8. Übung zur Quantenmechanik

Besprechung der Präsenzaufgaben: **Fr., 5.6.2015**
Abgabe der schriftlichen Aufgaben: **Di., 9.6.2015**

P 28 Potentialtopf mit Störung (+ 5 Punkte)

Wir wollen die eindimensionale Bewegung eines Teilchens der Masse m im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \epsilon \cosh\left(\frac{\pi}{2a}x\right) & \text{für } |x| < a \\ \infty & \text{für } a \leq |x| \end{cases} \tag{1}$$

betrachten, wobei $a \in \mathbb{R}_+$ und $\epsilon \ll 1$. Das Potential $\epsilon \cosh[\pi x/(2a)]$ soll als Störung behandelt werden. Überzeugen Sie sich, dass die Eigenzustände des ungestörten Problems, d. h. des unendlich tiefen Potentialtopfs, die Wellenfunktionen

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{\pi}{2a}(n+1)x\right] & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left[\frac{\pi}{2a}(n+1)x\right] & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{2}$$

mit $n \in \mathbb{N}$ haben, und berechnen Sie das Energiespektrum. Berechnen Sie die Energieverschiebung des Grundzustands in 1. Ordnung Störungstheorie. Bestimmen Sie die Zustände, die zum Grundzustand in 1. Ordnung beimischen.
Hinweis:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cosh(x)\cos^2(x)\,dx = \frac{4}{5}\sinh\left(\frac{\pi}{2}\right) \tag{3}$$

S 29 Kohärenter Zustand im harmonischen Oszillator II (7 + 4 Punkte)

Wir betrachten noch einmal den kohärenten Zustand im eindimensionalen harmonischen Oszillator (s. Aufg. 22) und verwenden die bekannten Operatoren $\mathbf{H}$, $\mathbf{A}$ etc. Für $c \in \mathbb{C}$ sei der kohärente Zustand wieder gegeben durch

$$|\phi_c\rangle = e^{-|c|^2/2} \exp\left(c\mathbf{A}^\dagger\right) |\psi_0\rangle = e^{-|c|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle \ . \tag{4}$$

Nach Aufg. 22(c) gilt $\mathbf{A}\,|\phi_c\rangle = c\,|\phi_c\rangle$.

(a) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \mathbf{H} \rangle_c$ des Hamiltonoperators in diesem Zustand. Welche Werte kann dieser Erwartungswert für allgemeines $c \in \mathbb{C}$ annehmen?

(b) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \mathbf{Q} \rangle_c$ und $\langle \mathbf{P} \rangle_c$ des Orts- und des Impulsoperators im Zustand $|\phi_c\rangle$.

(c) (optional) (+ 2 Punkte)

Bestimmen Sie die Schwankungsquadrate der Operatoren $\mathbf{Q}$, $\mathbf{P}$ und $\mathbf{H}$ sowie das Schwankungsprodukt $(\Delta\mathbf{Q})_c(\Delta\mathbf{P})_c$ im Zustand $|\phi_c\rangle$.

(d) (optional) (+ 1 Punkt)

Zeigen Sie, dass für beliebige $c, c' \in \mathbb{C}$ gilt $\langle\phi_c|\phi_{c'}\rangle \neq 0$ falls $c \neq c'$. Warum steht dies nicht im Widerspruch zum Resultat von Aufg. 22(c)?

(e) Wir wollen annehmen, dass der harmonische Oszillator zur Zeit $t = 0$ in einem kohärenten Zustand ist, d. h. $|\psi(t = 0)\rangle = |\phi_{c0}\rangle$. Zeigen Sie, dass der Zustand dann zur Zeit t die Form

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \left|\phi_{c(t)}\right\rangle \qquad \text{mit} \qquad c(t) = c_0 e^{-i\omega t} \tag{5}$$

hat. Folgern Sie (z. B. mit Hilfe der Resultate aus (a) und (b)), dass für diesen Zustand $\langle\mathbf{H}\rangle$ zeitunabhängig ist und dass $\langle\mathbf{Q}\rangle$(t) der klassischen Bewegung im harmonischen Oszillator entspricht.

(f) (optional) (+ 1 Punkt)

Zeigen Sie, dass das so beschriebene Wellenpaket zu allen Zeiten ein minimales Schwankungsprodukt besitzt.

Hinweis: Es ist günstig, die Operatoren **Q**, **P** und **H** durch Auf- und Absteigeoperatoren auszudrücken.

S 30 Ritzsches Variationsverfahren (6 + 3 Punkte)

Wir wollen das Ritzsche Variationsverfahren herleiten und an einem einfachen Beispiel erproben. Dazu wollen wir ein quantenmechanisches Problem mit dem Hamiltonoperator **H** betrachten. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass **H** ein diskretes Spektrum besitzt,

$$\mathbf{H}\,|\phi_n\rangle = E_n\,|\phi_n\rangle \qquad\qquad (n \in \mathbb{N})\,, \tag{6}$$

wobei die $|\phi_n\rangle$ orthonormierte Eigenzustände seien. E_0 sei die Energie des Grundzustands, die wir abschätzen wollen.

(a) Sei $|\psi\rangle$ ein beliebiger (nicht notwendig normierter) Zustand im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Zeigen Sie

$$E\,[\psi] = \frac{\langle\psi\,|\mathbf{H}\psi\,\rangle}{\langle\psi\,|\psi\,\rangle} \geq E_0\,. \tag{7}$$

Wann ist die Gleichheit erfüllt?
Hinweis: Betrachten Sie $\langle\psi\,|\mathbf{H}\psi\,\rangle$ und entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in das vollständige System $\{|\phi_n\rangle\}$ von Eigenzuständen.

Um ein Gefühl für die Qualität des Verfahrens zu bekommen, wollen wir es nun zunächst auf ein Problem anwenden, dessen exakte Lösung uns bekannt ist. In der Praxis wird man es natürlich gerade dort anwenden, wo dies nicht der Fall ist, z. B. beim Heliumatom.

(b) Wir betrachten das Kastenpotential ($a \in \mathbb{R}_+$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < a \\ \infty & \text{für } a \leq |x|\,. \end{cases} \tag{8}$$

Geben Sie die exakte Grundzustandsenergie sowie die zugehörige Wellenfunktion an. Berechnen Sie $E\,[\psi]$ für die Testfunktion $\psi(x) = a^2 - x^2$ und zeigen Sie, dass dieser einfache Ansatz ein Ergebnis liefert, das nur um 1.3% vom exakten Wert abweicht. Welche wichtigen Eigenschaften hat diese Testfunktion mit der exakten Wellenfunktion gemeinsam?

(c) (optional) (+ 3 Punkte)

Um die Abschätzung aus (b) noch zu optimieren, betrachten wir jetzt eine Schar von Funktionen mit einem reellen Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\psi(x) = |a|^\lambda - |x|^\lambda \,. \tag{9}$$

Finden Sie eine optimale Abschätzung, indem Sie $E[\psi]$ durch Variation von λ minimieren. Wie stark weicht dieses Minumum vom exakten Wert ab?

S 31 Anharmonischer Oszillator (7 + 3 Punkte)

Der eindimensionale anharmonische Oszillator ist gegeben durch den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + W(x)\,, \tag{10}$$

worin $W(x)$ ein Polynom in x ist.

(a) Berechnen Sie für den speziellen Fall ($C \in \mathbb{R}$, $D \in \mathbb{R}_+$)

$$W(x) = Cx^3 + Dx^4 \tag{11}$$

die Energieverschiebung der Niveaus des harmonischen Oszillators in Störungstheorie 1. Ordnung. Bleibt das Spektrum unter Einfluss der Störung äquidistant?

Hinweis: Drücken Sie die Störung mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren $\mathbf{A}^\dagger$ und $\mathbf{A}$ aus. Beachten Sie, dass der Erwartungswert eines Produkts dieser Operatoren in einem Energieeigenzustand des ungestörten harmonischen Oszillators nur dann nicht verschwindet, wenn in dem Produkt gleich viele Auf- und Absteigeoperatoren auftreten.

(b) (optional) (+ 3 Punkte)

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{12}$$

mit der kleinen Störung ($\epsilon \ll 1$)

$$\mathbf{W} = W(x) = \frac{1}{2}\epsilon m\omega^2 x^2\,. \tag{13}$$

Geben Sie zunächst die exakte Lösung an und entwickeln Sie die Energieeigenwerte in eine Potenzreihe in ϵ. Berechnen Sie dann die Energieverschiebung in Störungstheorie bis zur 2. Ordnung und vergleichen diese mit dem ersten Ergebnis.

Hinweis: Beachten Sie, dass in 2. Ordnung nur zwei andere Niveaus zur Energieverschiebung des n-ten Niveaus beitragen (welche?).

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qm15.html