Beispiel 1: Mathematischer Formalismus, Erwartungswerte, Wahrscheinlichkeiten

Im Hilbertraum $\mathbb{C}^3$ (3–dimensionaler unitärer Raum) ist eine **Orthonormalbasis** $\mathsf{E}_e = \{\,|\,e_1\rangle, \,|\,e_2\rangle, \,|\,e_3\rangle\}$ mit $\langle e_j\,|\,e_k\rangle = \delta_{jk}$ gegeben. Der Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ ist durch seine Wirkung auf die Elemente der Basis E_e definiert.

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{H}\,|\,e_1\rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3}\,(1+2i)\,|\,e_2\rangle \\ \mathbf{H}\,|\,e_2\rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3}\,\big((1-2i)\,|\,e_1\rangle - 2i\,|\,e_3\rangle\big) \\ \mathbf{H}\,|\,e_3\rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3}\,2i\,|\,e_2\rangle \end{aligned}}$$

1. Berechne die Matrixdarstellung von $\mathbf{H}$ bezüglich der Basis E_e.

2. Zeige, dass $\mathbf{H}$ hermitesch ist.

3. Löse das Eigenwertproblem für $\mathbf{H}$, dh. gib seine Eigenwerte E_n und zugehörige orthonormierte Eigenzustände $|\,u_n\rangle$ für $n = 1, 2, 3$ an.

4. Ordne die Eigenwerte $E_1 < E_2 < E_3$ beginnend mit dem niedrigsten Eigenwert (E_1 = Grundzustandsenergie) und damit auch die zugehörigen Eigenzustände $|\,u_n\rangle$ mit $n = 1, 2, 3$.

5. Gib die Matrixdarstellung von $\mathbf{H}$ bezüglich der Basis $\mathsf{E}_u = \{\,|\,u_1\rangle, \,|\,u_2\rangle, \,|\,u_3\rangle\}$, wobei $|\,u_n\rangle$ mit $n = 1, 2, 3$ die orthonormierten Eigenvektoren von $\mathbf{H}$ sind.

6. Berechne die Matrixdarstellung des Operators der zeitlichen Entwicklung $\mathbf{U}(t) = \exp\{-i\frac{t}{\hbar}\mathbf{H}\}$ für $t > 0$ bezüglich der Basis $\mathsf{E}_u = \{\,|\,u_1\rangle, \,|\,u_2\rangle, \,|\,u_3\rangle\}$.

7. Berechne den Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im folgenden Zustand befindet:

$$\boxed{|\,\mathbf{\Phi}(0)\rangle = 2\,|\,u_1\rangle + (1-2i)\,|\,u_2\rangle}$$

8. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit den Eigenwert $-\hbar\omega$ des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$ zu messen, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $|\,\mathbf{\Phi}(t)\rangle = \mathbf{U}(t)\,|\,\mathbf{\Phi}(0)\rangle$ befindet?

Beispiel 2: Stationäre Streuzustände (1–dimensional)

Der Hilbertraum $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R})$ zusammen mit den uneigentlichen Eigenfunktionen ist der Zustandsraum der zur Beschreibung der Bewegung eines Teilchens mit der Masse m in einer Raumdimension herangezogen wird. Gesucht sind stationären Streuzustände des Teilchens, das sich im folgenden Stufenpotential bewegt, wobei $V_0 > 0$ und $a > 0$ angenommen ist:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \ldots \quad \text{Bereich 1:} \quad -\infty < x < 0 \\ -V_0 & \ldots \quad \text{Bereich 2:} \quad 0 \leq x \leq a \\ 0 & \ldots \quad \text{Bereich 3:} \quad a < x < +\infty \end{cases}$$

1. Wie lautet die zugehörige zeitunabhängige Schrödingergleichung, wenn für den Eigenwert die Bedingung $E > 0$ angenommen ist? Verwende für den stationären Streuzustand

$$\boxed{u(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx} & \text{Bereich 1} \\ A_2\, e^{iKx} + B_2\, e^{-iKx} & \text{Bereich 2} \\ A_3 e^{ikx} + B_3\, e^{-ikx} & \text{Bereich 3} \end{cases}}$$

wobei die Größen k und K entsprechend zu identifizieren sind.

2. **Setze hier und in allen folgenden Punkten dieses Beispiels** $E = \frac{V_0}{8}$ und drücke die Größe K durch die Größe k aus, wobei letztere durch $E = \frac{V_0}{8}$ festgelegt ist.

3. Gib die Stetigkeitsbedingungen für die gesuchten Koeffizienten $\vec{A}_j = [A_j, B_j]^{\mathrm{T}}$ mit $j = 1, 2$ in Form von Matrixgleichungen der Gestalt $\vec{A}_j = \mathbf{Q}(x_j)\, \vec{A}_{j+1}$ an. Verwende dabei

$$\boxed{\mathbf{Q}(x_j) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{i(k_{j+1}-k_j)x_j} & (1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{-i(k_{j+1}+k_j)x_j} \\ (1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{i(k_{j+1}+k_j)x_j} & (1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{-i(k_{j+1}-k_j)x_j} \end{bmatrix}}$$

und beachte, dass die allgemeine Form der Stetigkeitsmatrizen mit $\mathbf{Q}(x_j)$ gegeben ist, wobei mit $x_1 = 0$ und $x_2 = a$ die Sprungstellen des Potentials festgelegt sind. Berechne $\mathbf{Q}(0)$ und $\mathbf{Q}(a)$.

4. Berechne **allgemein** die **Transfermatrix** $\mathbf{M}$, die $\vec{A}_1 = [A_1, B_1]^{\mathrm{T}}$ mit $\vec{A}_3 = [A_3, B_3]^{\mathrm{T}}$ verknüpft, als Produkt der Matrizen $\mathbf{Q}(0)$ und $\mathbf{Q}(a)$. Gib weiters die $\mathbf{M}$–Matrix für $ka = \frac{\pi}{4}$ an.

5. Setze $A_1 = 1$ und $B_3 = 0$ und berechne die Koeffizienten B_1 und A_3. Zeige, daß die Unitaritätsbedingung $|B_1|^2 + |A_3|^2 = 1$ erfüllt ist, wobei $ka = \frac{\pi}{4}$ angenommen ist.

6. Berechne die $\mathbf{S}$–Matrix mithilfe der Definitionen $S_{11} = \frac{M_{21}}{M_{11}}$, $S_{12} = M_{22} - \frac{M_{21}M_{12}}{M_{11}}$, $S_{21} = \frac{1}{M_{11}}$ und $S_{22} = -\frac{M_{12}}{M_{11}}$ wobei $ka = \frac{\pi}{4}$ angenommen ist und zeige, dass die $\mathbf{S}$–Matrix unitär ist.

Beispiel 3: Drehimpuls, Kopplungen, Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte

Ein Zweiteilchen–System besteht aus einem Spin–1–Teilchen und einem Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchen deren räumliche Freiheitsgrade nicht berücksichtigt sind. Der zugehörige Hilbertraum $\mathscr{H}_{\text{Gesamt}} = \mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2$ ist daher 6–dimensional und wird von den orthonormierten Elementen $\{\, |1, m; \frac{1}{2}, s\rangle \}$ (wobei $|1, m; \frac{1}{2}, s\rangle = |1, m\rangle^{(1)} \otimes |\frac{1}{2}, s\rangle^{(2)} = |m, s\rangle$ zu verstehen ist) der Produktbasis, die die simultanen Eigenzustände der Operatoren $\mathbf{S}_z^{(1)}$ und $\mathbf{S}_z^{(2)}$ sind, aufgespannt, wobei $m = 0, \pm 1$ und $s = \pm\frac{1}{2}$ zu verstehen ist. Der Hamiltonoperator des Zweiteilchen–Systems ist durch

$$\mathbf{H} = \hbar\big(\mathbf{S}_z^{(1)} + \mathbf{S}_z^{(2)}\big) \left(\vec{\mathbf{S}}^{(1)} \cdot \vec{\mathbf{S}}^{(2)}\right)^{-1}$$

gegeben. Dabei stellt der Operator $\vec{\mathbf{S}}^{(1)}$ den Spinoperator des Spin–1–Teilchens und der Operator $\vec{\mathbf{S}}^{(2)}$ den Spinoperator des Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchens dar.

1. Stelle den Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ als Funktion des Gesamtdrehimpulses (Gesamtspin) $\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{S}}^{(1)} + \vec{\mathbf{S}}^{(2)}$ und seiner z–Komponente $\mathbf{S}_z$ dar.

2. Zeige, dass der Operator $\vec{\mathbf{S}}^{(1)} \cdot \vec{\mathbf{S}}^{(2)}$ **nicht–singulär** ist und daher $\left(\vec{\mathbf{S}}^{(1)} \cdot \vec{\mathbf{S}}^{(2)}\right)^{-1}$ definiert ist.

3. Berechne mit Hilfe der Orthonormalbasis $\{\, |(1\frac{1}{2})SM\rangle \}$ die Eigenwerte E_{SM} von $\mathbf{H}$ und gib die Entartung der Eigenwerte an. Verwende dabei die Clebsch–Gordan Koeffizienten

$$\begin{aligned} \langle j, M \mp \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2} \,|\, j + \tfrac{1}{2}, M\rangle &= \sqrt{\tfrac{j+\frac{1}{2}\pm M}{2j+1}} \\ \langle j, M \mp \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2} \,|\, j - \tfrac{1}{2}, M\rangle &= (-1)^{\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} \sqrt{\tfrac{j+\frac{1}{2}\mp M}{2j+1}} \end{aligned}$$

   um die entsprechenden Elemente $|(1\frac{1}{2})SM\rangle$ der Standardbasis von Gesamtdrehimpulseigenzuständen als Linearkombinationen der Produktzustände $|m, s\rangle$ **explizit** anzugeben.

4. Ordne die Energieeigenwerte nach ihrer Größe beginnend beim kleinsten. Liste für die Grundzustandsenergie und alle weiteren Eigenwerte die zugehörigen Eigenvektoren auf.

5. Berechne die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der z–Komponente vom Spin–1–Teilchen den Messwert $-\hbar$ **und** bei der z–Komponente des Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchens den Wert $+\frac{\hbar}{2}$ zu finden, wenn sich das System im **1. angeregten Zustand** (E_2) befindet.

6. Berechne den Erwartungswert des Operators $\mathbf{S}_y = \frac{1}{2i}(\mathbf{S}_+ - \mathbf{S}_-)$ für den Zustand $|z\rangle = |(1\frac{1}{2})\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{3}i\,|(1\frac{1}{2})\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$. Verwende dabei die folgenden Formeln:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_\pm \,|(1\tfrac{1}{2})SM\rangle &= \hbar\sqrt{(S \mp M)(S \pm M + 1)}\,|(1\tfrac{1}{2})SM \pm 1\rangle \\ \mathbf{S}_z \,|(1\tfrac{1}{2})SM\rangle &= \hbar M \,|(1\tfrac{1}{2})SM\rangle \end{aligned}$$