

1 Zustände im Ortsraum

Gegeben seien folgende Zustände im Ortsraum:

(i) $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)}$ (ebene Welle)

(ii) $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\sigma_{ho}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2}$ (Harmonischer Oszillator Grundzustand)

(a) Die Ortsdarstellung des Impulsoperators lautet in einer Dimension $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Zeigen Sie, dass (i) eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für den Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ (freies Teilchen) ist.

(b) Berechnen Sie jeweils Erwartungswert und Varianz des Impulses

Tipp: Die Diracsche Deltafunktion lässt sich schreiben als

$$\delta(k - k') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx$$

Lösung

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

(a) Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t)$, einsetzen:

$$\begin{aligned} i\hbar(-i\omega) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} \\ \hookrightarrow \hbar\omega &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} \end{aligned}$$

(b) (i) Erste Möglichkeit: Direkt ausrechnen mit mathematischen Kom-

plikationen:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k'x - \omega t)} \delta(k - k') dk'}_{e^{-i(kx - \omega t)}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{i(kx - \omega t)} dx \\
&= \hbar k \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k - k')x} dx}_{\delta(k - k')} \delta(k - k') dk' \\
&= \hbar k \int_{-\infty}^{\infty} \delta(k - k') \delta(k - k') dk' = \hbar k
\end{aligned}$$

Zweite Möglichkeit: Erkennen, dass die ebene Welle ein Impulseigenzustand ist

$$\begin{aligned}
\hat{p} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} \right) &= (\hbar k) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} \right) \\
&\hookrightarrow \langle \hat{p} \rangle = \hbar k \\
&\hookrightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle = (\hbar k)^2
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich die Varianz zu:

$$\text{Var}_{\Psi}(\hat{p}) = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = 0$$

(ii)

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{ho}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{ho}} \frac{i\hbar}{\sigma_{ho}^2} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Ungerade}(x) \text{ Gerade}(x) dx = 0 \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{ho}} \frac{\hbar^2}{\sigma_{ho}^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} \frac{d}{dx} \left(x e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} \right) dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{ho}} \frac{\hbar^2}{\sigma_{ho}^2} \left(\sqrt{\pi}\sigma_{ho} + \left(-\frac{1}{\sigma_{ho}^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} dx \right)
\end{aligned}$$

substituiere $x = \sigma_{ho}y \Rightarrow dx = \sigma_{ho}dy$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\left(\frac{x}{\sigma_{ho}}\right)^2} dx &= \sigma_{ho}^3 \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \sigma_{ho}^3 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\ \hookrightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi} \sigma_{ho}} \frac{\hbar^2}{\sigma_{ho}^2} \left(\sqrt{\pi} \sigma_{ho} - \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \sigma_{ho} \right) = \frac{\hbar^2}{2\sigma_{ho}^2} \end{aligned}$$

Varianz:

$$\text{Var}_{\Psi}(\hat{p}) = \langle \hat{p}^2 \rangle - \underbrace{\langle \hat{p} \rangle^2}_{=0} = \frac{\hbar^2}{2\sigma_{ho}^2}$$

2 Zwei-Niveau-System

Ein Teilchen in einem sogenannten Doppelmuldenpotential kann im Grenzfall ausreichend kleiner Energie als Zwei-Niveau-System beschrieben werden. Zwei mögliche orthonormierte Zustände in diesem Potential sind

$$|L\rangle = \begin{array}{c} \text{W} \\ \text{W} \end{array} \quad |R\rangle = \begin{array}{c} \text{W} \\ \text{W} \end{array}$$

Die Energieeigenzustände des Systems sind gegeben durch die Überlagerungszustände

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle + |L\rangle) \quad \text{und} \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle - |L\rangle)$$

mit den Energien E_0 und $E_1 = E_0 + \Delta$

- Zeigen Sie, dass $|0\rangle$ und $|1\rangle$ orthonormierte Zustände sind und drücken Sie die Zustände $|L\rangle$ und $|R\rangle$ in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ aus.
- Das Teilchen befinde sich zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$. Welche Form hat der Zustand $|\Psi(t)\rangle$ in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ als Funktion der Zeit?
- Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen nach der Zeit t im Zustand $|L\rangle$ bzw. $|R\rangle$ zu finden?

Lösung

(a) Orthogonalität

$$\begin{aligned}\langle 0 | 1 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle R | + \langle L |) (|R\rangle - |L\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\underbrace{\langle R | R \rangle}_{=1} - \underbrace{\langle R | L \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle L | R \rangle}_{=0} - \underbrace{\langle L | L \rangle}_{=1}) = 0 = \langle 1 | 0 \rangle\end{aligned}$$

Normiertheit

$$\begin{aligned}\langle 0 | 0 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle R | + \langle L |) (|R\rangle + |L\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\underbrace{\langle R | R \rangle}_{=1} + \underbrace{\langle R | L \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle L | R \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle L | L \rangle}_{=1}) = 1 \\ \langle 1 | 1 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle R | - \langle L |) (|R\rangle - |L\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\underbrace{\langle R | R \rangle}_{=1} - \underbrace{\langle R | L \rangle}_{=0} - \underbrace{\langle L | R \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle L | L \rangle}_{=1}) = 1\end{aligned}$$

Darstellung von $|L\rangle$ und $|R\rangle$ in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$\begin{aligned}|L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \\ |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)\end{aligned}$$

(b) Anfangszustand

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |R\rangle$$

Schrödingergleichung

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

$|0\rangle$ und $|1\rangle$ sind Energieeigenzustände

$$\begin{aligned}\hat{H}|0\rangle &= E_0|0\rangle \\ \hat{H}|1\rangle &= (E_0 + \Delta)|1\rangle\end{aligned}$$

Darstellung von $|\Psi(t)\rangle$ in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$|\Psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle$$

Einsetzen in Schrödingergleichung liefert

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}c_0(t) &= \frac{E_0}{i\hbar}c_0(t) \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial t}c_1(t) = \frac{E_0 + \Delta}{i\hbar}c_1(t) \\ \hookrightarrow c_0(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{E_0}{i\hbar}t} \quad \text{und} \quad c_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{(E_0 + \Delta)}{i\hbar}t} \\ \hookrightarrow |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{E_0}{i\hbar}t} \left(|0\rangle + e^{\frac{\Delta}{i\hbar}t} |1\rangle \right)\end{aligned}$$

(c) Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand $|R\rangle$ zu finden:

$$\begin{aligned}P_{|R\rangle}(t) &= |\langle R | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 0 | + \langle 1 |) |\Psi(t)\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{2} (\langle 0 | + \langle 1 |) (|0\rangle + e^{\frac{\Delta}{i\hbar}t} |1\rangle) \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| (1 + e^{\frac{\Delta}{i\hbar}t}) \right|^2 = \frac{1}{4} \left| e^{\frac{\Delta}{2i\hbar}t} (e^{-\frac{\Delta}{2i\hbar}t} + e^{\frac{\Delta}{2i\hbar}t}) \right|^2 \\ &= \cos^2 \left(\frac{\Delta}{2\hbar} t \right) = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\Delta}{\hbar} t \right) \right) \\ \hookrightarrow P_{|L\rangle}(t) &= 1 - P_{|R\rangle}(t) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{\Delta}{\hbar} t \right) \right)\end{aligned}$$

3 Drehimpuls

Die Operatoren für Ort und Impuls sind in der Ortsdarstellung gegeben als $\hat{\vec{x}} = \vec{x}$ und $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$

- (a) Drücken Sie den Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$ in der Ortsdarstellung aus.
- (b) Zeigen Sie: $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] := \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z$
- (c) Zeigen Sie, dass die Ortsdarstellung der z-Komponente des Drehimpulsoperators $\hat{L}_z$ in Kugelkoordinaten gegeben ist durch

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{1}$$

Lösung

(a) Drehimpulsoperator in Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

(b) Fundamentale Kommutatorrelation des Drehimpulses

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x \\ &= (-i\hbar)^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \\ &= (-i\hbar)^2 \left[y \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial x} - \cancel{yx \frac{\partial^2}{\partial z^2}} - \cancel{z^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x}} + zx \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right. \\ &\quad \left. - zy \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + \cancel{z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}} + \cancel{xy \frac{\partial^2}{\partial z^2}} - x \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial y} \right] \\ &= (-i\hbar)^2 \left[y \frac{\partial}{\partial x} \left(1 + z \frac{\partial}{\partial z} \right) + zx \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - zy \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} - x \frac{\partial}{\partial y} \left(1 + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \\ &= (-i\hbar)^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \underbrace{(i\hbar)(-i\hbar) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)}_{\hat{L}_z} = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

(c) z-Komponente in Kugelkoordinaten

Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r \sin \Theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \Theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \Theta \end{aligned}$$

$$\text{z.zg. } \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} &= -i\hbar \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \underbrace{\frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z}}_{=0} \right) \\ &= -i\hbar \left(\underbrace{-r \sin \Theta \sin \varphi}_{-y} \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{r \sin \Theta \cos \varphi}_x \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hat{L}_z \end{aligned}$$