E_n sind

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0, 0\rangle, \quad (8.2)$$

wobei $n = n_1 + n_2$ und $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$.

a) Betrachten Sie den Drehimpulsoperator in x_3 -Richtung,

4 P

$$L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1, \quad (8.3)$$

und drücken Sie diesen durch die Auf- und Absteigeoperatoren $a_1, a_1^\dagger$ und $a_2, a_2^\dagger$ aus. Zeigen Sie, dass $[H, L_3] = 0$. Es muss also ein System gemeinsamer Eigenzustände von H und L_3 existieren. Sind die Zustände $|n_1, n_2\rangle$ Eigenzustände von L_3 ?

Hinweis: Nutzen Sie die in der Präsenzübung ausgerechneten Kommutatorrelationen.

b) Die gemeinsamen Eigenzustände von H und L_3 können wie folgt konstruiert werden: Definieren Sie neue Absteigeoperatoren durch

4 P

$$a_r = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 - ia_2), \quad a_\ell = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 + ia_2). \quad (8.4)$$

Zeigen Sie, dass $[a_r, a_r^\dagger] = [a_\ell, a_\ell^\dagger] = 1$ und $[a_r, a_\ell^\dagger] = [a_\ell, a_r^\dagger] = 0$, und drücken Sie H und L_3 durch die neuen Auf- und Absteigeoperatoren aus. Sie können dann analog zu (8.2) Eigenzustände definieren. Bestimmen Sie damit das Spektrum von H und L_3 .

c) Bilden H und L_3 einen VSKO?

2 P

→

8.2. Penning-Falle für geladene Teilchen (10 P)

In einer Penning-Falle wird ein statisches homogenes Magnetfeld und ein statisches elektrisches Quadrupolfeld kombiniert, um ein geladenes Teilchen zu fangen und zu speichern. In dieser Aufgabe sollen die Energieeigenzustände eines Teilchen mit Ladung q in einer Penning-Falle bestimmt werden. Der Hamiltonoperator in einem magnetostatischen Feld mit Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$ und einem elektrostatischen Feld mit skalarem Potential $V(\vec{r})$ ist

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}))^2 + qV(\vec{r}). \quad (8.5)$$

Die Potentiale in einer Penning-Falle sind

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -x_2 \\ x_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad V(\vec{r}) = \frac{V_0}{2d^2} (2x_3^2 - x_1^2 - x_2^2),$$

wobei B eine magnetische Feldstärke und V_0 ein elektrisches Potential bezeichnet. Der Parameter d legt eine Längenskala fest und beschreibt die Stärke des Gradienten des elektrischen Feldes.

- a) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator in folgende Form gebracht werden kann: 3 P

$$H = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega_i^2}{2} x_i^2 \right) - \frac{\omega_c}{2} L_3, \quad (8.6)$$

wobei L_3 die dritte Komponente des Drehimpulsvektors ist. Bestimmen Sie die Abhängigkeit der Frequenzen ω_i und der sogenannten Zyklotronfrequenz ω_c von den Parametern q , m , B , V_0 und d des Problems. Überprüfen Sie Ihre Resultate mit einer Dimensionsanalyse.

- b) Verwenden Sie die Resultate aus der Präsenzübung und aus Aufgabe 8.1, um zu zeigen, dass 3 P
der Hamiltonoperator mit geeignet definierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren als

$$H = \hbar\omega_+ a_\ell^\dagger a_\ell + \hbar\omega_- a_r^\dagger a_r + \hbar\omega_3 a_3^\dagger a_3 + \frac{\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \quad (8.7)$$

ausgedrückt werden kann. Hierbei bezieht sich a_3 auf die Bewegung in x_3 -Richtung und a_ℓ , a_r auf die Bewegung in der (x_1, x_2) -Ebene. Die auftretenden Frequenzen sind die *modifizierte Zyklotronfrequenz* ω_+ , die *Magnetronfrequenz* ω_- und die *axiale Frequenz* ω_3 .

- c) Wie lauten die Energieeigenwerte und Eigenzustände von H ? Benutzen Sie erneut die 2 P
Ergebnisse von Aufgabe 8.1.

Bemerkung: Die Magnetronfrequenz ω_- ist negativ, so dass die Energie nach unten unbeschränkt zu sein scheint. Dies liegt daran, dass H das echte Fallenpotential nur quadratisch annähert. Das echte Fallenpotential ist nach unten beschränkt.

- d) In einer Penning-Falle können Präzisionsmessungen an Elektronen, Protonen oder auch 2 P
Antiprotonen durchgeführt werden, um die Vorhersagen der Quantenfeldtheorie bezüglich des g -Faktors (also des Proportionalitätsfaktor zwischen Spin und magnetischem Dipolmoment) dieser Teilchen zu testen. Betrachten Sie dazu folgendes Beispiel: Ein Proton wird in einer Penning-Falle ($V_0 = 53 \text{ V}$, $B = 50,5 \text{ kG}$ und $d = 0,112 \text{ cm}$) im Vakuum gespeichert. Bestimmen Sie die axiale Frequenz ω_3 sowie die transversalen Frequenzen ω_+ und ω_- .

Das Teilchen befindet sich im thermischen Gleichgewicht mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld bei einer kryogenen Temperatur T . Das Teilchen befindet sich im quantenmechanischen Grundzustand bezüglich eines Freiheitsgrades, wenn die thermische Energie $E \simeq k_B T$ kleiner ist als die Anregungsenergie dieses Freiheitsgrades ($\hbar\omega_3$, $\hbar\omega_+$ oder $\hbar\omega_-$). Unterhalb welcher Temperatur befindet sich das Teilchen im Grundzustand bezüglich des axialen und des (modifizierten) Zyklotronfreiheitsgrades?

Bemerkung: Die Arbeitsgruppe von Prof. C. Ospelkaus (IQO) ist an solchen Präzisionsmessungen an Antiprotonen in Penning-Fallen beteiligt.

→

8.3. Kronig–Penney Modell (10 P)

Ein Teilchen der Masse m bewege sich in einem periodischen Potential der Form

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad \alpha > 0. \quad (8.8)$$

a) Zeigen Sie, dass die zeitunabhängige Schrödingergleichung

1 P

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (8.9)$$

im Bereich $-a/2 \leq x \leq a/2$ für $E = \hbar^2 K^2 / (2m)$ durch

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(Kx) + B \sin(Kx) & -a/2 \leq x \leq 0 \\ A \cos(Kx) + (B + 2\mu/K A) \sin(Kx) & 0 \leq x \leq a/2 \end{cases} \quad (8.10)$$

mit $\mu = m\alpha/\hbar^2$ und Amplituden $A, B \in \mathbb{C}$ gelöst wird.

b) Aufgrund des Blochschen Theorems muss für die Wellenfunktion gelten:

4 P

$$\psi_k(x - a) = \psi_k(x) e^{ika}, \quad \psi'_k(x - a) = \psi'_k(x) e^{ika}. \quad (8.11)$$

Zeigen Sie, dass solche Lösungen nur existieren können, wenn k und K die Bedingung

$$\cos(ak) = \cos(aK) + \frac{\mu}{K} \sin aK \quad (8.12)$$

erfüllen. Diskutieren Sie graphisch (qualitativ) das Auftreten von erlaubten und verbotenen Energiebändern.

c) Zeigen Sie, dass an den Rändern des ersten verbotenen Energiebandes $k = \pi/a$ und

2 P

$$\cos\left(\frac{aK}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{aK}{2}\right) + \frac{\mu}{K} \sin\left(\frac{aK}{2}\right) \right] = 0 \quad (8.13)$$

gilt. Schlussfolgern Sie hieraus, dass sich das erste verbotene Energieband von $K_1 = \pi/a$ bis $K_2 > K_1$ erstreckt, wobei K_2 die erste Nullstelle von $\cos(aK/2) + \mu/K \sin(aK/2)$ ist. (Wir beschränken uns auf positive Werte von k und K . Es gibt symmetrische Lösungen für negative Werte.)

d) Zeigen Sie damit, dass am unteren Rand des ersten verbotenen Energiebandes die Wellenfunktion die Form

3 P

$$\psi_{k=\pi/a}(x) \sim \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (8.14)$$

besitzt, und am oberen Rand

$$\psi_{k=\pi/a}(x) \sim \begin{cases} \cos(K_2 x) - \mu/K_2 \sin(K_2 x) & -a/2 \leq x \leq 0 \\ \cos(K_2 x) + \mu/K_2 \sin(K_2 x) & 0 \leq x \leq a/2. \end{cases} \quad (8.15)$$

(Die Fortsetzung in andere Intervalle ergibt sich aus dem Blochschen Theorem.)

9.1. Observablen im Zweiniveausystem (10 P)

Wir betrachten Messungen an einem System, das (effektiv) nur zwei Quantenzustände $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ besitzt. Wir identifizieren die Zustände mit Zweivektoren

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.1)$$

Observablen werden entsprechend mit 2×2 -Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (9.2)$$

identifiziert.

- a) Zeigen Sie, dass aufgrund der Hermitezität von A gilt: $A_{11}, A_{22} \in \mathbb{R}$ und $A_{12} = A_{21}^*$. Eine allgemeine Observable wird also durch vier reelle Parameter festgelegt. 2 P
- b) Zeigen Sie, dass A immer durch $A = \sum_{\alpha=0}^3 n_{\alpha} \sigma_{\alpha}$ mit $n_{\alpha} \in \mathbb{R}$ ausgedrückt werden kann, wobei 2 P

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.3)$$

die sogenannten Paulimatrizen sind.

- c) Wie lautet die Unschärferelation für die durch σ_1 und σ_2 beschriebenen Observablen? 2 P
- d) Gibt es Zustände, die beiden Observablen σ_1 und σ_2 einen scharfen Wert mit verschwindender Varianz zuordnen? 4 P

9.2. Sequenz von Messungen (10 P)

Wir betrachten das System aus Aufgabe 9.1. Drei Messgrößen in diesem System werden durch die Pauli-Matrizen σ_1 , σ_2 und σ_3 beschrieben.

- a) Die Eigenwerte der drei Observablen sind ± 1 . Wie lauten jeweils die zugehörigen Eigenzustände? 3 P
- b) Das System befinde sich im Zustand $|0\rangle$. Mit welchen Wahrscheinlichkeiten treten bei einer Messung von σ_1 die Messwerte ± 1 auf? 2 P
- c) Nach einer ersten Messung von σ_1 mit Ergebnis -1 wird in einer zweiten Messung σ_2 gemessen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit treten die Messwerte ± 1 auf? 2 P
- d) Das Ergebnis der Messung von σ_2 in Aufgabe 9.2 c) sei $+1$. Es wird nun in einer dritten Messung wieder σ_1 gemessen. Wird das Messergebnis aus der ersten Messung von σ_1 mit Sicherheit reproduziert? 3 P

→

9.3. Verallgemeinerte Unschärferelation und freie Zeitentwicklung II (10 P)

- a) Für zwei *klassische* Zufallsgrößen a und b gilt die klassische Unschärferelation

3 P

$$\Delta a \Delta b \geq |\sigma_{ab}^{\text{kl}}|$$

mit der klassischen Kovarianz $\sigma_{ab}^{\text{kl}} := \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle$ der beiden Zufallsgrößen. Beweisen Sie diese Ungleichung, indem Sie $\tilde{a} = a - \langle a \rangle$, $\tilde{b} = b - \langle b \rangle$ und $c = \tilde{a} + \lambda \tilde{b}$ definieren und verwenden, dass $\Delta a^2 = \langle \tilde{a}^2 \rangle$ und $\Delta b^2 = \langle \tilde{b}^2 \rangle$ und $\langle c^2 \rangle \geq 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$. Vergleichen Sie dies mit der Robertson–Schrödinger Unschärferelation in Präsenzübung 9.2.

- b) Wir betrachten nun weiter den Fall eines quantenmechanischen freien Teilchens mit Hamiltonoperator $H = p^2/2m$, das sich zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem Zustand minimaler Unschärfe $\Delta x(0)\Delta p(0) = \hbar/2$ befindet. Zeigen Sie, dass sich das Teilchen für $t > 0$ nicht mehr in einem Zustand minimaler Unschärfe bezüglich der Heisenberg-Unschärferelation (9.3) in Präsenzübung 9.2 befindet.

4 P

Hinweis: Benutzen Sie in dieser und der nächsten Teilaufgabe das Heisenberg-Bild, und verwenden Sie die Ergebnisse der Präsenzübung 9.2.

- c) Zeigen Sie, dass sich das Teilchen für $t > 0$ weiterhin in einem Zustand minimaler Unschärfe bezüglich der verallgemeinerten Robertson–Schrödinger-Unschärferelation (9.2) auf dem Präsenzübungsblatt befindet.

3 P

10.1. Generatoren von Drehungen II (10 P)

Sei $\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ eine Wellenfunktion im Ortsraum. Sei $\tilde{\psi}(\vec{x})$ die selbe Wellenfunktion, ausgedrückt in einem gedrehten Bezugssystem, d. h.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}) := \psi(D(\varphi, \vec{m}) \vec{x}), \quad (10.1)$$

wobei $D(\varphi, \vec{m})$ eine Drehung um die Achse $\vec{m}$ bezeichnet (siehe Präsenzübung).

- a) Bestimmen Sie den Generator G des unitären Operators $R(\varphi) = e^{-i\varphi G}$, der $|\psi\rangle$ in $|\tilde{\psi}\rangle$ überführt, der also definiert ist durch 5 P

$$|\tilde{\psi}\rangle = R(\varphi)|\psi\rangle \quad (10.2)$$

für alle $|\psi\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

Hinweis: Sie können dazu zum Beispiel eine „infinitesimale“ Drehung $d\varphi$ betrachten, für die in erster Ordnung $R(d\varphi) = 1 - i d\varphi G$ gilt, und (10.2) in Ortsdarstellung ausdrücken. Verwenden Sie den Generator von $D(\varphi, \vec{m})$ aus der Präsenzübung.

- b) Welcher Zusammenhang besteht zwischen G und den Drehimpulsgeneratoren $\vec{L}$? 4 P
- c) Was bedeutet Ihr Ergebnis von Aufgabe 10.1 b) in Worten? Ein Satz genügt. 1 P

10.2. Wellenfunktion und Drehimpuls (10 P)

Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ eines Teilchens habe in Ortsdarstellung die Form

$$\psi(\vec{x}) = (x + y + 3z) f(r), \quad (10.3)$$

wobei $r := |\vec{x}|$.

- a) Ist $\psi(\vec{x})$ ein Eigenzustand von $\vec{L}^2$? Falls ja, zu welchem Eigenwert? Falls nein, was sind die möglichen Messergebnisse und die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten bei einer Messung von $\vec{L}^2$? 4 P

Hinweis: Drücken Sie (10.3) in Kugelflächenfunktionen aus. Führen Sie dafür Kugelkoordinaten ein. Eine explizite Form der niedrigsten Kugelflächenfunktionen finden Sie im Vorlesungsskript.

- b) Nehmen Sie an, dass der radiale Anteil von (10.3) wie folgt normiert ist: 3 P

$$\int_0^\infty r^2 |r f(r)|^2 dr = 1. \quad (10.4)$$

Skalieren Sie (10.3), um eine normierte Wellenfunktion zu erhalten.

Hinweis: Nutzen Sie dazu die Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen (siehe Vorlesung).

- c) Welche Messergebnisse treten bei einer Messung von L_z mit welchen Wahrscheinlichkeiten auf? 3 P

→

10.3. Teilchen im sphärisch symmetrischen Potentialtopf endlicher Tiefe (10 P)

Ein Teilchen in drei Dimensionen befinde sich in einem Potential der Form

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ V_0 & r > a, \end{cases} \quad (10.5)$$

wobei wieder $r = |\vec{x}|$.

a) Geben Sie den Hamiltonoperator für dieses System an und bestimmen Sie mit Hilfe des Separationsansatzes $\psi(\vec{x}) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \phi)$ die Schrödingergleichung für die radiale Komponente $R(r)$ der Wellenfunktion. 3 P

b) Zeigen Sie, dass es einen gebundenen Zustand für dieses System nur ab einer Potentialtiefe von 7 P

$$V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (10.6)$$

gibt, indem Sie die Schrödingergleichung für die radiale Komponente $R(r)$ für $l = 0$ lösen. Vergleichen Sie die untere Schranke mit einer Teilchenfalle in einer Dimension (Aufgabe 3.3). Skizzieren Sie die radiale Wellenfunktion $R(r)$ des Grundzustands.

Hinweis: Substituieren Sie $R(r) = u(r)/r$.

11.1. Magnetresonanz (15 P)

Der Hamiltonoperator eines Spin-1/2 Teilchens mit magnetischem Moment $\vec{\mu} = g\mu_B \vec{S}/\hbar$ in einem externen Magnetfeld $\vec{B}(t)$ ist

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(t). \quad (11.1)$$

- a) Das Magnetfeld sei zeitunabhängig, $\vec{B} = -B_0 \vec{e}_z$. Geben Sie die Energiedifferenz der Zustände „spin up“ und „spin down“ (in z -Richtung) in Abhängigkeit von $\omega_0 = g\mu_B B_0/\hbar$ an (ω_0 ist die Larmorfrequenz, also die Präzessionsfrequenz eines magnetischen Dipols). 2 P
- b) Das Magnetfeld besitze eine konstante Komponente in z -Richtung und eine mit Frequenz ω rotierende Komponente in der (x, y) -Ebene, $\vec{B}(t) = -(B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_0)$. Lösen Sie die Schrödingergleichung für einen Anfangszustand $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$. Drücken Sie die Lösung aus durch ω_0 und $\omega_1 = g\mu_B B_1/\hbar$. 10 P
- Hinweis:* Mit $|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|+\rangle + \beta(t)|-\rangle$ erhalten sie zwei gekoppelte Differentialgleichungen für $\alpha(t)$ und $\beta(t)$, allerdings mit zeitabhängigen Koeffizienten. Mit der Substitution $\alpha(t) = e^{-i\omega t/2} \tilde{\alpha}(t)$ und $\beta(t) = e^{+i\omega t/2} \tilde{\beta}(t)$ erhalten Sie Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten, die mit Standardmitteln lösbar sind.
- c) Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit, für einen Übergang von „spin up“ zu „spin down“ (in z -Richtung) im zeitlichen Mittel durch die Rabi-Formel 3 P

$$\langle P_- \rangle = \frac{1}{2} \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \quad (11.2)$$

gegeben ist. Wenn die Frequenz ω des zeitabhängigen, transversalen Magnetfeldes mit der Aufspaltung ω_0 der Spinzustände im konstanten, longitudinalen Magnetfeld (Larmorfrequenz) übereinstimmt, tritt also eine Resonanz in der Übergangswahrscheinlichkeit auf.

→

11.2. Zwei Spin-1/2 Systeme im Singulett-Zustand (15 P)

Zwei Spin-1/2 Systeme befinden sich im „Singulett-Zustand“

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle), \quad (11.3)$$

wobei die Kurzschreibweise $|+, -\rangle = |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ etc. benutzt wird.

- a) Kann der Zustand $|\psi\rangle$ als Tensorprodukt $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\chi^{(2)}\rangle$ zweier Spinwellenfunktionen der Systeme 1 und 2 geschrieben werden? 2 P
- b) Was ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von $S_z^{(1)}$ ein Resultat „spin up“ bzw. „spin down“ zu finden? Wie lauten die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten bei einer Messung von $S_z^{(2)}$? 4 P
- c) In einer ersten Messung wird $S_z^{(1)}$ gemessen. Wie lauten die Zustände der beiden Spins bei einem Resultat „spin up“ bzw. „spin down“ nach der Messung? Was ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer darauffolgenden Messung von $S_z^{(2)}$ ein Resultat „spin up“ bzw. „spin down“ zu finden? 4 P
- d) Der Operator für die Projektion eines Spins in eine Richtung $\vec{n}$ (mit $|\vec{n}| = 1$) ist 5 P

$$S_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{S} \quad (11.4)$$

Berechnen Sie die Mittelwerte $\langle S_{\vec{n}}^{(1)} \rangle$ und $\langle S_{\vec{m}}^{(2)} \rangle$ und zeigen Sie, dass die mittlere Korrelation einer Messung von $S_{\vec{n}}^{(1)}$ an Spin 1 und $S_{\vec{m}}^{(2)}$ an Spin 2

$$\langle S_{\vec{n}}^{(1)} \otimes S_{\vec{m}}^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \vec{n} \cdot \vec{m} \quad (11.5)$$

ist. Messungen entlang der gleichen Richtung $\vec{n} = \vec{m}$ sind also perfekt antikorreliert.

In dieser Computerübung sind Codebeispiele und Hinweise in **Mathematica** gegeben, entsprechend empfehlen wir, die Aufgabe in **Mathematica** zu lösen. Wer erfahren in **Python** ist und es sich zutraut, darf die Aufgabe aber auch mit **Python** lösen. Bitte speichern Sie Ihre Lösung in einer einzigen (Archiv)Datei und laden Sie diese in den dafür vorgesehenen Ordner auf Stud.IP hoch.

12.1. Zweiteilchensystem mit Kontaktterm (30+5 P)

Wir betrachten ein System von zwei identischen Teilchen in einer Dimension. Die Teilchen sind in einem unendlich tiefen Potentialtopf der Breite a gefangen und unterliegen einer Wechselwirkung, die durch ein Kontaktpotential κV_{int} beschrieben wird. Im Ortsraum lautet der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \hat{T} + V(x_1) + V(x_2) + \kappa V_{\text{int}}(x_1, x_2), \quad \hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2, \quad \hat{T}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2},$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}, \quad V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2). \quad (12.1)$$

Im folgenden möchten wir die Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenfunktionen dieses Zweiteilchensystems numerisch untersuchen. Für den Zweck dieser Übung kann $\hbar = a = m = 1$ gesetzt werden.

Basen endlicher Auflösung. Wir betrachten zuerst ein einzelnes Teilchen im Potential $V(x)$, also mit Hamiltonoperator $H = T + V(x)$, mit $V(x)$ wie oben und $T = -\hbar^2/2m \cdot \partial^2/\partial x^2$. Der Hilbertraum für ein Teilchen im unendlich tiefen Potentialtopf ist der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen $\psi(x)$ auf dem Intervall $x \in [0, a]$ mit Randbedingungen $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Eine natürliche orthonormale Basis für den Hilbertraum sind die bekannten Energieeigenfunktionen

$$\langle x|n\rangle = \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n \in \mathbb{Z}_{>0}. \quad (12.2)$$

In dieser Basis ist der kinetische Energieoperator $\hat{T}$ diagonal:

$$T\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \quad \Leftrightarrow \quad \langle n|\hat{T}|n'\rangle = E_n\delta_{nn'}, \quad \hat{T} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle E_n \langle n|, \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \quad (12.3)$$

Die potentielle Energie ist dagegen in dieser Basis schwer auszudrücken, sie ist meist im Ortsraum gegeben. Wir brauchen also eine Methode, um effizient zwischen Energieeigenbasis und Ortsraumbasis hin- und herzutransformieren.

Da wir numerisch nicht mit unendlich vielen Funktionen rechnen können, müssen wir uns auf endlich viele Basisfunktionen beschränken. Wir sind vor allem an den Zuständen niedriger Energie interessiert. Diese lassen sich in guter Näherung durch einen endlichen Satz von Basisfunktionen $\{\phi_n(x) \mid 1 \leq n \leq n_{\text{max}}\}$ mit einem (nicht zu kleinen) cutoff n_{max} beschreiben. Auch im Ortsraum müssen wir uns auf eine endliche Zahl von Basisfunktionen beschränken. Hierzu definieren wir ein Ortsraumgitter mit Gitterpunkten

$$x_j = j \Delta, \quad j \in \{1, \dots, n_{\text{max}}\}, \quad \Delta = \frac{a}{n_{\text{max}} + 1}. \quad (12.4)$$

Für jeden Gitterpunkt definieren wir einen Zustand $|j\rangle$, welcher im von $\phi_n(x)$, $n \leq n_{\text{max}}$ aufgespannten Raum einer Deltafunktion so nah wie möglich kommt:

$$|j\rangle = \sqrt{\Delta} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \phi_n(x_j) |n\rangle, \quad \vartheta_j(x) := \langle x|j\rangle = \sqrt{\Delta} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \phi_n(x_j) \phi_n(x). \quad (12.5)$$

Diese Funktionen bilden eine orthonormale *Ortsraumbasis endlicher Auflösung* im folgenden Sinne: $\langle j|j' \rangle = \delta_{jj'}$ und die Funktionen sind auf dem Gitter $\{x_j\}_{j=1}^{n_{\max}}$ lokal:

$$\langle x_{j'}|j \rangle = \vartheta_j(x_{j'}) = \frac{\delta_{jj'}}{\sqrt{\Delta}}, \quad j, j' \in \{1, \dots, n_{\max}\}. \quad (12.6)$$

Wir werden Zustände $|\psi\rangle$ darstellen durch die Koeffizienten $\{u_n^\psi | n = 1, \dots, n_{\max}\}$ der Entwicklung in der Energieeigenbasis, oder äquivalent durch die Koeffizienten $\{\nu_j^\psi | j = 1, \dots, n_{\max}\}$ der Entwicklung in der Ortsraumbasis:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{n_{\max}} u_n^\psi |n\rangle = \sum_{j=1}^{n_{\max}} \nu_j^\psi |j\rangle. \quad (12.7)$$

Im folgenden werden wir Zustände und Operatoren zwischen diesen beiden Darstellungen umrechnen müssen. Die Basistransformationsmatrix X folgt aus der Definition der Zustände:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{n_{\max}} \nu_j^\psi |j\rangle = \sum_{j=1}^{n_{\max}} \nu_j^\psi \sum_{n=1}^{n_{\max}} |n\rangle \langle n|j\rangle = \sum_{n=1}^{n_{\max}} \left[\sum_{j=1}^{n_{\max}} \langle n|j\rangle \nu_j^\psi \right] |n\rangle, \quad (12.8)$$

also

$$u_n^\psi = \sum_{j=1}^{n_{\max}} X_{nj} \nu_j^\psi, \quad X_{nj} = \langle n|j\rangle = \sqrt{\Delta} \phi_n(x_j) = \sqrt{\Delta \frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x_j}{a}\right), \quad (12.9)$$

und entsprechend die inverse Transformation:

$$|n\rangle = \sum_{j=1}^{n_{\max}} |j\rangle \langle j|n\rangle \quad \Rightarrow \quad \nu_j^\psi = \sum_{n=1}^{n_{\max}} X_{nj} u_n^\psi. \quad (12.10)$$

Die Matrix X ist symmetrisch, $X_{nj} = X_{jn}$, darum ist die Basistransformation selbstinvers, $X^2 = 1$. Für große Zustandsräume wird die Matrixmultiplikation mit X unpraktikabel (für ein N -Teilchensystem hat der Zustandsraum $(n_{\max})^N$ Dimensionen). Allerdings entspricht die Multiplikation mit der Matrix X gerade der *diskreten Sinustransformation vom Typ I* (DST-I), welche numerisch sehr effizient ist.

- a) Für diese Teilaufgabe können Sie $n_{\max} = 10$ setzen. Definieren Sie die Basisfunktionen (12.2). 7 P
Zeigen Sie numerisch, dass die $\{\phi_n(x) | n = 1, \dots, n_{\max}\}$ orthonormal sind, und verifizieren Sie (12.3). Definieren Sie auch die Ortsbasisfunktionen (12.5) und verifizieren Sie deren Orthonormalität sowie (12.6). Plotten Sie die Funktionen $\{\vartheta_j(x) | j = 1, \dots, n_{\max}\}$ im Intervall $x \in [0, a]$. Definieren Sie nun die Basistransformationsmatrix X (12.9). Verifizieren Sie numerisch, dass

$$X_{nj} = \langle n|j\rangle = \int_0^a \phi_n(x) \vartheta_j(x) dx, \quad n, j = 1, \dots, n_{\max}, \quad (12.11)$$

sowie dass $X^2 = 1$. Zeigen Sie jetzt durch numerischen Vergleich, dass die Multiplikation mit X identisch zur DST-I ist.

Hinweis: Für eine Koeffizientenliste $\mathbf{u}$ ist die DST-I in *Mathematica* durch `FourierDST[u, 1]` gegeben.

Einteilchenoperatoren. Als nächstes müssen wir Operatoren auf dem Zustandsraum definieren. Für den Operator der potentiellen Energie benötigen wir den Ortsoperator

$$\hat{x} = \int_0^a dx |x\rangle x \langle x|. \quad (12.12)$$

In der Energieeigenbasis sind dessen Matricelemente

$$\begin{aligned}\hat{x}_{nn'}^E &= \langle n | \hat{x} | n' \rangle = \int_0^a \langle n | x \rangle x \langle x | n' \rangle dx = \int_0^a x \phi_n(x) \phi_{n'}(x) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n'\pi x}{a}\right) dx = \begin{cases} \frac{a}{2} & n = n', \\ -\frac{8ann'}{\pi^2(n^2 - n'^2)^2} & n - n' \text{ ungerade}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (12.13)\end{aligned}$$

Die Matricelemente in der Ortsbasis erhalten wir durch Konjugation mit X :

$$\hat{x}_{jj'}^P = \langle j | \hat{x} | j' \rangle = \sum_{n,n'=1}^{n_{\max}} \langle j | n \rangle \langle n | \hat{x} | n' \rangle \langle n' | j' \rangle = \sum_{n,n'=1}^{n_{\max}} X_{jn} \hat{x}_{nn'}^E X_{n'j'} = (X^T \cdot \hat{x}^E \cdot X)_{jj'}, \quad (12.14)$$

welche wiederum die DST-I von $\hat{x}^E$ ist. Obwohl unsere Ortsbasis nur eine begrenzte Auflösung hat, ist der Ortsoperator $\hat{x}^P$ nahezu diagonal. Um die Rechenzeiten zu verringern, können wir ohne signifikanten Genauigkeitsverlust die diagonale Näherung $\hat{x}_{jj'}^P = \delta_{jj'} x_j$ verwenden.

Der Energieoperator ist per Definition diagonal in der Energiebasis (12.3), seine Darstellung in der Ortsbasis erhalten wir wiederum mittels Konjugation mit X bzw. DST-I:

$$\hat{T}_{nn'}^E = \langle n | \hat{T} | n' \rangle = E_n \delta_{nn'}, \quad \hat{T}_{jj'}^P = (X^T \cdot \hat{T}^E \cdot X)_{jj'}. \quad (12.15)$$

- b) Verifizieren Sie numerisch den letzten Schritt von (12.13) für $n, n' \leq 10$. Im folgenden 5 P können Sie $n_{\max} = 30$ setzen. Definieren Sie den Ortsoperator für ein Teilchen (12.13) als Matrix in der Energiebasis. Für die folgenden Anwendungen ist es sinnvoll, alle Matrizen als „dünnbesetzte Matrizen“ (sparse array) zu definieren. In **Mathematica** geht das z. B. über

```
x1E = SparseArray[{
  Band[{1,1}] -> a/2,
  {n1_, n2_} /; OddQ[n1-n2] -> ...
}, {nmax, nmax}]
```

Nutzen Sie jetzt die DST-I, um den den Ortsoperator in der Ortsbasis zu definieren:

```
x1P = FourierDST[x1E, 1]
```

Zeigen Sie, dass **x1P** nahezu diagonal ist, indem Sie den Mittelwert, die Standardabweichung und den Maximalwert der Differenzen $|\hat{x}_{jj'}^P - \delta_{jj'} x_j|$ berechnen und diese mit Δ vergleichen. In **Mathematica** erhalten Sie die Liste der Differenzen mit

```
delta = ...
xgrid = Range[nmax] delta
Flatten[Abs[x1P - DiagonalMatrix[xgrid]]]
```

Definieren Sie schließlich für die weitere Verwendung den diagonal genäherten Ortsoperator in der Orts- und Energiebasis:

```
x1P = SparseArray[Band[{1,1}] -> xgrid]
x1E = FourierDST[x1P, 1]
```

Definieren Sie analog den Energieoperator als Diagonalmatrix in der Energiebasis und als dessen DST-I-Transformierte in der Ortsbasis.

Hinweis: Für **Python** finden sich Algorithmen für dünnbesetzte Matrizen im Paket **scipy.sparse**.

Zweiteilchensystem. Der Zustandsraum (Hilbertraum) des Systems aus zwei Teilchen ist das Tensorprodukt von zwei identischen Einteilchen-Zustandsräumen: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$. Die beiden Terme des Energieoperators $\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2$ wirken jeweils nur auf einen Faktor des Tensorprodukts: $\hat{T}_1 = \hat{T}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$ und $\hat{T}_2 = \mathbf{1} \otimes \hat{T}^{(1)}$, wobei $\hat{T}^{(1)}$ der Einteilchen-Energieoperator ist und $\mathbf{1}$ der Einteilchen-Identitätsoperator. Einzig der Wechselwirkungsterm V_{int} wirkt nicht-trivial auf dem Tensorprodukt. Die Definition (12.1) ist eine Kurzform der vollen Operatordefinition

$$\hat{V}_{\text{int}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 (|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle) \delta(x_1 - x_2) (\langle x_1| \otimes \langle x_2|). \quad (12.16)$$

Als Basis für das Tensorprodukt $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ können wir die Tensorprodukte

$$\{|j_1, j_2\rangle \equiv |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \mid j_1, j_2 = 1, \dots, n_{\text{max}}\} \quad (12.17)$$

der Ortsbasis endlicher Auflösung verwenden, oder auch die Tensorprodukte der Energieeigenbasis $\{|n_1, n_2\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \mid n_1, n_2 = 1, \dots, n_{\text{max}}\}$. In der Ortsbasis sind die Matrixelemente des Wechselwirkungsterms

$$\begin{aligned} (\hat{V}_{\text{int}}^{\text{P}})_{j_1, j_2; j'_1, j'_2} &= \langle j_1, j_2 | \hat{V}_{\text{int}} | j'_1, j'_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \langle j_1 | x_1 \rangle \langle j_2 | x_2 \rangle \delta(x_1 - x_2) \langle j'_1 | x'_1 \rangle \langle j'_2 | x'_2 \rangle \\ &= \int_0^a dx \vartheta_{j_1}(x) \vartheta_{j_2}(x) \vartheta_{j'_1}(x) \vartheta_{j'_2}(x). \end{aligned} \quad (12.18)$$

Mit (12.5) findet man

$$\begin{aligned} (\hat{V}_{\text{int}}^{\text{P}})_{j_1, j_2; j'_1, j'_2} &= \frac{1}{2a} \sum_{n_1, n_2, n_3, n_4=1}^{n_{\text{max}}} X_{n_1, j_1} X_{n_2, j_2} X_{n_3, j'_1} X_{n_4, j'_2} \cdot \\ &\quad \cdot (\delta_{n_1+n_2, n_3+n_4} + \delta_{n_1+n_3, n_2+n_4} + \delta_{n_1+n_4, n_2+n_3} \\ &\quad - \delta_{n_1, n_2+n_3+n_4} - \delta_{n_2, n_1+n_3+n_4} - \delta_{n_3, n_1+n_2+n_4} - \delta_{n_4, n_1+n_2+n_3}). \end{aligned} \quad (12.19)$$

- c) Für diese und alle folgenden Teilaufgaben können Sie $n_{\text{max}} = 30$ setzen. Definieren Sie den Zweiteilchen-Energieoperator $\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2$ als Matrix, die auf dem Tensorproduktraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ in der Ortsbasis (12.17) wirkt. Stellen Sie hierzu die Elemente von $\mathcal{H}$ als Vektoren mit n_{max}^2 Komponenten dar, so dass $\hat{T}^{\text{P}}$ eine zweidimensionale $(n_{\text{max}}^2 \times n_{\text{max}}^2)$ -Matrix ist.

Hinweis: Verwenden Sie Ihren Einteilchen-Energieoperator $\hat{T}^{(1)\text{P}}$ aus Aufgabe 12.1 b) sowie die Befehle **KroneckerProduct** und **IdentityMatrix** in **Mathematica**.

Definieren Sie nun den Wechselwirkungsterm $V_{\text{int}}^{\text{P}}$ wie in (12.19). Realisieren Sie die Multiplikation mit X und Summation über n_i als DST-I, in **Mathematica** z. B. via

```
VintP4 = 1/(2a) FourierDST[Table[... ,
{ n1, nmax}, { n2, nmax}, { n3, nmax}, { n4, nmax}], 1]
```

Verifizieren Sie die Gleichheit von (12.18) und (12.19), indem Sie alle Matrixelemente in (12.18) für $j_i \leq 3$ numerisch berechnen. Bringen Sie nun **VintP4** in zweidimensionale $(n_{\text{max}}^2 \times n_{\text{max}}^2)$ -Form. In **Mathematica** erledigt dies der Befehl **ArrayFlatten**. Definieren Sie schließlich den vollen Hamiltonoperator $\hat{H}^{\text{P}} = \hat{T}^{\text{P}} + \kappa \hat{V}_{\text{int}}^{\text{P}}$ als Matrix in der Ortsbasis.

Eigenzustände. Die Energieeigenwerte und die zugehörigen Wellenfunktionen des Zweiteilchensystems sind die Eigenwerte und Eigenzustände der Matrix $\hat{H}^{\text{P}}$. Die komplette $(n_{\text{max}}^2 \times n_{\text{max}}^2)$ -Matrix zu diagonalisieren ist numerisch zu aufwendig. Wir sind insbesondere an den Zuständen niedriger Energie interessiert, also an den kleinsten Eigenwerten. Für die Berechnung extremaler Eigenwerte gibt es den sehr effizienten Arnoldi-Lanczos-Algorithmus.

- d) Berechnen Sie für $\kappa = -10$ und für $\kappa = 25$ jeweils die 8 niedrigsten Eigenwerte und die zugehörigen Eigenzustände. In **Mathematica** kann der Arnoldi-Lanczos-Algorithmus mit

```
Eigensystem[... , Method -> {"Arnoldi"}, "Criteria" -> "RealPart",
MaxIterations -> 10^6]
```

benutzt werden. **Eigensystem** findet die größten Eigenwerte, also muss der Befehl als **-Eigensystem[-HP, ...]** verwendet werden, wenn **HP** der Hamiltonoperator ist. Plotten Sie die gefundenen Eigenzustände so, dass auf dem zweidimensionalen Gitter (x_{j_1}, x_{j_2}) die (reellen) Werte der Wellenfunktion als Werte auf einer Farbskala wiedergegeben werden. In **Mathematica** können Sie hierzu den Eigenvektor mit $n_{\max}^2$ Komponenten mittels **ArrayReshape[... , {nmax, nmax}]** in die entsprechende $(n_{\max} \times n_{\max})$ -Matrix überführen, und diese mittels

```
cf[x_] := Blend[{Blue, White, Red}, x];
ArrayPlot[... , ColorFunction -> cf]
```

plotten. Stellen Sie (durch geeignete Anwendung von **Reverse** und **Transpose**) sicher, dass der Ursprung $(x_{j_1}, x_{j_2}) = (0, 0)$ in der linken unteren Ecke liegt.

Hinweis: In **Python** ist der Arnoldi-Lanczos-Algorithmus in der Funktion `scipy.sparse.linalg.eigs` implementiert.

In den Plots kann man sehen, dass die Teilchen sich für $\kappa < 0$ anziehen, während sie sich für $\kappa > 0$ abstoßen. Weiter kann man erkennen, dass die Zustände unter dem Teilchenaustausch $x_1 \leftrightarrow x_2$ entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sind. Die Energieeigenzustände sind also auch Eigenzustände des Teilchenaustauschoperators Ξ . Wegen $\Xi^2 = 1$ hat Ξ nur Eigenwerte ± 1 :

$$\Xi : \psi(x_1, x_2) \mapsto \psi(x_2, x_1), \quad \Xi|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle \quad \text{wenn} \quad \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (12.20)$$

Für normierte Eigenzustände $|\psi\rangle$ lässt sich der Eigenwert von Ξ (die Symmetrie des Zustands) also messen mit

$$\langle\psi|\Xi|\psi\rangle = \pm\langle\psi|\psi\rangle = \pm 1. \quad (12.21)$$

Da Ξ nur Eigenwerte ± 1 hat, lässt sich der Zustandsraum in einen bosonischen (symmetrischen) Zustandsraum und einen fermionischen (antisymmetrischen) Zustandsraum aufteilen.

- e) Berechnen Sie den mittleren Teilchenabstand $\langle|x_{12}|\rangle$, $x_{12} = x_1 - x_2$ sowie dessen Varianz $\Delta|x_{12}|^2$ und Standardabweichung $\Delta|x_{12}|$ für den Grundzustand als Funktion von κ . Plotten Sie Ihre Resultate im Bereich $-20 \leq \kappa \leq 30$.

Hinweis: Mit dem Einteilchen-Ortsoperator **x1P** aus Aufgabe 12.1 b) kann man die Ortsoperatoren $\hat{x}_1^P$ und $\hat{x}_2^P$ in **Mathematica** folgendermaßen definieren:

```
id = IdentityMatrix[nmax, SparseArray];
x1P1 = KroneckerProduct[x1P, id];
x1P2 = KroneckerProduct[id, x1P];
```

Bonusteil. Die Grundzustandswellenfunktion lässt sich auch analytisch bestimmen. Sie hat die Form

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= A \begin{cases} \psi_I(x_1, x_2) & 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq 1, \\ \psi_{II}(x_1, x_2) = \psi_I(x_2, x_1) & 0 \leq x_2 \leq x_1 \leq 1, \end{cases} \\ \psi_I(x_1, x_2) &= \cos(\alpha(x_1 + x_2 - 1)) \cos(\beta(x_1 - x_2 + 1)) \\ &\quad - \cos(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \cos(\beta(x_1 + x_2 - 1)), \end{aligned} \quad (12.22)$$

mit Energieeigenwert $E = \alpha^2 + \beta^2$, wobei α und β folgende Bedingungen erfüllen müssen (für $\hbar = m = a = 1$, siehe Zusatzmaterial):

$$\alpha \tan \alpha = \beta \tan \beta = \frac{\kappa}{2} . \quad (12.23)$$

Die Bedingung lässt sich nur numerisch lösen. Für jeden Wert von κ erfüllen unendlich viele (α, β) die Bedingung. Der richtige Grundzustand ist wie immer durch eine Wellenfunktion mit einem Minimum an Knotenpunkten ausgezeichnet. Für $\kappa = 0$ ist im Grundzustand $\alpha = \pi$ und $\beta = 0$. Für andere Werte von κ sind die richtigen Lösungen $\alpha(\kappa)$, $\beta(\kappa)$ durch stetige Fortsetzung vom Punkt $\kappa = 0$ gegeben. Insbesondere muss β für $\kappa < 0$ imaginär werden. Mit $\beta = i\tilde{\beta}$ wird die Bedingung zu

$$\frac{\kappa}{2} = i\tilde{\beta} \tan(i\tilde{\beta}) = -\tilde{\beta} \tanh(\tilde{\beta}) \quad (12.24)$$

Um die richtige Lösung für jedes κ zu finden, muss der Startwert für das numerische Iterationsverfahren gut ausgewählt werden.

- f) *Bonusaufgabe:* Finden und plotten Sie den Energieeigenwert $\alpha^2 + \beta^2$ des Grundzustands für $-20 \leq \kappa \leq 30$. Verwenden Sie dazu folgende Startwerte α_0 , β_0 , $\tilde{\beta}_0$ für das numerische Iterationsverfahren: +5 P

$$\alpha_0 = \pi \arctan\left(\frac{\kappa}{2\pi}\right),$$

$$\beta_0 = \begin{cases} 1 & 0 < \kappa < \pi, \\ \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{\kappa} + \frac{2\pi}{\kappa^2} & \pi < \kappa, \end{cases} \quad \tilde{\beta}_0 = -\frac{\kappa}{2} \quad (\kappa < 0) \quad (12.25)$$

Vergleichen Sie die Grundzustandsenergie $\alpha^2 + \beta^2$ graphisch mit der Energie des zuvor numerisch gefundenen Grundzustands in einem gemeinsamen Plot im Bereich $-20 \leq \kappa \leq 30$.

Hinweis: Verwenden Sie in *Mathematica* z. B.

```
beta[kappa_ /; 0 <= kappa && kappa < Pi] :=
  beta[kappa] = u /. FindRoot[u*Tan[u] == kappa/2, {u, 1}]
```

Grundzustand im Zweiteilchensystem mit Kontaktterm

Wir betrachten ein System von zwei identischen Teilchen in einer Dimension. Die Teilchen sind in einem unendlich tiefen Potentialtopf der Breite a gefangen und unterliegen einer Wechselwirkung, die durch ein Kontaktpotential κV_{int} beschrieben wird. Im Ortsraum lautet der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \hat{T} + V(x_1) + V(x_2) + \kappa V_{\text{int}}(x_1, x_2), \quad \hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2, \quad \hat{T}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2},$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}, \quad V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2). \quad (12.1)$$

Im folgenden können wir $\hbar = m = a = 1$ setzen. Wir wollen die Grundzustandswellenfunktion untersuchen. Sie hat die Form

$$\psi(x_1, x_2) = A \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) & 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq 1, \\ \psi_{\text{II}}(x_1, x_2) = \psi_{\text{I}}(x_2, x_1) & 0 \leq x_2 \leq x_1 \leq 1, \end{cases}$$

$$\psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \cos(\alpha(x_1 + x_2 - 1)) \cos(\beta(x_1 - x_2 + 1)) - \cos(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \cos(\beta(x_1 + x_2 - 1)). \quad (12.2)$$

Randbedingungen

Wir können verifizieren, dass die Wellenfunktion (12.2) folgende Randbedingungen erfüllt:

- $\psi(x_1, 0) = \psi(0, x_2) = \psi(x_1, 1) = \psi(1, x_2) = 0$,
- Stetigkeit am Übergang von $x_1 < x_2$ zu $x_1 > x_2$,
- Symmetrien des Problems: $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = \psi(1 - x_1, 1 - x_2)$.

Randbedingungen bei $x_1 = 0, 1$ und $x_2 = 0, 1$:

$$\begin{aligned} \psi(x_1, 0) &= \psi_{\text{II}}(x_1, 0) = \cos(\alpha(x_1 - 1)) \cos(\beta(1 - x_1)) - \cos(\alpha(1 - x_1)) \cos(\beta(x_1 - 1)) = 0, \\ \psi(0, x_2) &= \psi_{\text{I}}(0, x_2) = \cos(\alpha(x_2 - 1)) \cos(\beta(1 - x_2)) - \cos(\alpha(1 - x_2)) \cos(\beta(x_2 - 1)) = 0, \\ \psi(x_1, 1) &= \psi_{\text{I}}(x_1, 1) = \cos(\alpha x_1) \cos(\beta x_1) - \cos(\alpha x_1) \cos(\beta x_1) = 0, \\ \psi(1, x_2) &= \psi_{\text{II}}(1, x_2) = \cos(\alpha x_2) \cos(\beta x_2) - \cos(\alpha x_2) \cos(\beta x_2) = 0. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Stetigkeit am Übergang von $x_1 < x_2$ zu $x_1 > x_2$ ist äquivalent zu $\psi_{\text{I}}(x, x) = \psi_{\text{II}}(x, x)$:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x, x) &= \cos(\alpha(2x - 1)) \cos(\beta) - \cos(\alpha) \cos(\beta(2x - 1)), \\ \psi_{\text{II}}(x, x) &= \cos(\alpha(2x - 1)) \cos(\beta) - \cos(\alpha) \cos(\beta(2x - 1)) = \psi_{\text{I}}(x, x). \end{aligned} \quad (12.4)$$

Symmetrien: Die erste Identität ist unmittelbar klar, da $\psi_{\text{II}}(x_2, x_1) = \psi_{\text{I}}(x_1, x_2)$: Nimm o. B. d. A. an, dass $x_1 \leq x_2$. Dann:

$$\psi(x_2, x_1) = \psi_{\text{II}}(x_2, x_1) = \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2). \quad (12.5)$$

Außerdem:

$$\begin{aligned} \psi(1 - x_1, 1 - x_2) &= \psi_{\text{II}}(1 - x_1, 1 - x_2) \\ &= \cos(\alpha(1 - x_2 - x_1)) \cos(\beta(x_1 - x_2 + 1)) - \cos(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \cos(\beta(1 - x_2 - x_1)) \\ &= \cos(\alpha(x_1 + x_2 - 1)) \cos(\beta(x_1 - x_2 + 1)) - \cos(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \cos(\beta(x_1 + x_2 - 1)) \\ &= \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (12.6)$$

Energieeigenwert

Weiter können wir zeigen, dass $\psi(x_1, x_2)$ im Bereich $x_1 \neq x_2$ die zeitunabhängige Schrödingergleichung löst, mit Energieeigenwert $E = \alpha^2 + \beta^2$.

Es ist

$$\begin{aligned}\hat{T}_1 \psi_I(x_1, x_2) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_I(x_1, x_2) \\ &= \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \psi_I(x_1, x_2) - \frac{\alpha\beta}{2} [2 \sin(\alpha(x_1 + x_2 - 1)) \sin(\beta(x_1 - x_2 + 1)) \\ &\quad - 2 \sin(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \sin(\beta(x_1 + x_2 - 1))] ,\end{aligned}\quad (12.7)$$

$$\begin{aligned}\hat{T}_2 \psi_I(x_1, x_2) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \psi_I(x_1, x_2) \\ &= \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \psi_I(x_1, x_2) - \frac{\alpha\beta}{2} [-2 \sin(\alpha(x_1 + x_2 - 1)) \sin(\beta(x_1 - x_2 + 1)) \\ &\quad + 2 \sin(\alpha(x_1 - x_2 + 1)) \sin(\beta(x_1 + x_2 - 1))] .\end{aligned}\quad (12.8)$$

Also:

$$\hat{T} \psi_I(x_1, x_2) = E \psi_I(x_1, x_2), \quad E = \alpha^2 + \beta^2 . \quad (12.9)$$

Genauso findet man

$$\hat{T} \psi_{II}(x_1, x_2) = E \psi_{II}(x_1, x_2), \quad E = \alpha^2 + \beta^2 . \quad (12.10)$$

Relativkoordinaten

Jetzt drücken wir den Hamiltonoperator und die Wellenfunktion durch folgende Relativkoordinaten aus:

$$R = x_1 + x_2 \quad \text{und} \quad r = x_1 - x_2 . \quad (12.11)$$

Es ist

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial}{\partial r}, \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\partial}{\partial r} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = 2 \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \quad (12.12)$$

und

$$\delta(x_1 - x_2) = \delta(r) . \quad (12.13)$$

Also:

$$\hat{H} = \hat{T} + \kappa \delta(r) + V(R, r), \quad \hat{T} = -\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} , \quad (12.14)$$

wobei

$$V(R, r) = \begin{cases} 0 & 0 \leq R \pm r \leq 2, \\ \infty & \text{sonst} . \end{cases} \quad (12.15)$$

Die Wellenfunktion (12.2) ist

$$\begin{aligned}\psi(R, r) &= A \begin{cases} \psi_I(R, r) & 0 \leq R + r \leq R - r \leq 2, \\ \psi_{II}(R, r) & 0 \leq R - r \leq R + r \leq 2, \end{cases} \\ \psi_I(R, r) &= \cos(\alpha(R - 1)) \cos(\beta(r + 1)) - \cos(\alpha(r + 1)) \cos(\beta(R - 1)) , \\ \psi_{II}(R, r) &= \psi_I(R, -r) .\end{aligned}\quad (12.16)$$

Quantisierungsbedingung

Die Anschlussbedingung für ψ' bei $r = 0$ erhalten wir wie üblich durch Integration der Schrödingergleichung in (R, r) -Koordinaten über $r \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ mit $\varepsilon > 0$. Wir werden sehen, dass die sich ergebende Anschlussbedingung im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ äquivalent wird zu

$$\alpha \tan \alpha = \beta \tan \beta = \frac{\kappa}{2}. \quad (12.17)$$

Die Integration ergibt

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{H} \psi(R, r) - E \psi(R, r) \, dr = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{H} \psi(R, r) \, dr \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{T} \psi(R, r) \, dr + \kappa \psi(R, 0) \right]. \end{aligned} \quad (12.18)$$

Nun ist $\partial^2 \psi(R, r) / \partial R^2$ im Bereich $r \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ stetig, also ist

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \psi(R, r) \, dr = 0. \quad (12.19)$$

Damit erhalten wir

$$0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[- \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(R, r) \, dr \right] + \kappa \psi(R, 0) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial r} \psi(R, r) \right]_{r=-\varepsilon}^{\varepsilon} + \kappa \psi(R, 0). \quad (12.20)$$

Es ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{I}}(R, r) &= -\beta \cos(\alpha(R-1)) \sin(\beta(r+1)) + \alpha \sin(\alpha(r+1)) \cos(\beta(R-1)) \\ \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{II}}(R, r) &= \beta \cos(\alpha(R-1)) \sin(\beta(-r+1)) - \alpha \sin(\alpha(-r+1)) \cos(\beta(R-1)), \end{aligned} \quad (12.21)$$

also

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial r} \psi(R, r) \right]_{r=-\varepsilon}^{\varepsilon} = 2\beta \cos(\alpha(R-1)) \sin(\beta) - 2\alpha \sin(\alpha) \cos(\beta(R-1)). \quad (12.22)$$

Mit

$$\psi(R, 0) = \cos(\alpha(R-1)) \cos(\beta) - \cos(\alpha) \cos(\beta(R-1)) \quad (12.23)$$

wird die Anschlussbedingung zu

$$\begin{aligned} 0 &= -2\beta \cos(\alpha(R-1)) \sin(\beta) + 2\alpha \sin(\alpha) \cos(\beta(R-1)) \\ &\quad + \kappa [\cos(\alpha(R-1)) \cos(\beta) - \cos(\alpha) \cos(\beta(R-1))]. \end{aligned} \quad (12.24)$$

Dies muss für alle R gelten. Also müssen die Koeffizienten von $\cos(\beta(R-1))$ und $\cos(\alpha(R-1))$ separat verschwinden (es sei denn, $\alpha = \beta$). Wir erhalten also

$$0 = -2\beta \sin(\beta) + \kappa \cos(\beta), \quad 0 = 2\alpha \sin(\alpha) - \kappa \cos(\alpha). \quad (12.25)$$

Dies ist äquivalent zu (12.17).

