Theoretische Physik III für das Lehramt L3, WS2003/04, Prof. H.J. Lüdde

Lösungen - Kapitel III Quantenmechanik

1

Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Gebiete I, II und III getrennt. Anpassung der Lösung an den Gebietsgrenzen durch Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion und Ihrer Ableitung.
Schrödinger-Gleichung und Lösungen für Gebiet I/III:

$$\psi'' - \kappa^2\psi = 0 \ , \ \ \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x} \ , \ \ -\infty < x \leq -a \\ \psi_{III} &= A_3 e^{\kappa x} + B_3 e^{-\kappa x} \ , \ \ a \leq x < \infty \end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung und Lösung für Gebiet II:

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \ , \ \ k^2 = -\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2} > 0$$

$$\psi_I = A_2\cos(kx) + B_2\sin(kx) \ , \ \ -a \leq x \leq a \ .$$

Damit die Gesamtlösung normierbar ist, also die Dichte $\psi^*\psi$ ein Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Topf wird, muss ψ normierbar sein, d.h. ψ muss für $|x| \to \infty$ verschwinden. Man sieht unmittelbar: $B_1 = 0$ und $A_3 = 0$. Bestimmung von A_1, B_3, A_2, B_2 aus Anschlussbedingungen:

$$\psi_I = \psi_{II}|_{x=-a} \qquad A_1 e^{-\kappa a} = A_2\cos(ka) - B_2\sin(ka) \tag{1}$$

$$\psi'_I = \psi'_{II}|_{x=-a} \qquad \kappa A_1 e^{-\kappa a} = A_2 k\sin(ka) + B_2 k\cos(ka) \tag{2}$$

$$\psi_{II} = \psi_{III}|_{x=a} \qquad B_3 e^{-\kappa a} = A_2\cos(ka) + B_2\sin(ka) \tag{3}$$

$$\psi'_{II} = \psi'_{III}|_{x=a} \qquad -\kappa B_3 e^{-\kappa a} = -A_2 k\sin(ka) + B_2 k\cos(ka) \ \ . \tag{4}$$

Dies ist ein lineares homogenes Gleichungssystem mit:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & 0 & -\cos(ka) & \sin(ka) \\ \kappa e^{-\kappa a} & 0 & -k\sin(ka) & -k\cos(ka) \\ 0 & e^{-\kappa a} & -\cos(ka) & -\sin(ka) \\ 0 & -\kappa e^{-\kappa a} & k\sin(ka) & -k\cos(ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_3 \\ A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \ .$$

Es besitzt genau dann eine eindeutige nichttriviale Lösung, wenn $\det(\ldots) = 0$, also:

$$\begin{aligned}
& e^{-\kappa a}\Big(- k\kappa e^{-\kappa a}\sin^2(ka) - k^2 e^{-\kappa a}\cos(ka)\sin(ka) + k\kappa e^{-\kappa a}\cos^2(ka) - \\
- \; & k^2 e^{-\kappa a}\sin(ka)\cos(ka)\Big) - \\
- \; & \cos(ka)\left(-k\kappa e^{-2\kappa a}\cos(ka) - \kappa^2 e^{-2\kappa a}\sin(ka)\right) - \\
- \; & \sin(ka)\left(k\kappa e^{-2\kappa a}\sin(ka) - \kappa^2 e^{-2\kappa a}\cos(ka)\right) = \\
& e^{-2\kappa a}\left(k\kappa 2(\cos^2(ka) - \sin^2(ka)) + k^2(-2\sin(ka)\cos(ka)) + \kappa^2(2\sin(ka)\cos(ka))\right) = 0\ .
\end{aligned}$$

Verwende

$$\sin(2ka) = 2\sin(ka)\cos(ka)$$

und

$$\cos(2ka) = \cos^2(ka) - \sin^2(ka)\ ,$$

womit folgt

$$\kappa^2 - k^2 + 2k\kappa\cot(2ka) = 0\ .$$

Diese quadratische Gleichung hat die Lösungen

$$\begin{aligned}
\kappa_{1,2} &= -k\cot(2ka) \pm \left[k^2\cot^2(2ka) + k^2\right]^{1/2} \\
&= -k\cot(2ka) \pm k\frac{1}{\sin(2ka)} \\
&= k\frac{-\cos(2ka) \pm 1}{\sin(2ka)} \\
&= k\frac{-(\cos^2(ka) - \sin^2(ka)) \pm 1}{2\sin(ka)\cos(ka)} \\
&= \begin{cases} k\tan(ka) \\ -k\cot(ka) \end{cases} \qquad \text{Eigenwertbedingungen}\ .
\end{aligned}$$

Einsetzen von $\kappa = k\tan(ka) = k\frac{\sin(ka)}{\cos(ka)}$ in (2) führt mit (1) auf die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned}
A_1 e^{-\kappa a} &= A_2\cos(ka) - B_2\sin(ka) \\
A_1 e^{-\kappa a} &= A_2\cos(ka) - B_2\frac{\cos^2(ka)}{\sin(ka)}\ .
\end{aligned}$$

Subtrahiert man die erste von der zweiten Gleichung, so findet man

$$B_2\left(\frac{\cos^2(ka)}{\sin(ka)} + \sin(ka)\right) = 0 \quad\to\quad B_2\frac{1}{\sin(ka)} \quad\to B_2 = 0\ .$$

Zusammen mit (3) bleiben also

$$\begin{aligned}
A_1 e^{-\kappa a} &= A_2\cos(ka) \\
B_3 e^{-\kappa a} &= A_2\cos(ka)\ .
\end{aligned}$$

Man erkennt unmittelbar $B_3 = A_1$.
Einsetzen von $\kappa = -k\cot(ka) = -k\frac{\cos(ka)}{sin(ka)}$ in (2) führt mit (1) und (3) ganz analog auf $B_3 = -A_1$ und $A_2 = 0$.
Gleichung (4) ist in beiden Fällen linear abhängig. Man erhält also zwei Kategorien von Lösungen:

I) symmetrische Eigenfunktionen: $\psi(x) = \psi(-x)$

$$\begin{aligned}
\kappa &= k\tan(ka) \\
\psi_I &= A_1 e^{\kappa x} \\
\psi_{II} &= A_1 e^{-\kappa x}\frac{\cos(kx)}{\cos(ka)} \\
\psi_{III} &= A_1 e^{-\kappa x}
\end{aligned}$$

II) antisymmetrische Eigenfunktionen: $\psi(x) = -\psi(-x)$

$$\begin{aligned}
\kappa &= -k\cot(ka) \\
\psi_I &= -A_1 e^{\kappa x} \\
\psi_{II} &= A_1 e^{-\kappa x}\frac{\sin(kx)}{\sin(ka)} \\
\psi_{III} &= A_1 e^{-\kappa x}
\end{aligned}$$

A_1 bestimmt sich aus der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{-a} \psi_I^2 dx + \int_{-a}^{a} \psi_{II}^2 dx + \int_{a}^{\infty} \psi_{III}^2 dx \\
&= A_1^2 \left(\frac{1}{2\kappa} e^{2\kappa x}\Big|_{-\infty}^{-a} + \frac{e^{-2\kappa x}}{\cos^2(ka)} \left(\frac{1}{2}x + \frac{1}{4k}\sin(2kx)\right)\Big|_{-a}^{a} - \frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa x}\Big|_{a}^{\infty} \right)
\end{aligned}$$

Für beide Fälle ergibt sich:

$$\frac{1}{A_1^2} = a e^{-2\kappa x}\left(1 + \frac{1}{\kappa a} + \frac{\kappa}{k^2 a} + \frac{\kappa^2}{k^2}\right) .$$

Berechnung der Eigenwerte: Einsetzen der Definitionen für κ^2 und k^2 liefert

$$(\kappa^2 + k^2)a^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}a^2 + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}a^2 = -\frac{2mU_0}{\hbar^2}a^2 = C^2 > 0 ,$$

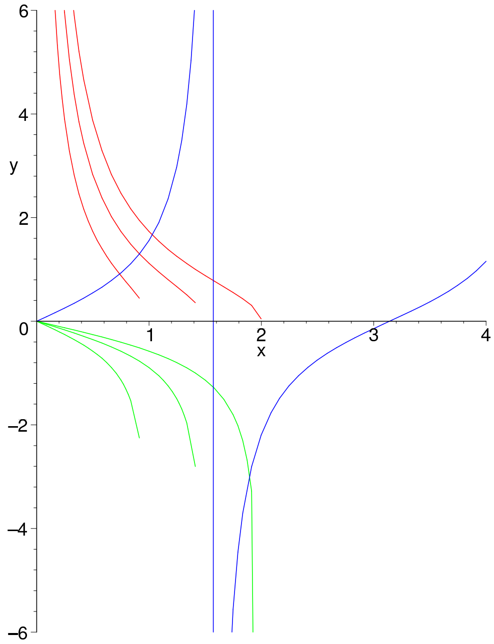
da $U_0 < 0$, so dass man für die Eigenwertbedingungen

$$\tan(ka) = \frac{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}{ka}$$

oder

$$\tan(ka) = -\frac{ka}{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}$$

erhält.



Jeder Schnittpunkt der Kurven $\frac{\sqrt{C^2-(ka)^2}}{ka}$ und $\tan(ka)$ definiert die Eigenwerte zu einer symmetrischen Eigenfunktion, die Schnittpunkte der Kurven $-\frac{ka}{\sqrt{C^2-(ka)^2}}$ und $\tan(ka)$ definieren die Eigenwerte zu einer antisymmetrischen Lösung der Schrödinger-Gleichung.

2

Da die Potentialwände bei $x = 0$ und $x = c$ unendlich hoch sind, muss die Lösung die Randbedingungen $\psi(0) = \psi(c) = 0$ erfüllen. Ansatz:

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = A_1 \sin(k_1 x) & , \quad 0 < x \leq a \\ \psi_{II} = A_2 \sin(k_2 x) + B_2 \cos(k_2 x) & , \quad a < x \leq b \\ \psi_{III} = A_3 \left(\sin(k_3 x) - \tan(k_3 c)\cos(k_3 x)\right) & , \quad b < x < c \end{cases}$$

mit

$$k_i^2 = \frac{2m(E - V_i)}{\hbar^2} > 0 \ , \quad \text{solange} \ \ E > \max_{i=1,2,3} V_i \ .$$

Die Anschlussbedingungen liefern das homogene lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_1 \sin(k_1 a) - A_2 \sin(k_2 a) - B_2 \cos(k_2 a) &= 0 \\ A_1 k_1 \cos(k_1 a) - A_2 k_2 \cos(k_2 a) + B_2 k_2 \sin(k_2 a) &= 0 \\ A_2 \sin(k_2 b) + B_2 \cos(k_2 b) - A_3 \left(\sin(k_3 b) - \tan(k_3 c)\cos(k_3 b)\right) &= 0 \\ A_2 k_2 \cos(k_2 b) - B_2 k_2 \sin(k_2 b) - A_3 k_3 \left(\cos(k_3 b) + \tan(k_3 c)\sin(k_3 b)\right) &= 0 \ . \end{aligned}$$

Die Bedingung, dass die Determinante des homogenen Gleichungssystems verschwinden muss, führt zur Eigenwertbedingung

$$\begin{aligned} &k_3 \cos(k_3(c-b)) \left[k_2 \sin(k_1 a)\cos(k_2(b-a)) + k_1 \cos(k_1 a)\sin(k_2(b-a))\right] = \\ &\quad k_2 \sin(k_3(c-b)) \left[k_2 \sin(k_1 a)\sin(k_2(b-a)) - k_1 \cos(k_1 a)\cos(k_2(b-a))\right] \ , \end{aligned}$$

die man i.A. numerisch lösen wird.

3

Spezialfall der Aufgabe 2 für $(b-a) \to 0$ und $V_2 \to \infty$. Forderung: der Grenzübergang werde so durchgeführt, dass die Fläche unter der Potentialkurve $V_2(b-a)$ konstant bleibt

$$\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} V_2(b-a) = -\frac{\hbar^2\delta}{2m} = \text{const.}\ .$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} k_2^2(b-a) &= \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \frac{2m(E-V_2)}{\hbar^2}(b-a) \\
&= -\frac{2m}{\hbar^2} \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} V_2(b-a) = \delta \\
\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} k_2(b-a) &= 0\ .
\end{aligned}$$

Einsetzen in die Eigenwertgleichung:

$$\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \Bigg[k_3\cos(k_3(c-b)) \left[\sin(k_1 a)\cos(k_2(b-a)) + k_1\cos(k_1 a)\frac{\sin(k_2(b-a))}{k_2}\right] - \\
\sin(k_3(c-b))\left[k_2\sin(k_1 a)\sin(k_2(b-a)) - k_1\cos(k_1 a)\cos(k_2(b-a))\right]\Bigg] = 0\ ,$$

mit den Grenzwerten

$$\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \cos(k_2(b-a)) = 1$$

und

$$\begin{aligned}
0 \quad &\le \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \frac{\sin(k_2(b-a))}{k_2} \le \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \frac{k_2(b-a)}{k_2} = 0 \\
&\to \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \frac{\sin(k_2(b-a))}{k_2} = 0
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
\lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} k_2\sin(k_2(b-a)) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} \left(k_2^{2l+2}(b-a)^{2l+1}\right) \\
&= \lim_{\dots} k_2^2(b-a) + \\
&+ \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} \lim_{\dots} k_2^2(b-a) \Bigg(\underbrace{\lim_{\dots} k_2(b-a)}_{=0}\Bigg)^2 \\
&= \lim_{V_2\to\infty,(b-a)\to 0^+} k_2^2(b-a) = \delta
\end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned}
k_3\cos(k_3(c-a))\sin(k_1 a) - \delta\sin(k_3(c-b))\sin(k_1 a) + k_1\sin(k_3(c-b))\cos(k_1 a) &= 0 \\
k_3\cot(k_3(c-a)) + k_1\cot(k_1 a) &= \delta\ .
\end{aligned}$$

Ansatz für Eigenfunktion

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = A_1 \sin(k_1 x) & , \quad 0 \le x < a \\ \psi_{II} = A_2 e^{k_2(x-a)} + B_2 e^{-k_2(x-a)} & , \quad a \le x < b \\ \psi_{III} = A_3 \sin(k_3(x-c)) & , \quad b \le x < c \ . \end{cases}$$

Aus der Anschlussbedingung für ψ bei $x = a$ und $x = b$ folgt

$$\begin{aligned} A_1 \sin(k_1 x) &= A_2 + B_2 \\ A_3 \sin(k_3(b-c)) &= A_2 e^{k_2(b-a)} + B_2 e^{-k_2(b-a)} \ . \end{aligned}$$

Grenzübergang $k_2(b-a) \to 0$ führt auf die Bedingung

$$A_1 \sin(k_1 a) = A_3 \sin(k_3(a-c)) \ ,$$

d.h.

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = A_1 \sin(k_1 x) & , \quad 0 < x < a \\ \psi_{III} = A_1 \frac{\sin(k_1 a)}{\sin(k_3(a-c))} \sin(k_3(x-c)) & , \quad a < x < c \ . \end{cases}$$

ψ ist also in der Potentialwand stetig, jedoch nicht ψ':

$$\begin{aligned} (\psi'_{III} - \psi'_I)\Big|_{x=a} &= -A_1 \sin(k_1 a) \left[k_3 \cot(k_3(c-a)) + k_1 \cot(k_1 a)\right] \\ &= -A_1 \delta \sin(k_1 a) \\ &= -\psi_I(a) \delta \ . \end{aligned}$$

Der freie Parameter δ bestimmt die Durchlässigkeit der Wand, z.B.

- $\frac{1}{\delta} = 0$: Aus der obigen Gleichung folgt $\psi_I(a) = \psi_{III}(a) = 0$, d.h. die Wand ist undurchlässig.
- $\delta = 0$: Aus der obigen Gleichung folgt $(\psi'_{III} - \psi'_I)\Big|_{x=a} = 0$, d.h. die Wand ist vollständig durchlässig und ψ' wird stetig bei $x = a$.

4

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi \ , \quad -\infty < x < -a \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi &= E\psi \ , \quad -a \le x \le a \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi \ , \quad a < x < \infty \ . \end{aligned}$$

a) Sei $E < V_0$, dann ist α rein imaginär, d.h. die Lösung der Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = b_1 e^{ikx} + c_1 e^{-ikx} & , \quad -\infty < x < -a \\ \psi_{II}(x) = b_2 e^{-\beta x} + c_2 e^{\beta x} & , \quad -a \leq x \leq a \\ \psi_{III}(x) = b_3 e^{ikx} + c_3 e^{-ikx} & , \quad a < x < \infty \end{cases}$$

mit $\alpha = i\beta$. Die Konstanten $b_1, \ldots, c_3$ lassen sich über die Stetigkeitsbedingungen von $\psi(x)$ bei $x = -a$ und $x = a$ bestimmen. Es muss gelten

$$\begin{aligned} \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \quad &\text{und} \quad \left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=-a} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=-a} \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \quad &\text{und} \quad \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a} . \end{aligned}$$

Man erhält die Gleichungen

$$\begin{aligned} b_1 e^{-ika} + c_1 e^{ika} &= b_2 e^{\beta a} + c_2 e^{-\beta a} \\ ikb_1 e^{-ika} - ikc_1 e^{ika} &= -\beta b_2 e^{\beta a} + \beta c_2 e^{\beta a} \end{aligned} \tag{1}$$

und

$$\begin{aligned} b_2 e^{-\beta a} + c_2 e^{\beta a} &= b_3 e^{ika} + c_3 e^{-ika} \\ -\beta b_2 e^{-\beta a} + \beta c_2 e^{\beta a} &= -ikb_3 e^{ika} - ikc_3 e^{-ika} . \end{aligned} \tag{2}$$

Aus (1) folgt

$$b_1 = \frac{1}{2}\left(b_2\left(1 + \frac{i\beta}{k}\right)e^{\beta a + ika} + c_2\left(1 - \frac{i\beta}{k}\right)e^{-\beta a + ika}\right) \tag{3}$$

und aus (2)

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1}{2}\left(b_3\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)e^{\beta a + ika} + c_3\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)e^{\beta a - ika}\right) \\ c_2 &= \frac{1}{2}\left(b_3\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)e^{-\beta a + ika} + c_3\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)e^{-\beta a - ika}\right) . \end{aligned} \tag{4}$$

Angenommen, die ebene Welle laufe von links nach rechts, dann ist $c_3 = 0$ und Einsetzen von (4) in (3) ergibt

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{b_3}{4}e^{2ika}\left(\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)\left(1 + \frac{i\beta}{k}\right)e^{2\beta a} + \left(1 - \frac{i\beta}{k}\right)\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)e^{-2\beta a}\right) \\ &= b_3 e^{2ika}\left(\cosh(2\beta a) + \frac{i\epsilon}{2}\sinh(2\beta a)\right) , \end{aligned}$$

wobei $\epsilon = \frac{\beta}{k} - \frac{k}{\beta}$ ist. Für den Transmissionskoeffizienten findet man

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{\cosh^2(2\beta a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\beta}{k} - \frac{k}{\beta}\right)^2 \sinh^2(2\beta a)}$$

und mit $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\beta}{k} + \frac{k}{\beta}\right)^2 \sinh^2(2\beta a)} \; .$$

b) Im Fall $E > V_0$ ist α reell und man erhält analog zu a)

$$\begin{aligned} b_1 e^{-ika} + c_1 e^{ika} &= b_2 e^{i\alpha a} + c_2 e^{-i\alpha a} \\ ikb_1 e^{-ika} - ikc_1 e^{ika} &= -i\alpha b_2 e^{i\alpha a} + i\alpha c_2 e^{-i\alpha a} \end{aligned} \tag{5}$$

und

$$\begin{aligned} b_2 e^{-i\alpha a} + c_2 e^{i\alpha a} &= b_3 e^{ika} + c_3 e^{-ika} \\ -i\alpha b_2 e^{-i\alpha a} + i\alpha c_2 e^{i\alpha a} &= ikb_3 e^{ika} - ikc_3 e^{-ika} \; . \end{aligned} \tag{6}$$

Aus (5) folgt

$$b_1 = \frac{1}{2}\left(b_2\left(1 - \frac{\alpha}{k}\right)e^{i(ka+\alpha a)} + c_2\left(1 + \frac{\alpha}{k}\right)e^{i(ka-\alpha a)}\right) \tag{7}$$

und aus (6)

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1}{2}\left(b_3\left(1 - \frac{k}{\alpha}\right)e^{i(ka+\alpha a)} + c_3\left(1 + \frac{k}{\alpha}\right)e^{-i(ka-\alpha a)}\right) \\ c_2 &= \frac{1}{2}\left(b_3\left(1 + \frac{k}{\alpha}\right)e^{i(ka-\alpha a)} + c_3\left(1 - \frac{k}{\alpha}\right)e^{-i(ka+\alpha a)}\right) \; . \end{aligned} \tag{8}$$

Da die Welle aber nur von links nach rechts laufen soll, gilt $c_3 = 0$. Einsetzen von (8) in (7) ergibt

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{b_3}{4}e^{2ika}\left(\left(1 - \frac{\alpha}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{\alpha}\right)e^{2i\alpha a} + \left(1 + \frac{\alpha}{k}\right)\left(1 + \frac{k}{\alpha}\right)e^{-2i\alpha a}\right) \\ &= b_3 e^{2ika}\left(\cos(2\alpha a) - \frac{i\epsilon'}{2}\sin(2\alpha a)\right) \; , \end{aligned}$$

mit $\epsilon' = \frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}$ ist. Für den Transmissionskoeffizienten findet man

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{\cos^2(2\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2 \sin^2(2\alpha a)}$$

und mit $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} - \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sin^2(2\alpha a)} \; .$$

Aus den so hergeleiteten Ausdrücken für T geht hervor, dass das Teilchen auch bei $E < V_0$ eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit besitzt, was nach den Vorstellungen der klassischen Physik unmöglich ist. Wenn $E > V_0$ ist, erreicht T nur für die Werte einiger *Resonanzenergien* den der klassischen Mechanik entsprechenden Wert $T = 1$ ($\sin^2(2\alpha a) = 0 \;\rightarrow\; 2\alpha a = n\pi$).

5

Die Streuung am Potentialtopf wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi \quad , \quad -\infty < x < -a \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi &= E\psi \quad , \quad -a \leq x \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi \quad , \quad a < x < \infty \end{aligned}$$

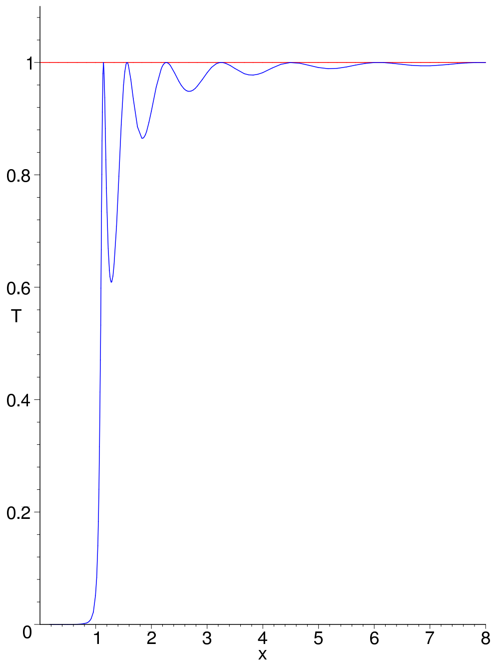
beschrieben. Für $E > 0$ ist der Ausdruck

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$$

reell, d.h. die Lösung dieses Problems hat die gleiche Form wie die Lösung der vorhergehenden Aufgabe für $E > V_0$. Daher ist es auch hier sinnvoll, einen Transmissionskoeffizienten zu definieren:

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} - \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sin^2(2\alpha a)} \ .$$

Nur bei bestimmten Energien geht das Teilchen vollständig über den Potentialtopf hinweg, während normalerweise auch ein gewisser Prozentsatz an Reflexion vorliegt.



Die Maxima von $T(E)$ liegen bei $2\alpha a = n\pi$. Sie sind umso ausgeprägter, je breiter und tiefer der Potentialtopf ist, d.h. je größer der Ausdruck $\frac{8m}{\hbar^2}a^2V_0$ wird. Die stark ausgeprägten Maxima heißen <u>Resonanzen</u> (Abbildung: $x = \frac{E}{V_0}$ und $\frac{8m}{\hbar^2}a^2V_0 = 70$).

6

a) Zu lösen ist die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi \\ \hat{H} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z)\right) .\end{aligned}$$

Das Potential lässt sich schreiben als

$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) ,$$

mit

$$V_1(x) = V_2(y) = V_3(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty & \text{außerhalb dieser Intervalle .} \end{cases}$$

Man kann leicht durch Einsetzen zeigen, dass sich die Lösung der Schrödinger-Gleichung schreiben lässt als

$$\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) .$$

Dabei gelten dann die eindimensionalen Gleichungen

$$\frac{d^2\psi_i(x_i)}{dx_i^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_i - V_i(x_i))\psi_i(x_i) = 0 \quad i = x,y,z$$

und

$$E = E_x + E_y + E_z .$$

Für die Funktionen $\psi_i(x_i)$ machen wir den Ansatz

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A\sin k_1 x + B\cos k_1 x \quad , \quad 0 < x < a \\ \psi_1(y) &= C\sin k_2 y + D\cos k_2 y \quad , \quad 0 < y < b \\ \psi_1(z) &= F\sin k_3 z + G\cos k_3 z \quad , \quad 0 < z < c\end{aligned}$$

mit

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E .$$

Nach Voraussetzung soll an den Wänden gelten $\psi = 0$, d.h. beispielsweise für ψ_1:

$$\psi_1(a) = A\sin k_1 a = 0 \quad \to \quad k_1 = \frac{n_1\pi}{a}$$

und entsprechend

$$k_2 = \frac{n_2\pi}{b} \quad , \quad k_3 = \frac{n_3\pi}{c} .$$

Nun noch die Normierung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_1(x)dx = \int_0^{\infty} A^2 \sin^2\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) dx .$$

Die Substitution

$$n = \frac{n_1\pi}{a}x \quad , \quad \frac{dn}{dx} = \frac{n_1\pi}{a}$$

führt auf

$$\int_0^{n_1\pi} A^2 \frac{a}{n_1\pi}\sin^2 n dn = A^2\frac{a}{n_1\pi}\left[-\frac{1}{2}\cos n \sin n + \frac{1}{2}n\right]_0^{n_1\pi} = A^2\frac{a}{n_1\pi}\frac{n_1\pi}{2} = A^2\frac{a}{2} = 1$$

also

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \ .$$

Die Lösungen $\psi(x,y,z)$ lauten also

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right)\sin\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right) \ .$$

Die Energie des Teilchens ist quantisiert, die möglichen Werte sind

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right) \quad , \quad n_1,n_2,n_3 = 1,2,3,\ldots \ .$$

b) Wenn das Verhältnis von 2 Seiten eine irrationale Zahl ist, sind alle Energiewerte nicht-entartet. Ansonsten ist das Energiespektrum im allgemeinen entartet. Beispiel: $a = b = c$
Hier ist $E_{121} = E_{112} = E_{211} = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, also dreifache Entartung. Der Grundzustand E_{111} ist aber in jedem Fall nicht-entartet!

7

a) Wir gehen in den Impulsraum und schreiben

$$\tilde{\psi}(p,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int \psi(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx \ .$$

Unsere gesuchte Wahrscheinlichkeit ist

$$W(p>0,t) = \int_0^\infty |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp \ ; \ \ t>0 \ . \tag{1}$$

Es gilt natürlich:

$$W(p \ \text{ beliebig}, t) = W(p<0,t) + W(p>0,t) = 1 \ . \tag{2}$$

Für den harmonischen Oszillator gilt:

$$\left[\hat{p},\hat{H}\right] = 0 \quad \rightarrow \quad \left[\hat{p}, e^{-\frac{i}{\hat{H}t}}\right] = 0 \ , \tag{3}$$

d.h. die Zeitentwicklung ändert nichts an Paritätseigenfunktionen. Es gilt $\psi(x,0) = \psi(-x,0)$ und damit $\tilde{\psi}(p,0) = \tilde{\psi}(-p,0)$ und mit (3) $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(-p,t)$. Aus (2) erhalten wir dann

$$1 = 2\int_0^\infty |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp \;\; ; \;\; t > 0 \; ,$$

also das Ergebnis $W(p>0,t) = \frac{1}{2}$.

b) Wir rekapitulieren die Eigenschaften der *Erzeuger* $\hat{a}^\dagger$ und *Vernichter* $\hat{a}$ des harmonischen Oszillators:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2m} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

mit

$$\hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

und

$$\hat{a}^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

bzw.

$$\hat{q} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$$

und

$$\hat{p} = i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) \; .$$

Es gelten weiter die Kommutatorbeziehungen

$$\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right] = 1 \;\; , \;\; \left[\hat{H},\hat{a}\right] = -\hbar\omega\hat{a} \;\; , \;\; \left[\hat{H},\hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger \; .$$

Mit $\psi_n(q) = \langle q|n\rangle$ der Wellenfunktion im n-ten Zustand gilt:

$$\begin{aligned}
\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\
\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\
|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle \; .
\end{aligned}$$

Wir beginnen mit

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{q}|m\rangle &= \int \langle n|q'\rangle\langle q'|\hat{q}|q''\rangle\langle q''|m\rangle dq'dq'' \\
&= \int \psi_n^*(q')q''\delta(q'-q'')\psi_m(q'')dq'dq'' \\
&= \int \psi_n^*(q)q\psi_m(q)dq \\
&= \hat{q}_{nm} \; .
\end{aligned}$$

Mit den obigen Definitionen findet man

$$\begin{aligned} \hat{q}_{nm} &= \langle n| \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)|m\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \langle n|\hat{a}+\hat{a}^\dagger|m\rangle \end{aligned}$$

und nach weiterer Umformung

$$\begin{aligned} \hat{q}_{nm} &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left(\sqrt{m}\langle n|m-1\rangle + \sqrt{m+1}\langle n|m+1\rangle\right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}\right) \\ &= \begin{cases} \left(\frac{\hbar m}{2m\omega}\right)^{1/2} & ;\ n=m-1 \\ \left(\frac{\hbar(m+1)}{2m\omega}\right)^{1/2} & ;\ n=m+1 \\ 0 & ;\ \text{sonst} \end{cases} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Völlig analog folgt $\hat{p}_{nm} = \langle n|\hat{p}|m\rangle$:

$$\hat{p}_{nm} = i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

Der Oszillator ist im n-ten Zustand:

$$\hat{H}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{H}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle = \left(n\hbar\omega + \frac{1}{2}\right)|n\rangle .$$

Mit den obigen Beziehungen folgt dann sofort für die Erwartungswerte $<\hat{q}>$ und $<\hat{p}>$:

$$\langle n|\hat{q}|n\rangle = 0 \ ; \ \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 .$$

Für die Quadrate $<\hat{q}^2>$ und $<\hat{p}^2>$ berechnen wir erst

$$\langle n|\left(\hat{a}^\dagger+\hat{a}\right)^2|n\rangle = 2n+1$$

und

$$\langle n|\left(\hat{a}^\dagger-\hat{a}\right)^2|n\rangle = -(2n+1)$$

Damit erhalten wir für $< \hat{q}^2 >$ und $< \hat{p}^2 >$:

$$\langle n|\hat{q}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

und

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1) \ .$$

Für die Abweichungen Δq und Δp findet man

$$\Delta q = \left(< \hat{q}^2 > - < \hat{q} >^2\right)^{1/2} = \left(\frac{(2n+1)\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}$$

und

$$\Delta p = \left(< \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2\right)^{1/2} = \left(\frac{(2n+1)m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} \ .$$

Es ist also $\Delta q\Delta p = \frac{\hbar}{2}(2n+1)$. Für den Grundzustand $|0\rangle$ erhalten wir also $\Delta q\Delta p = \frac{\hbar}{2}$, den nach der Unschärferelation kleinstmöglichen Wert des kanonisch konjugierten Variablenpaares p und q.

c) Wir wechseln in den Impulsraum:

$$\hat{q} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \quad \hat{p} \to p$$

und damit

$$\hat{H} \to \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2} \ .$$

Zu lösen ist

$$i\hbar\frac{\partial\phi(p,t)}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\phi(p,t) \ .$$

Separationsansatz:

$$\phi(p,t) = \phi(p)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \ .$$

Damit erhalten wir die Eigenwertgleichung

$$\frac{d^2\phi}{dp^2} + \frac{2}{m\omega^2\hbar^2}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\phi = 0 \ ,$$

die auch in der Form

$$\frac{d^2\phi}{dp^2} + (\lambda - \eta^2)\phi = 0$$

mit

$$\eta = \frac{p}{p_0} \ \ , \ \ p_0 = \sqrt{m\omega\hbar} \ \ \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

geschrieben werden kann. Dies ist die gleiche Differentialgleichung, die wir im Ortsraum erhalten haben (nur die Konstanten (bzw. p_0) sind leicht anders definiert). Die Lösungen lauten

$$\phi_n(p) = \left(2^n n! p_0 \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2}$$

zum Energiewert

$$E_n = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) .$$

8

Die Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - Ae^{-2\alpha x} + 2Ae^{-\alpha x})\psi = 0 .$$

Wir führen die neue Variable

$$\xi = \frac{2\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} e^{-\alpha x}$$

ein und die Beziehungen

$$s = \frac{\sqrt{-2mE}}{\alpha\hbar} \quad , \quad n = \frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} - \left(s + \frac{1}{2}\right) .$$

Durch obige Substitution

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dx}\frac{d\psi}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)\frac{d\xi}{dx} + \frac{d\psi}{d\xi}\frac{d^2\xi}{dx^2} \\
&= \frac{d\xi}{dx}\left[\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)\right]\frac{d\xi}{dx} + \frac{d\psi}{d\xi}\frac{d^2\xi}{dx^2} \\
&= \frac{d^2\psi}{d\xi^2}\left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2 + \frac{d\psi}{d\xi}\frac{d^2\xi}{dx^2} \\
&= \psi''\left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2 + \psi'\frac{d^2\xi}{dx^2}
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2 &= \frac{4(2mA)}{\hbar^2}e^{-2\alpha x} \\
\frac{d^2\xi}{dx^2} &= \frac{2\sqrt{2mA}}{\hbar}\alpha e^{-\alpha x}
\end{aligned}$$

und einige Umformungen nimmt die Schrödinger-Gleichung dann folgende Form an :

$$\psi'' + \frac{1}{\xi}\psi' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n + s + \frac{1}{2}}{\xi} - \frac{s^2}{\xi^2}\right)\psi = 0 .$$

Asymptotische Lösungen:
$\xi \to \infty$ verhält sich ψ wie $e^{\pm\xi/2}$
$\xi \to 0$ ist ψ proportional zu $\xi^{\pm s}$.
Damit die Lösung endlich bleibt, scheiden $e^{+\xi/2}$ und ξ^{-s} als asymptotische Lösungen aus. Wir substituieren

$$\psi = e^{-\xi/2}\xi^s w(\xi)$$

und erhalten für w die Gleichung

$$\xi w'' + (2s + 1 - \xi)w' + nw = 0 \; ,$$

die unter der folgenden Bedingung gelöst werden muss: w ist für $\xi = 0$ endlich und wird für $\xi \to \infty$ nicht schneller als eine endliche Potenz von ξ unendlich. Die obige Differentialgleichung für w ist die Differentialgleichung für die *konfluente hypergeometrische Funktion*

$$w = F(-n, 2s + 1, \xi) \; .$$

Eine Lösung, die die geforderten Bedingungen erfüllt, ergibt sich für nicht-negatives ganzzahliges n (F wird zum Polynom). Aus den Definitionsgleichungen für s und n erhalten wir für die Energieniveaus die Werte:

$$-E_n = A\left[1 - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mA}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2 \; .$$

n durchläuft dabei die positiven ganzzahligen Werte von Null an bis zu dem größten Wert für den noch

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} > n + \frac{1}{2}$$

ist. Das diskrete Spektrum enthält also eine beschränkte Folge von Niveaus. Für

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} < n + \frac{1}{2}$$

gibt es überhaupt kein diskretes Spektrum.

9

1) Wir zeigen zuerst, dass aufgrund von $V(x + d) = V(x)$ gilt $\psi(x + d) = C\psi(x)$. Es gilt

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0 \tag{1}$$

und

$$\psi''(x + d) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x + d))\psi(x + d) = 0 \; .$$

Definiere $\tilde{\psi} = \psi(x) - \psi(x + d)$. Aufgrund von $V(x + d) = V(x)$ gilt

$$\psi''(x + d) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x + d) = 0 \; . \tag{2}$$

Subtrahiere (1) und (2):

$$\tilde{\psi}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\tilde{\psi} = 0 \; .$$

Dies ist aber die Gleichung (1). Daraus ergibt sich $\tilde{\psi} = \tilde{C}\psi$ und mit $\tilde{\psi} = \psi(x) - \psi(x+d)$ folgt $\psi(x+d) = C\psi(x)$ (*Bloch-Theorem*). Weiterhin folgt nun $\psi(x+nd) = C^n\psi(x)$. Wäre nun $|C| \neq 1$, so würde $\psi(x)$ in eine x-Richtung unendlich größer werden, wäre also keine physikalische Lösung. Also muss gelten

$$C = e^{i\phi} \quad , \quad \phi \text{ ist reell} \; .$$

Somit ist $|C| = 1$ und $\psi(x+d) = e^{i\phi}\psi(x)$. Wir machen nun einen Ansatz für die Wellenfunktion in der Periode $-b < x < a$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{i\beta x} + Be^{-i\beta x} & , \; -b < x < 0 \\ De^{i\alpha x} + Fe^{-i\alpha x} & , \; o < x < a \; , \end{cases}$$

mit

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad , \quad \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \; .$$

Dann muss in der Periode $a < x < a + d$ gelten:

$$\psi(x) = e^{i\phi} \begin{cases} Ae^{i\beta(x-d)} + Be^{-i\beta(x-d)} & , \; a < x < d \\ De^{i\alpha(x-d)} + Fe^{-i\alpha(x-d)} & , \; d < x < a + d \; . \end{cases}$$

2) Aus den Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ und $x = a$ erhält man die folgenden Gleichungen

$$\begin{aligned} A + B &= D + F \\ \beta(A - B) &= \alpha(D - F) \\ e^{i\phi}\left(Ae^{i\beta b} + Be^{-i\beta b}\right) &= De^{i\alpha a} + Fe^{-i\alpha a} \\ \beta e^{i\phi}\left(Ae^{i\beta b} - Be^{-i\beta b}\right) &= \alpha\left(De^{i\alpha a} - Fe^{-i\alpha a}\right) \; . \end{aligned}$$

Nicht-triviale Lösungen für A, B, D, F erhält man unter der Bedingung, dass die Determinante der Koeffizienten verschwindet. Daraus erhält man die folgenden Bedingungen:

$$\cos\phi = \begin{cases} \cos(a\alpha)\cosh(b\delta) - \frac{\alpha^2-\delta^2}{2\alpha\delta}\sin(a\alpha)\sinh(b\delta) & , \; 0 < E < V_0 \\ \cos(a\alpha)\cos(b\beta) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(a\alpha)\sin(b\beta) & , \; E > V_0 \end{cases}$$

mit

$$\delta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \; .$$

3) Die Energie steht in den Größen α, β, δ und hat Werte, so dass

$$-1 \leq \cos\phi \leq +1 \ .$$

Nun unterscheiden wir 2 Fälle:

I) $0 < E < V_0$ Wir machen nun den in der Aufgabenstellung beschriebenen Grenzübergang $b \to 0$, $V_0 \to \infty$, so dass $b\delta^2$ endlich bleibt. Wir definieren

$$P = \lim_{b\to 0\ ,\ V_0\to\infty} \frac{ab\delta^2}{2} \ .$$

Die Bedingung $-1 \leq \cos\phi \leq +1$ lautet nun:

$$-1 \leq P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha} + \cos(a\alpha) \leq +1 \ .$$

Dies sieht man so: Wir untersuchen

$$\cos(a\alpha)\cosh(b\delta) - \left[\frac{\alpha^2}{2\alpha\delta} - \frac{\delta^2}{2\alpha\delta}\right]\sin(a\alpha)\sinh(b\delta) \ .$$

Dies schreiben wir um in

$$\cos(a\alpha)\cosh(b\delta) - \left[\frac{\alpha}{2\delta} - \frac{ab\delta^2}{2}\frac{1}{ab\alpha\delta}\right]\sin(a\alpha)\sinh(b\delta) \ .$$

Es ist

$$\lim_{b\to 0\ ,\ V_0\to\infty} b\delta^2 = \text{endlich} \ ,$$

und

$$\lim_{b\to 0\ ,\ V_0\to\infty} b\delta = 0 \ .$$

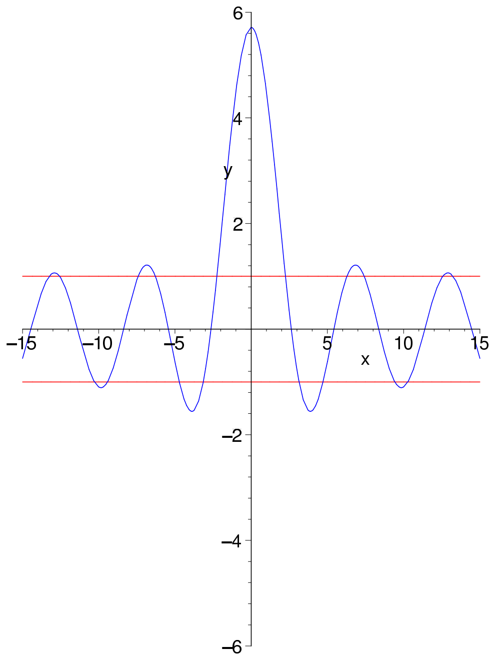
Nun ist

$$\lim_{x\to 0}\cosh x = 1$$

und für kleine x gilt $\sinh x \approx x$, d.h. der Grenzübergang $b \to 0\ ,\ V_0 \to \infty$ führt auf

$$\cos(a\alpha)\cdot 1 - \left[0 - P\frac{1}{ab\alpha\delta}\right]\sin(a\alpha)b\delta = \cos(a\alpha) + P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha} \ .$$

Wir stellen $y = P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha} + \cos(a\alpha)$ graphisch in Abhängigkeit von $x = a\alpha$ dar und wählen $P = \frac{3\pi}{2}$.



Man erkennt, dass das Energiespektrum aus einer Reihe von getrennten Bereichen besteht, innerhalb derer die Energie sich kontinuierlich verändern kann. Diese Bereiche nennt man erlaubte Bänder, die anderen Bereiche verbotene Bänder. Die Breite der erlaubten Bänder steigt mit steigender Energie.

II) $0 < E < V_0$ Die möglichen Energiewerte für diesen Fall ergeben sich aus der Bedingung

$$-1 \leq f(E) \leq +1 \ ,$$

mit

$$\begin{aligned} f(E) &= \cos(a\alpha)\cos(b\beta) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(a\alpha)\sin(b\beta) \\ &= \cos(a\alpha + b\beta) - \frac{(\alpha-\beta)^2}{2\alpha\beta}\sin(a\alpha)\sin(b\beta) \ . \end{aligned}$$

Auch in diesem Fall entsteht wieder eine Bandstruktur.

Anmerkung: Das Modell, das unter der Einführung des oben besprochenen Grenzprozesses enstand, also mit

$$V(x) = D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na)$$

wird als Kronig-Penney-Modell bezeichnet.

10

a) Nach Definition gilt

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \ .$$

Dabei haben wir benutzt, dass

$$[yp_z, xp_z] = [zp_y, zp_x] = 0.$$

Nun benutzen wir noch die Beziehung

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \ .$$

Also

$$y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = -i\hbar y p_x + i\hbar x p_y = i\hbar L_z \ .$$

Weiterhin ergibt sich:

$$[L_y^2, L_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y = -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y$$

und ähnlich

$$[L_z^2, L_x] = L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z = i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z \ .$$

Schließlich erhalten wir

$$[L^2, L_x] = [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] = 0 - i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0 \ ,$$

ebenso

$$[L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \ .$$

b) i) Das ket $|\psi\rangle$ schreiben wir als

$$|\psi\rangle = \int \psi(\vec{r})|\vec{r}\rangle d^3r \ .$$

Daraus folgt

$$\hat{\Pi}|\psi\rangle = \int \psi(\vec{r}) \left[\hat{\Pi}|\vec{r}\rangle\right] d^3r = \int \psi(\vec{r})| - \vec{r}\rangle d^3r \ .$$

Wir wechseln nun die Integrationsvariable von $\vec{r}' = -\vec{r}$, und erhalten die zu $\hat{\Pi}|\psi\rangle$ korrespondierende Wellenfunktion:

$$\langle\vec{r}|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \int \psi(-\vec{r}')\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle d^3r' = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}')\psi(-\vec{r})d^3r' = \psi(-\vec{r}) \ .$$

ii) Aus Teil i) folgt

$$\langle\vec{r}|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \langle-\vec{r}|\psi\rangle \quad\rightarrow\quad \langle\vec{r}|\hat{\Pi} = \langle-\vec{r}| \ .$$

Andererseits ist das hermitesch konjugierte von

$$\hat{\Pi}|\vec{r}\rangle = -|-\vec{r}\rangle$$

gleich

$$\langle\vec{r}|\hat{\Pi}^\dagger = \langle-\vec{r}| \ .$$

Da dies für alle $\langle\vec{r}|$ gilt, ist $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger$.

iii) Es ist

$$\hat{\Pi}^2|\vec{r}\rangle = \hat{\Pi}\hat{\Pi}|\vec{r}\rangle = \hat{\Pi}|-\vec{r}\rangle = |\vec{r}\rangle \ .$$

Dies gilt für alle $|\vec{r}\rangle$, d.h. $\hat{\Pi}^2 = \hat{1}$.
Sei nun $|\phi\rangle$ ein Eigenvektor von $\hat{\Pi}$ mit dem Eigenwert p, d.h. $\hat{\Pi}|\phi\rangle = p|\phi\rangle$. Es ist nun auch

$$\hat{\Pi}^2|\phi\rangle = \hat{1}|\phi\rangle = |\phi\rangle$$

und weiterhin

$$\hat{\Pi}^2|\phi\rangle = \hat{\Pi}\left[p|\phi\rangle\right] = p\hat{\Pi}|\phi\rangle = p^2|\phi\rangle \quad\rightarrow\quad p^2 = 1 \ .$$

Da aber $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger$ folgt, dass die Eigenwerte von $\hat{\Pi}$ reell sein müssen: $p = \pm 1$.

iv) Es ist

$$\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \hat{\Pi}\hat{p}_+|\psi\rangle = \frac{1}{2}\hat{\Pi}\left[1+\hat{\Pi}\right]|\psi\rangle = \frac{1}{2}\left[\hat{\Pi}+\hat{\Pi}^2\right]|\psi\rangle \ .$$

Mit Hilfe von Teil iii) erhalten wir

$$\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \frac{1}{2}\hat{\Pi}\left[\hat{\Pi}+1\right]|\psi\rangle = p_+|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \ .$$

$|\psi_+\rangle$ ist also ein Eigenvektor von $\hat{\Pi}$ mit dem Eigenwert $+1$. Ähnlich sieht man: $|\psi_-\rangle$ ist Eigenvektor zu $\hat{\Pi}$ mit dem Eigenwert -1.

v) Wir wissen bereits:

$$\langle\vec{r}|\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \psi_+(-\vec{r}) \ .$$

Es ist aber auch

$$\langle\vec{r}|\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \langle\vec{r}|\psi_+\rangle = \psi_+(+\vec{r}) \ .$$

Daraus folgt unmittelbar

$$\psi_+(-\vec{r}) = \psi_+(+\vec{r}) \ ,$$

d.h. ψ_+ ist eine <u>gerade</u> Funktion. Ähnlich sieht man: $\psi_-(-\vec{r}) = -\psi_-(+\vec{r})$, d.h. ψ_- ist eine <u>ungerade</u> Funktion.

<u>Bemerkung:</u> Jedes $|\psi\rangle$ lässt sich schreiben als

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle \ .$$

Wir haben hier also eine Methode, um eine Wellenfunktion in gerade und ungerade Anteile zu zerlegen.

c) Nein, denn er ist keine umkehrbare eindeutige Abbildungsvorschrift. Alle $|\psi\rangle \in \mathbf{H}$ mit denselben $\langle a|\psi\rangle$ werden durch $P(|a\rangle)$ auf denselben Vektor a abgebildet:

$$P(|a\rangle)|\psi\rangle = |a\rangle\langle a|\psi\rangle \ .$$

11

a) Matrixdarstellung von AB:

$$(AB)_{ij} = \langle u_i|AB|u_j\rangle = \langle u_i|A\hat{1}B|u_j\rangle \ .$$

Wir benutzen $\hat{1} = \sum_k |u_k\rangle\langle u_k|$:

$$(AB)_{ij} = \sum_k \langle u_i|A|u_k\rangle\langle u_k|B|u_j\rangle = \sum_k A_{ik}B_{kj} \ .$$

b) Nach Definition wird das ket $A|\psi\rangle$ repräsentiert durch die Zahlen

$$c_i' = \langle u_i|A|\psi\rangle \ .$$

Man erhält:

$$c_i' = \langle u_i|A\hat{1}|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_j A_{ij}c_j \ .$$

In Matrixform sieht das dann so aus:

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ c_3' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \\ & & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \ .$$

c) Es ist

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = \sum_{ij} \langle\phi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} c_j \ .$$

d) Es ist

$$P_{ij} = \langle u_i|P|u_j\rangle = \langle u_i|u_k\rangle\langle u_k|u_j\rangle = \delta_{ik}\delta_{jk} \ .$$

12

a) Wir verwenden atomare Einheiten $e = \hbar = 1$. Wellenfunktion im Grundzustand:

$$\psi = R_{10}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r} \ .$$

Zu lösen ist die Poisson-Gleichung

$$\Delta v_e = -4\pi\rho_e \ ,$$

d.h. für die kugelsymmetrische Grundzustandsdichte (beachte negative Elektronenladung!)

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rv_e) = 4e^{-2r}\ .$$

Wir integrieren diese Gleichung

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr}(rv_e) &= e^{-2r}(-2r-1)+c_1 = -2re^{-2r}-e^{-2r}+c_1\\ v_e(r) &= e^{-2r}+\frac{1}{r}e^{-2r}+\frac{c_1}{r}+c_2\end{aligned}$$

und wählen die Konstanten so, dass $v_e(\infty)=0$ ($c_2=0$) und $v_e(0)$ endlich ($c_1=1$) ist. Dann addieren wir das Kernpotential ($v_{Kern}=-\frac{1}{r}$) und erhalten

$$v = v_e + v_{Kern} = e^{-2r}+\frac{1}{r}e^{-2r}+\frac{1}{r}-\frac{1}{r} = \left(\frac{1}{r}+1\right)e^{-2r}\ .$$

b) Für $r\to 0$ bleibt $v\approx\frac{1}{r}$, d.h. das Kernpotential.
Für r groß wird das Kernpotential durch das Elektron abgeschirmt $v\approx e^{-2r}$.

13

a) i) Wir betrachten den Exponentialfaktor in $\psi(r,\theta)$: er hat die Form $e^{-\sqrt{-E}r}$. Da $E=-\frac{Z^2}{2n^2}$ ist, schließen wir auf $n=3$. Die Drehimpulsquantenzahl l erhalten wir durch Anwendung von $\hat{L}^2$ auf ψ:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\psi(r,\theta) &= \hat{L}^2 f(r)\cos\theta = f(r)\left(-\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\right)\cos\theta\\ &= f(r)\left(-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\cos\theta\right)\right)\\ &= f(r)\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin^2\theta\right) = 2f(r)\cos\theta = l(l+1)\psi(r,\theta)\\ &\to\ l=1\ .\end{aligned}$$

Wir benutzen $\hat{L}_z$, um die magnetische Quantenzahl m zu finden:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\psi(r,\theta) &= -i\frac{\partial}{\partial\phi}\left[f(r)\cos\theta\right] = 0 = m\psi(r,\theta)\\ &\to\ m=0\ .\end{aligned}$$

ii) Wir benutzen den Leiteroperator $\hat{L}_+$. Es ist $l=$ und $m=0$, also

$$\begin{aligned}\hat{L}_+\psi_m &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\psi_{m+1} = \sqrt{2}\psi_{m+1}\\ \hat{L}_+ &= \hat{L}_x+i\hat{L}_y = i(\sin\phi - i\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}+i(\cos\phi+i\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\\ \hat{L}_+\psi_{m=0} &= e^{i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}f(r)\cos\theta = -e^{i\phi}f(r)\sin\theta\ .\end{aligned}$$

Wir erhalten so

$$\psi_{m+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} f(r) \sin\theta e^{i\phi} = -\frac{1}{81\sqrt{\pi}} Z^{3/2}(6 - Zr) Zr e^{-Zr/3} \sin\theta e^{i\phi} \; .$$

iii) Der wahrscheinlichste Wert von r tritt auf, wenn $(r\psi)^2$ maximal wird. Für $Z = 1$ erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) = 0 = \frac{\partial}{\partial r}\left((6 - r) r^2 e^{-r/3}\right) = e^{-r/3}\left(\frac{r^3}{3} - 5r^2 + 12r\right) \; .$$

Es ergibt sich die quadratische Gleichung

$$r^2 - 15r + 36 = 0 \; .$$

Die Lösungen sind $r = 12$ und $r = 3$. $|r\psi|$ wird maximal für $r = 12$. Der wahrscheinlichste Wert ist also $12a_0$.

b) i) Zur Normierung muss das Integral

$$\iiint |\psi|^2 dV = \iiint \psi^* \psi dV = \iiint \psi^* \psi r^2 d\Omega dr = 1$$

berechnet werden. Da $\psi(\vec{r}) = \psi(r)$ bleibt vom Normierungsintegral

$$\iiint \psi^* \psi r^2 d\Omega dr = 4\pi \int_0^\infty \psi(r)^2 r^2 dr$$

übrig und mit

$$\psi = C e^{-r/a} \;\rightarrow\; \psi^* \psi = C^2 e^{-2r/a}$$

ist

$$4\pi C^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = 1$$

auszuwerten. Mit der Substitution $x = \frac{2r}{a} \;\rightarrow\; dx = \frac{2}{a} dr \;\rightarrow\; dr = \frac{a}{2} dx$ bleibt

$$\pi C^2 \frac{a^3}{2} \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = 1 \; .$$

Dieses Integral kann mit Hilfe der *Gamma-Funktion*

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \; ; \; \Gamma(n+1) = n!$$

gelöst werden (hier $x = 3$ bzw. $n = 2$):

$$\pi C^2 \frac{a^3}{2} \Gamma(3) = \pi C^2 \frac{a^3}{2} 2! = 1 \quad \rightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \; .$$

ii) Sei R der Kernradius $R = 1.2A^{1/3}$ in Fermi ($1\ fm = 10^{-6}\ nm$). Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Kern zu finden, ist

$$P = 4\pi \int_0^R |\psi(r)|^2 r^2 dr = 4\pi C^2 \int_0^R r^2 e^{-2r/a} dr \ .$$

Da R sehr klein ist im Vergleich zu a ($R \approx 10^{-6}\ nm, a \approx 10^{-1}\ nm$), betrachten wir $|\psi|^2$ als konstant im Kern, d.h. $e^{-2r/a} \approx e^{-2R/a} \approx 1$. Dann folgt unmittelbar

$$P = \frac{4}{a^3} \int_0^R r^2 dr = \frac{4}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^3 = \frac{4}{3}\left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^3 A = 1.1 \cdot 10^{-6} \ .$$

14

a) In Kugelkoordinaten lautet der Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi} \ .$$

Der Winkelanteil $\Delta_{\theta,\phi}$ lautet explizit

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \ .$$

$\hat{l}^2$ in Kugelkoordinaten:

$$\hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \ .$$

Der Laplace-Operator lässt sich also auch wie folgt schreiben:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2\hbar^2}$$

Dementsprechend lautet der Hamilton-Operator für ein Zentralpotential

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{l}^2 + V(r) \ .\end{aligned}$$

Den Kommutator $\left[\hat{H}, \hat{l}^2\right]$ kann man somit aufspalten:

$$\left[\hat{H}, \hat{l}^2\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}, \hat{l}^2\right] + \frac{1}{2mr^2}\left[\hat{l}^2, \hat{l}^2\right] + \left[V(r), \hat{l}^2\right] = 0$$

Alle drei Kommutatoren verschwinden - Begründung siehe unten. Analog für $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$.

Wie aus den angegebenen Formeln ersichtlich ist, wirken die Drehimpulsoperatoren nur auf die Winkelkoordinaten, damit ist klar, dass der erste und dritte Kommutator verschwinden. Der Kommutator eines Operators mit sich selbst verschwindet ebenfalls, und das Quadrat des Drehimpulsoperators und der z-Komponente des Drehimpulsoperators kommutieren ebenfalls.

b) Operatoren, die miteinander vertauschen, besitzen einen gemeinsamen Satz Eigenvektoren. Folglich können wir die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung mit kugelsymmetrischem Potential schreiben als

$$\psi(\vec{r}) = cR(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \ .$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sind Eigenfunktionen zu $\hat{l}^2$ und $\hat{l}_z$.

15

a) L_x, L_y, L_z und L^2 sind hermitesche Operatoren, genauso ihre Matrixdarstellungen. Für alle Elemente der Matrizen gilt $a_{ij} = a_{ji}^*$. Für ein System mit Drehimpuls $l = 1$ sind die Eigenvektoren zu L_z:

$$\begin{aligned} |1\rangle \quad &; \quad l = 1, m = 1 \\ |0\rangle \quad &; \quad l = 1, m = 0 \\ |-1\rangle \quad &; \quad l = 1, m = -1 \ . \end{aligned}$$

Um die Matrixdarstellung von L_x zu finden, berechnen wir

$$\begin{aligned} L_x|1\rangle &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-)|1\rangle = \frac{1}{2}L_-|1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \\ L_x|0\rangle &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-)|0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle) \\ L_x|-1\rangle &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-)|-1\rangle = \frac{1}{2}L_+|-1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \ . \end{aligned}$$

Wir wählen die Standard-Basis:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \ .$$

Die Matrixdarstellung von L_x ist darin

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \ .$$

Für L_y gilt:

$$
\begin{aligned}
L_y|1\rangle &= \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)|1\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \\
L_y|0\rangle &= \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)|0\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}}(|-1\rangle - |1\rangle) \\
L_y|-1\rangle &= \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)|-1\rangle = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle \,.
\end{aligned}
$$

Die Matrixdarstellung von L_y ist

$$
L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \,.
$$

Für L_z gilt:

$$
\begin{aligned}
L_z|1\rangle &= \hbar|1\rangle \\
L_z|0\rangle &= 0 \\
L_z|-1\rangle &= -\hbar|-1\rangle \,.
\end{aligned}
$$

Die Matrixdarstellung von L_z ist

$$
L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \,.
$$

Für L^2 gilt:

$$
\begin{aligned}
L^2|1\rangle &= 2\hbar^2|1\rangle \\
L^2|0\rangle &= 2\hbar^2|0\rangle \\
L^2|-1\rangle &= 2\hbar^2|-1\rangle \,.
\end{aligned}
$$

Die Matrixdarstellung von L^2 ist

$$
L^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \,.
$$

b) Zuerst suchen wir die Eigenvektoren von L_x für $l = 1$ in der Basis von L_z. Wir suchen also die Eigenvektoren und Eigenwerte von

$$
L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \,.
$$

Wenn wir die Eigenwerte von L_x als $\frac{\hbar\lambda}{\sqrt{2}}$ schreiben, ist die Säkulargleichung von L_x

$$\det\begin{pmatrix}-\lambda & 1 & 0\\ 1 & -\lambda & 1\\ 0 & 1 & -\lambda\end{pmatrix} = -\lambda(\lambda^2-1)+\lambda = 2\lambda-\lambda^3 = 0\ .$$

Die Lösungen sind $\lambda = 0, \pm\sqrt{2}$, d.h. die Eigenwerte von L_x sind $\pm\hbar$ oder 0. Der zu dem Eigenwert $\hbar$ gehörende Eigenvektor ist

$$|1\rangle_x = \begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = a|1\rangle + b|0\rangle + c|-1\rangle$$

mit

$$|a|^2+|b|^2+|c|^2 = 1\ .$$

Folgendes Gleichungssystem ist also zu lösen:

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}\ ,$$

d.h.

$$\begin{aligned} b &= \sqrt{2}a\\ a+c &= \sqrt{2}(a+b)\\ b &= \sqrt{2}c\ . \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir $b = \sqrt{2}a = \sqrt{2}c$ und aus der Normierungsbedingung schließlich $a^2+2a^2+a^2 = 1 \ \rightarrow\ a = \frac{1}{2}$:

$$|1\rangle_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\Big(|1\rangle + \sqrt{2}|0\rangle + |-1\rangle\Big)\ .$$

Auf gleiche Weise erhalten wir für die zwei anderen Eigenvektoren:

$$|0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |-1\rangle\right)$$

und

$$|-1\rangle_x = \frac{1}{2}\Big(|1\rangle - \sqrt{2}|0\rangle + |-1\rangle\Big)\ .$$

Wir schreiben den Systemzustand als

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}\begin{pmatrix}1\\ 2\\ 3\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{14}}\left(|1\rangle + 2|0\rangle + 3|-1\rangle\right)\ .$$

In der Basis der Eigenvektoren von L_x ist es

$$|\alpha\rangle_x =_x \langle 1|\alpha\rangle |1\rangle_x +_x \langle 0|\alpha\rangle |0\rangle_x +_x \langle -1|\alpha\rangle |-1\rangle_x \ .$$

Berechnung der Terme

$$\begin{aligned}
{}_x\langle 1|\alpha\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{14}}(1+2\sqrt{2}+3) = \frac{2+\sqrt{2}}{\sqrt{14}} \\
{}_x\langle 0|\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{28}}(1-3) = -\frac{1}{\sqrt{7}} \\
{}_x\langle -1|\alpha\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{14}}(1-2\sqrt{2}+3) = \frac{2-\sqrt{2}}{\sqrt{14}} \ .
\end{aligned}$$

Ergebnis:

$$|\alpha\rangle_x = \frac{2+\sqrt{2}}{\sqrt{14}}|1\rangle_x - \frac{1}{\sqrt{7}}|0\rangle_x + \frac{2-\sqrt{2}}{\sqrt{14}}|-1\rangle_x \ .$$

Daraus lassen sich nun die gesuchten Wahrscheinlichkeiten berechnen:

$$\begin{aligned}
0 &: \ |{}_x\langle 0|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{7} \\
-\hbar &: \ |{}_x\langle -1|\alpha\rangle|^2 = \frac{6-4\sqrt{2}}{14} \\
+\hbar &: \ |{}_x\langle 1|\alpha\rangle|^2 = \frac{6+4\sqrt{2}}{14} \ .
\end{aligned}$$