K1) Hermitesche und unitäre Operatoren

a) $\int \phi^*(r)\,(AB)^+\psi(r)\,dr = \int (AB\phi(r))^* \psi(r)\,dr =$

$= \int (B\phi)^* A^+\psi(r)\,dr = \int \phi^*(r) B^+A^+\psi(r)\,dr$

$\Rightarrow \quad (AB)^+ = B^+A^+$

b) i) $(AB)^+ = B^+A^+ = BA \neq AB$ nicht hermitesch

ii) $(AB-BA)^+ = B^+A^+ - A^+B^+ = BA - AB = -[B,A]$ nicht hermitesch

iii) $(AB+BA)^+ = B^+A^+ + A^+B^+ = BA + AB$ hermitesch

iv) $(ABA)^+ = A^+(AB)^+ = A^+B^+A^+ = ABA$ hermitesch

v) $(\underset{\hat{=}\,A A^{n-1}}{A^n})^+ = A^+(\underset{\hat{=}\,A^{n-2}A}{A^{n-1}})^+ = A^+A^+(A^{n-2})^+ \cdots = \underbrace{A^+\cdots A^+}_{n\text{ mal}} = A^n$

hermitesch

c) $A' = UAU^+$

$(A')^+ = (UAU^+)^+ = (AU^+)^+U^+ = U\underbrace{A^+U^+}_{A \text{ hermitesch}} = UAU^+ = A'$

$\Rightarrow A'$ hermitesch!

- $A|a\rangle = a|a\rangle$ Betrachten wir $U|a\rangle$ =

$A'U|a\rangle = UAU^+(U|a\rangle) = UA|a\rangle = a(U|a\rangle)$ ✓

Eigenwerte von A = Eigen. von A'

d) $\langle \phi' | A' | \psi' \rangle = \langle \phi | U^{\dagger} A' U | \psi \rangle = \langle \phi | \overset{\mathbb{1}}{\overbrace{U^{\dagger} U}} A \overset{\mathbb{1}}{\overbrace{U^{\dagger} U}} | \psi \rangle$

$= \langle \phi | A | \psi \rangle$ ✓

mit $\begin{cases} |\psi'\rangle = U|\psi\rangle \\ |\phi'\rangle = U|\phi\rangle \end{cases}$

K2) Zeitunabhängige Störungstheorie

Unser Hamilton-Operator ist

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2}k'x^2}_{H_1}$$

wobei $H_0|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\underbrace{\sqrt{\frac{k}{m}}}_{=\omega}|n\rangle$

Um die Korrektur in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie zu rechnen, brauchen wir

$\langle n|H_1|m\rangle$, d.h. $\langle n|x^2|m\rangle$

wobei $x = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}(a+a^+)$ mit $\alpha = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4}$

und $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$; $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

Deswegen

$$\langle n|x^2|m\rangle = \frac{1}{2\alpha^2}\langle n|(a+a^+)(a+a^+)|m\rangle =$$

$$= \frac{1}{2\alpha^2}\langle n|aa + a^+a^+ + a^+a + aa^+|m\rangle =$$

•) $\langle n|a^+a|m\rangle$ und $\langle n|aa^+|m\rangle \neq 0$ nur wenn $n=m$

$\langle n|aa|m\rangle \neq 0$ nur wenn $m=n+2$

$\langle n|a^+a^+|m\rangle \neq 0$ nur wenn $m=n-2$

Deswegen

$$\langle n| X^2 |m\rangle = \frac{1}{2\alpha^2}\Big[\langle n| a a |n+2\rangle \delta_{m,n+2} + \langle n| a^+ a^+ |n-2\rangle \delta_{m,n-2}$$

$$+ \langle n| (a^+ a + a a^+) |n\rangle \delta_{nm}\Big] =$$

$$= \frac{1}{2\alpha^2}\Big[\sqrt{n+2}\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{n-1}\sqrt{n}\,\delta_{m,n-2}$$

$$+ (n \quad + n + 1)\,\delta_{nm}\Big]$$

Wir können nun direkt die Formeln der zeitunabhängigen (und nicht entarteten) Störungstheorie benutzen:

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots \quad , \text{ wobei } \quad E_n^0 = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

- $E_n^1 = \langle n| H_1 |n\rangle = \frac{1}{2} k' \frac{1}{2\alpha^2}(2n+1) = \frac{1}{2} \frac{k'}{\alpha^2}\left(n + \frac{1}{2}\right)$

$$= \frac{1}{2}\hbar \frac{k'}{\sqrt{km}}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

- $E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n| H_1 |m\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \frac{|\langle n| H_1 |n+2\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n+2}^0} + \frac{|\langle n| H_1 |n-2\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n-2}^0}$

$$E_n^2 = \frac{1}{4} k'^2 \frac{1}{4\alpha} \left[\frac{(n+2)(n+1)}{\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left[n+\frac{1}{2}-(n+2+\frac{1}{2})\right]} + \frac{n(n-1)}{\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left[n+\frac{1}{2}-(n-2+\frac{1}{2})\right]} \right]$$

$$E_n^2 = \frac{k'^2}{16\alpha^4 \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}} \left[\frac{(n+2)(n+1)}{-2} + \frac{n(n-1)}{2} \right]$$

$$E_n^2 = \frac{k^2}{\alpha^4 \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}} \left[n(n-1) - (n+2)(n+1) \right]$$

$$= \frac{k'^2}{32\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}} \left[\cancel{n^2} - n - \cancel{n^2} \cdot 2n - n - 2 \right]$$

$$= \frac{\hbar k'^2}{32\sqrt{m}\, k\sqrt{k}} (-4n-2) = -\frac{\hbar k'^2}{8\sqrt{m}\, k\sqrt{k}} \left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$E = \hbar \left[\sqrt{k/m} + \frac{1}{2}\frac{k'}{\sqrt{km}} - \frac{1}{8}\frac{k'^2}{k\sqrt{k}\sqrt{m}} \right] \left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$= \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} \left[1 + \frac{1}{2}\frac{k'}{k} - \frac{1}{8}\frac{k'^2}{k^2} + \cdots \right] \left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$\hookrightarrow 1 + \frac{1}{2}y - \frac{1}{8}y^2 + \cdots \approx (1+y)^{1/2}$

$$\hat{=} \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{1+\frac{k'}{k}} = \hbar\sqrt{\frac{k+k'}{m}}$$

$\Downarrow$

Exakte Lösung des $H = H_0 + H_1$

$\Rightarrow$ Harmonischer Oszillator mit $\tilde{k} = k + k'$

K3 "Ritz'sches Variationsverfahren"

a) Versuchswellenfunktion $\phi_0(x) = \begin{cases} (a^2-x^2) & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

Erster Schritt : Normierung

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_0(x)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad 2N^2 \int_0^a (a^2-x^2)^2 dx = 2N^2 \left[a^5 - \frac{2a^5}{3} + \frac{a^5}{5}\right]$$

$$\Rightarrow 1 = 2N a^5 \left(1 - \frac{2}{3} + \frac{1}{5}\right) = \frac{16}{15} a^5 N^2 \quad \Rightarrow \quad N^2 = \frac{15}{16a^5} \quad \Rightarrow \quad N = \frac{\sqrt{15}}{4a^2\sqrt{a}}$$

Zweiter Schritt :

Mit der normierten Welle Funktion $\phi_0(x)$, können wir den a-abhängigen Erwartungwert der Energie rechnen :

$$E_0(a) = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \phi_0^*(x)\, H\, \phi_0(x) = 2N^2 \int_0^a dx\, (a^2-x^2) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right](a^2-x^2)$$

$$= 2N^2 \int_0^a dx\, (a^2-x^2) \left[\frac{\hbar^2}{m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 (a^2-x^2)\right] =$$

$$= 2N^2 \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{2}{3}a^3 + \frac{4}{105} m\omega^2 a^7\right] = \frac{5}{4a^5}\left[\frac{\hbar^2}{m} a^3 + \frac{2}{35} m\omega^2 a^7\right]$$

$$= \frac{5}{4}\left[\frac{\hbar^2}{ma^2} + \frac{2}{35} m\omega^2 a^2\right] = \frac{5\hbar^2}{4ma^2} + \frac{1}{14} m\omega^2 a^2$$

Dritter Schritt : Minimierung

Normierung

- $$2N^2\int_0^a x^2(a^2-x^2)^2\,dx = 2N^2\,\frac{8a^7}{105} = \frac{16a^7}{105}N^2 = 1 \qquad N^2 = \frac{105}{16a^7}$$

- $$E_1(a) = N^2\int_{-a}^{a} dx\; x(a^2-x^2)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]x(a^2-x^2)$$

$$= N^2\int_{-a}^{a} dx\; x(a^2-x^2)\left[\frac{\hbar^2}{2m}\times\overset{3}{\cancel{6}}x + \frac{1}{2}m\omega^2x^3(a^2-x^2)\right]$$

$$= N^2\int_{-a}^{a} dx\left[\frac{3\hbar^2}{m}x^2(a^2-x^2) + \frac{1}{2}m\omega^2x^4(a^2-x^2)^2\right]$$

$$= N^2\left[\frac{4}{5}\frac{a^5\hbar^2}{m} + \frac{8}{315}a^9m\omega^2\right]$$

$$= \frac{21\hbar^2}{4a^2m} + \frac{1}{6}a^2m\omega^2$$

- $$\frac{\partial E_1(a)}{\partial a} = -\frac{21\hbar^2}{2a^3m} + \frac{1}{3}am\omega^2 = 0 \Rightarrow \quad a^{*4} = \frac{63}{2}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

$$a^* = \sqrt[4]{\frac{63}{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$ und auch in diesem Fall

$$\frac{\partial E_1(a)}{\partial a} = \begin{cases} <0 & \forall\, a < a^* \\ >0 & \forall\, a > a^* \end{cases}$$

$E_1^*(a^*)$ ist ein Minimum!

Endlich $$E_1(a^*) = +\frac{21}{4}\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{2}{63}}\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{1}{6}\sqrt{\frac{63}{2}}\frac{\hbar}{m\omega}m\omega^2 =$$

$$= \hbar\omega\left(\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{2}}\right) = \hbar\omega\sqrt{\frac{7}{2}} \approx 1.87\,\hbar\omega > \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\frac{\partial E_0(a)}{\partial a} = -\frac{5}{2}\frac{\hbar^2}{m a^3} + \frac{1}{7} m\omega^2 a = 0 \qquad (a>0)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\hbar^2}{m a^3} = \frac{2}{35} m\omega^2 a \quad \Rightarrow \quad a^4 = \frac{35}{2}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

$$a^* = \sqrt[4]{\frac{35}{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Bemerke dass $\frac{\partial E_0(a)}{\partial a} < 0$ für $a < a^*$; $\frac{\partial E_0(a)}{\partial a} > 0$ für $a > a^*$

Deswegen $E_0(a^*) = \min_a E_0(a)$

$$E_0(a^*) = \frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{2}{35}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) + \frac{1}{14} m\omega^2 \sqrt{\frac{35}{2}}\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$= \hbar\omega\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{14}} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{14}}\right) = \sqrt{\frac{5}{14}}\,\hbar\omega \cong 0.6\,\hbar\omega > \frac{1}{2}\hbar\omega$$

b) Die Versuchswellenfunktion für den ersten angeregten Zustand muss ortogonal zu $\phi_0(x)$ (Versuchsfunktion für den Grundzustand) sein.

Das ist genau der Fall hier:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1^*(x)\,\phi_0(x)\,dx = 0 \qquad \begin{array}{ll} \phi_1(x) = -\phi_1(-x) & \text{ungerade} \\ \phi_0(x) = \phi_0(-x) & \text{gerade} \end{array}$$

Jetzt können wir alle Schritte wie vorher wiederholen...

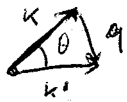
K4)

a) Die Streuamplitude in der Bornschen Nährung ist definiert wie

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\underbrace{\int d^3r\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, V(\vec{r})}_{V(\vec{q})} \quad , \text{ wobei } \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$$

In Elastischer Streuung hat man auch $k = k'$ $\quad q = 2k\sin\theta/2$

von $(\vec{k} - \vec{k}')^2 = \vec{q}^{\,2}$



Im unserem Fall $V(\vec{r}) = V_0\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m V_0}{2\pi\hbar^2}\int d^3r\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = -\frac{m V_0}{2\pi\hbar^2}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_0}$$

Der differentielle Streuquerschnitt ist nun berechbar wie

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\phi)|^2 = \frac{m^2 V_0^2}{4\pi^2\hbar^4} \quad \text{radialsymmetrisch.}$$

und deswegen ist die totale Streuquerschnitt

$$\sigma_{TOT} = \int \sin\theta\, d\theta\, d\phi\, \frac{d\sigma}{d\Omega} = \cancel{4\pi}\, \frac{m^2 V_0^2}{\cancel{4}\pi^{\cancel{2}}\hbar^4} = \frac{m^2 V_0^2}{\pi\hbar^4}$$

b) Der totale Streuquerschnitt als Funkton der Phasen-verschiebung läßt sich schreiben wie

$$\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

In unserem Fall $l = 0, 1$

$$\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \left(\sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1 \right)$$

Die einzelnen l-Kanäle tragen unabhängig voneinanderer bei - Jeder Beitrag wird für sich maximiert

Das Maximum ist bei $\sin^2 \delta_l = 1$ und wird erreicht für

$$\delta_0, \delta_1 = (2n+1) \frac{\pi}{2} \qquad n \in \mathbb{Z}$$

Es wird

$$\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \times 4 = \frac{16\pi}{k^2}$$