K1) "Zeitentwicklung eines Zustands"

a)

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \Psi(x,0)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_1} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\alpha_2} e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \psi_2(x) + \frac{1}{\sqrt{6}} e^{i\alpha_3} e^{-\frac{iE_3 t}{\hbar}} \psi_3(x)$$

b)

$$W_{E_1}(t) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_1^*(x) \Psi(x,t) \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_1} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_1^*(x)\psi_1(x)}_{1 \text{ (der Zustand } \psi_1(x) \text{ ist normiert)}} \right|^2$$

$= \frac{1}{2}$ (unabhängig von Zeit!)

Man bekommt sinngemäß: $W_{E_2}(t) = \frac{1}{3}$; $W_{E_3}(t) = \frac{1}{6}$

c)

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t) =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x \Big[\underbrace{\frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{3} |\psi_2(x)|^2 + \frac{1}{6} |\psi_3(x)|^2}_{\text{Zeit UN-abhängig}} + \frac{e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}}{\sqrt{6}} \psi_1^*(x)\psi_2(x)\, e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} + \dots$$

aber ... $\Downarrow$ Explizite Zeitabhängigkeit

$\Rightarrow$ $\langle x \rangle$ zeitabhängig! Und das Gleiche passiert für

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdots + \frac{e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}}{\sqrt{6}} \psi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_2(x)\, e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}}$$

aber <u>NICHT</u> für $\langle H \rangle$!!

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x,t) H \psi(x,t) = \frac{1}{2} E_1 \underbrace{\int dx\, |\psi_1(x)|^2}_{=1} + \frac{1}{3} E_2 \underbrace{\int dx\, |\psi_2(x)|^2}_{=1} + \frac{1}{6} E_3 \underbrace{\int dx\, |\psi_3(x)|^2}_{=1}$$

$$= \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{3} E_2 + \frac{1}{6} E_3 \quad \forall t$$

K2) "Operatoren im Heisenbergbild"

a) $$A_H(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} A \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

$\Downarrow$

korrespondierender Operator im Schrödingerbild

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} H \left(e^{iHt} A e^{-iHt}\right) - e^{iHt} A e^{-iHt} \left(\frac{i}{\hbar} H\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left[H, e^{iHt} A e^{-iHt}\right] = \frac{i}{\hbar} \left[H, A_H(t)\right]$$

b) $$\frac{d P_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[H, P_H(t)\right] = \frac{i}{\hbar} e^{iHt} \left[H, P\right] e^{-iHt}$$

In unserem Fall $H = \frac{P^2}{2m} + \alpha X \Rightarrow \frac{d P_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{iHt} \left[\frac{P^2}{2m} + \alpha X, P\right] e^{-iHt}$

$$\Rightarrow \frac{d P_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{iHt} \Big(\underbrace{\left[\frac{P^2}{2m}, P\right]}_{=0} + \alpha \underbrace{\left[X, P\right]}_{= i\hbar \mathbb{1}} \Big) e^{-iHt} = -\alpha$$

$$\frac{d P_H}{dt} = -\alpha \Rightarrow P_H(t) = -\alpha t \mathbb{1} + P_H(0) = -\alpha \mathbb{1} t + P$$

K3) "Zeitunabhängige Störungstheorie"

a)

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_{H_0} \underbrace{- q\mathcal{E}x}_{H_1}$$

wobei $H_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$ mit $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

und der Operator $X = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}(a+a^+)$ mit $\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{cases}$

Die Matrix Elemente des X-Operators in der Eigenbasis von H_0 sind volgende:

$$\langle m|\,X\,|n\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\langle n-1|a|n\rangle = \sqrt{\frac{n}{2\alpha}} & \text{wenn } m = n-1 \\ \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\langle n+1|a^+|n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2\alpha}} & \text{wenn } m = n+1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Deswegen hat man

Erste Ord. $\Rightarrow E_n^{(1)} = -q\mathcal{E}\langle n|\,X\,|n\rangle \boxed{= 0}$

Zweite Ord. $\Rightarrow E_n^{(2)} = q^2\mathcal{E}^2 \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|\,X\,|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} =$

$$= \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2\alpha}\left[\frac{|\langle n-1|a|n\rangle|^2}{\hbar\omega(\cancel{n}-\cancel{n}+1)} + \frac{|\langle n+1|a^+|n\rangle|^2}{\hbar\omega(\cancel{n}-\cancel{n}-1)}\right] =$$

$$= \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2\alpha\hbar\omega}\left[n - (n+1)\right] = \boxed{-\frac{q^2\mathcal{E}^2}{2\alpha\hbar\omega}} \quad \forall n$$

$\to -\frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$

b) Der Hamilton-Operator $H = H_0 + H_1$ ist eigentlich exakt lösbar:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x =$$

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 - \frac{2q\mathcal{E}}{m\omega^2}x + \frac{q^2\mathcal{E}^2}{m^2\omega^4} - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{m^2\omega^4}\right) =$$

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

$$= \tilde{H}_0 - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

wobei $\tilde{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\tilde{x}^2$ mit $\tilde{x} = \left(x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}\right)$ ist der Hamilton Operator eines harmonischen Oszillators mit der gleichen Frequenz ω und Masse m, nur mit einer Verschiebung des Ruhepunkts von $x=0$ nach $x = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$.

Die Eigenwerte sind deswegen:

$$\tilde{E}_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \underset{\text{genau!}}{=} E_n^{(0)} + E_n^{(2)}$$ in Punkt a) berechnet.

Das zeigt, dass in diesem Fall die zweite Ordnung Störungstheorie das exakt Ergebnis liefert!

K4) "Dichte-Matrix Operator"

a) Alle Teilchen der betrachtenen Gesamtheit haben $S_x = +\frac{\hbar}{2}$

Deswegen in der $\underline{S_x}$-$\underline{\text{Basis}}$

$$\rho = |S_x = +\hbar/2\rangle\langle S_x = +\hbar/2| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Wir brauchen aber ρ in der $\underline{S_z}$-$\underline{\text{Basis}}$. Wir müssen die Eigenvektoren des S_x-Operator als Funktion der Eigenvektoren des S_z-Operators schreiben:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \propto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{in } S_z\text{-Basis}$$

$$\det\begin{pmatrix} -\lambda & +1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \qquad \lambda^2 - 1^2 = 0 \qquad \lambda = \pm 1 \quad \begin{cases} \lambda = 1 \Rightarrow S_x = +\frac{\hbar}{2} \\ \lambda = -1 \Rightarrow S_x = -\frac{\hbar}{2} \end{cases}$$

Eigenvektor für $S_x = +\frac{\hbar}{2}$ $(\lambda = 1)$ $\Rightarrow \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow -x + y = 0$ $\quad \boxed{x = y}$

$$|S_x = +\tfrac{\hbar}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|S_z = +\hbar/2\rangle + |S_z = -\hbar/2\rangle\right)$$

Deswegen ist der Dichte-Matrix Operator in der S_z-Basis so umgeschrieben:

$$\rho = \frac{1}{2}\left(|S_z = +\hbar/2\rangle + |S_z = -\hbar/2\rangle\right)\left(\langle S_z = +\hbar/2| + \langle S_z = -\hbar/2|\right) = \boxed{\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}}$$

$$= \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} + \sigma_x\right]$$

b) Der Hamilton-Operator eines Teilchens in einem konstanten magnetischen Feld ist

$$H = -\underbrace{g\frac{\mu_B}{\hbar}}_{\mu} B\hat{S}_z = +\mu \cdot B$$

Man kann die Zeitabhängigkeit des Dichte-Matrix Operators direkt über die Zeitentwicklung des Zustands des Systems

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \,, \quad \text{wobei} \quad |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

$$\text{mit} \quad |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|S_z = +\hbar/2\rangle + |S_z = -\hbar/2\rangle\right)$$

Wir haben also:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{i\mu B}{\cancel{\hbar}}\frac{\cancel{\hbar}}{2}t}\,|S_z = +\tfrac{\hbar}{2}\rangle + e^{+\frac{i\mu B}{\cancel{\hbar}}\frac{\cancel{\hbar}}{2}t}\,|S_z = -\tfrac{\hbar}{2}\rangle\right]$$

$$\Rightarrow \rho(t) = \frac{1}{2}\left[\left(e^{-\frac{i\mu Bt}{2}}|S_z = +\hbar/2\rangle + e^{+\frac{i\mu Bt}{2}}|S_z = -\hbar/2\rangle\right)\left(e^{+\frac{i\mu Bt}{2}}\langle S_z = +\hbar/2| + e^{-\frac{i\mu Bt}{2}}\langle S_z = -\hbar/2|\right)\right.$$

$$= \begin{pmatrix} 1/2 & \frac{1}{2}e^{-i\mu Bt} \\ \frac{1}{2}e^{i\mu Bt} & 1/2 \end{pmatrix}$$

das kann man auch umschreiben als Funkton der Pauli Matrix als

$$\rho(t) = \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} + \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y)\,e^{-i\mu Bt} + \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y)\,e^{i\mu Bt}\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} + \sigma_x \cos(\mu Bt) + \sigma_y \sin(\mu Bt)\right]$$

K5) "Zweite Quantisierung und Heisenberg Modell"

a)

Die Wirkung der Erzeugerungs/Vernichtungs Operatoren auf einen belibigen Mehrteilchenzustand in Besetzungsdarstellung ist folgende:

$$a_i^+ |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i+1}\, |n_1, \ldots, n_i+1, \ldots \rangle & \text{für BOSONE} \\ \sqrt{1-n_i}\, |n_1, \ldots, n_i+1, \ldots \rangle & \text{für FERMION} \end{cases} \; *$$

$$a_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i-1, \ldots \rangle & \text{für BOSONI} \\ \sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i-1, \ldots \rangle & \text{für FERMION} \end{cases} \; *$$

Deswegen zeigt eine direkte Rechung, dass

$$a_i^+ a_i |n_1, \ldots n_i, \ldots \rangle = a_i^+ \sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i-1, \ldots \rangle =$$

$$= \sqrt{n_i}\sqrt{n_i}\, |n_i, \ldots, n_i, \ldots \rangle = n_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle$$

und zwar, dass die Eigenwerte des Operators $a_i^+ a_i$ die Teilchenzahl auf dem Plätz i sind

Ähnlich für Fermionen* hat man

$$a_i^+ a_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle = a_i^+ \sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i-1, \ldots \rangle$$

$$= \sqrt{1-(n_i-1)}\sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle$$

$$= \sqrt{(2-n_i)}\sqrt{n_i}\, |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle$$

Für Fermionen $n_i = 0, 1$ deswegen $n_i^2 = n_i$ →

$$= \sqrt{2n_i - n_i^2}\, |n_1, \ldots, n_i, \ldots \rangle$$

$$= \sqrt{\underbrace{2n_i^2 - n_i^2}_{n_i}}\, |n_1, \ldots n_i, \ldots \rangle$$

*) Explizit Rechnung entweder für BOSONEN oder FERMIONEN genugend!

b) Ist $a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle$ ein Eigenzustand?

$$H \underbrace{a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle}_{\text{Zustand mit Drei Spin }\uparrow} = J \sum_{i=1,2} \left(S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) \right) a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle$$

—①—②—③

↑ ↑ ↑

Es ist einfach zu sehen, dass der Beitrag $\frac{1}{2}[S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+]$ keinen Effekt auf dem Zustand hat:

$\Rightarrow$ $S_i^+ = \hbar\, a^+_{i\uparrow} a_{i\downarrow}$ versucht einen Spin ↓ auf Platz $i = 1,2,3$ zu vernichten, aber es gibt da nur Spin ↑!

Im verbleibenden Beitrag kann man S_z schreiben als

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\left(a^+_{i\uparrow} a_{i\uparrow} - a^+_{i\downarrow} a_{i\downarrow}\right) = \frac{\hbar}{2}\left(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}\right).$$

Deswegen

$$H\, a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle = \frac{\hbar^2}{4} J \left[(n_{1\uparrow} - n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow} - n_{2\downarrow}) + (n_{2\uparrow} - n_{2\downarrow})(n_{3\uparrow} - n_{3\downarrow}) \right] \times a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle$$

wobei $\begin{cases} n_{1\uparrow} = n_{2\uparrow} = n_{3\uparrow} = 1 \\ n_{1\downarrow} = n_{2\downarrow} = n_{3\downarrow} = 0 \end{cases}$

$$= \frac{\hbar^2}{\cancel{4}_{2}} J \times \cancel{2}\; a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle$$

$$= \overbrace{\frac{\hbar^2}{2} J}^{\Rightarrow\ \text{Eigenwert}}\; a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3\uparrow} |vac\rangle$$

Mit $J < 0$ liefert der Hamilton-Operator $H = -J \sum_{i=1,2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$ den tiefesten Eigenwert, wenn alle Spins die gleiche Richtung haben (Ferromagnetischer Zustand). Das ist genau der Fall für unseren Zustand $a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} a^+_{3} |vac\rangle = |\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, der ein Grundzustand ist.

c) Ist $a_{1\downarrow}^{+} a_{2\uparrow}^{+} a_{3\downarrow}^{+} |vac\rangle$ ein Eigenzustand?

Nein, weil die Beiträge $S_i^+ S_{i+1}^-$ in diesem Fall eine Wirkung haben, und zwar, z.B.

$$S_1^+ S_2^- \; a_{1\downarrow}^{+} a_{2\uparrow}^{+} a_{3\downarrow}^{+} |vac\rangle = \hbar^2 (a_{1\uparrow}^{+} a_{1\downarrow})(a_{2\downarrow}^{+} a_{2\uparrow}) \underbrace{a_{1\downarrow}^{+} a_{2\uparrow}^{+} a_{3\downarrow}^{+} |vac\rangle}$$

In Besetzungsdarstellung

$$= \hbar^2 a_{1\uparrow}^{+} a_{1\downarrow} a_{2\downarrow}^{+} a_{2\uparrow} \, |\underset{1\uparrow}{0}, \underset{1\downarrow}{1}, \underset{2\uparrow}{1}, \underset{2\downarrow}{0}, \underset{3\uparrow}{0}, \underset{3\downarrow}{1}\rangle$$

$$= \hbar^2 a_{1\uparrow}^{+} a_{1\downarrow} a_{2\downarrow}^{+} \, |0, 1, 0, 0, 0, 1\rangle$$

$$= \hbar^2 a_{1\uparrow}^{+} a_{1\downarrow} \, |0, 1, 0, 1, 0, 1\rangle = \frac{\hbar^2}{4} a_{1\uparrow}^{+} |0, 0, 0, 1, 0, 1\rangle$$

$$= \hbar^2 \, |\underset{1\uparrow}{1}, \underset{1\downarrow}{0}, \underset{2\uparrow}{0}, \underset{2\downarrow}{1}, \underset{3\uparrow}{0}, \underset{3\downarrow}{1}\rangle = \frac{\hbar^2}{2} a_{1\uparrow}^{+} a_{2\downarrow}^{+} a_{3\downarrow}^{+} |vac\rangle \neq \text{Anfangszustand}$$

Das kann man auch schreiben

Die Beiträge $S_i^+ S_{i+1}^-$ (oder $S_i^- S_{i+1}$) ändern die Teilchenzahlen unseres Zustands. Deswegen ist dieser Zustand kein Eigenzustand (bzw. kein Grundzustand)