Institut für Theoretische Physik
C. Ewerz, T. K. Herbst

Universität Heidelberg
Sommersemester 2015

9. Übung zur Quantenmechanik

Besprechung der Präsenzaufgaben: **Fr., 12.6.2015**
Abgabe der schriftlichen Aufgaben: **Di., 16.6.2015**

P 32 Drehimpulsalgebra (+3 Punkte)

Wir wollen allgemeine Drehimpulsoperatoren betrachten, d. h. Operatoren $\vec{\mathbf{J}}$, für deren Komponenten gilt $[\mathbf{J}_k\,,\,\mathbf{J}_l] = i\hbar\epsilon_{klm}\mathbf{J}_m$. Beispiele hierfür sind der Operator des Bahndrehimpulses $\vec{\mathbf{L}}$ mit $\mathbf{L}_k = \epsilon_{klm}\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m$, oder der Spinoperator $\vec{\mathbf{S}}$. Wir definieren $\mathbf{J}_\pm = \mathbf{J}_1 \pm i\mathbf{J}_2$.

(a) Zeigen Sie $[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_k] = 0$. Folgern Sie, dass $[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_\pm] = 0$.

Hinweis: Beachten Sie einen geeigneten früheren Hinweis.

(b) Zeigen Sie, dass $[\mathbf{J}_3\,,\,\mathbf{J}_\pm] = \pm\hbar\mathbf{J}_\pm$ und $[\mathbf{J}_+\,,\,\mathbf{J}_-] = 2\hbar\mathbf{J}_3$.

S 33 Laplace-Operator in sphärischen Polarkoordinaten (optional, + 12 Punkte)

Zeigen Sie, dass der Laplace-Operator in sphärischen Polarkoordinaten (r, φ, θ) mit $\boldsymbol{x} = (r\cos\varphi\sin\theta\,,\ r\sin\varphi\sin\theta\,,\ r\cos\theta)$ gegeben ist durch

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_\Omega \;=\; \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta_\Omega\,, \tag{1}$$

worin

$$\Delta_\Omega = \frac{1}{\sin^2\theta}\left[\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\,. \tag{2}$$

Hinweis: Eine (wenn auch nicht die eleganteste) Möglichkeit ist die Benutzung der Kettenregel

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial r}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\theta}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial\theta}\,. \tag{3}$$

S 34 Kohärenter Zustand im harmonischen Oszillator III (8 Punkte)

Wir wollen nochmals kohärente Zustände im harmonischen Oszillator betrachten (s. Aufg. 22 und 29) und zeigen, dass diese explizit durch Gaußsche Wellenpakete gegeben sind. Dazu verwenden wir wiederum die Leiteroperatoren $\mathbf{A}, \mathbf{A}^\dagger$ und definieren den Operator

$$\mathbf{D}(c_0) = e^{c_0\mathbf{A}^\dagger - c_0^*\mathbf{A}} \quad \text{mit } c_0 \in \mathbb{C}\,. \tag{4}$$

(a) Zeigen Sie, dass $\mathbf{D}(c_0)$ unitär ist und als $\mathbf{D}(c_0) = e^{-\frac{1}{2}|c_0|^2}e^{c_0\mathbf{A}^\dagger}e^{-c_0^*\mathbf{A}}$ geschrieben werden kann.

Hinweis: Der Kommutator $[c_0\mathbf{A}^\dagger, -c_0^*\mathbf{A}]$ sowie das Ergebnis von Aufg. 9(c) können hierbei hilfreich sein.

(b) Zeigen Sie nun, dass man mit dieser Darstellung für $\mathbf{D}(c_0)$ den kohärenten Zustand $|\phi_{c_0}\rangle = e^{-|c_0|^2/2} \exp\left(c_0 \mathbf{A}^\dagger\right) |\psi_0\rangle$, mit dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ des harmonischen Oszillators, schreiben kann als

$$|\phi_{c_0}\rangle = \mathbf{D}(c_0)\,|\psi_0\rangle\ . \tag{5}$$

(c) Nun wollen wir die Ortsraumdarstellung $\phi_{c_0}(x)$ des kohärenten Zustands bestimmen. Drücken Sie dazu $\mathbf{D}(c_0)$ durch Orts- und Impulsoperator aus und verwenden Sie, dass $\mathbf{T}_b = e^{-\frac{i}{\hbar} b\mathbf{P}}$ ein Translationsoperator ist, also (vgl. Aufg. 14) $\quad \mathbf{T}_b\, \psi(x) = \psi(x-b)\,.$

Verwenden Sie die in Aufg. 29(b) berechneten Erwartungswerte, $\langle \mathbf{Q} \rangle_{c_0} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, \mathrm{Re}(c_0)\,,$ $\langle \mathbf{P} \rangle_{c_0} = \sqrt{2m\omega\hbar}\, \mathrm{Im}(c_0)\,,$ um das Ergebnis in die Form

$$\phi_{c_0}(x) = e^{i\theta_{c_0}}\, e^{i\langle \mathbf{P}\rangle_{c_0} x/\hbar}\, \psi_0(x - \langle \mathbf{Q}\rangle_{c_0}) \tag{6}$$

zu bringen, wobei $i\theta_{c_0} = \frac{{c_0^*}^2 - c_0^2}{4}$ und $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ die Grundzustandswellenfunktion ist.

(d) Mithilfe der in Aufg. 29(e) berechneten Zeitentwicklung des kohärenten Zustands,

$$|\phi_c(t)\rangle = e^{-i\omega t/2}\, \left|\phi_{c(t)}\right\rangle \quad \text{mit } c(t) = c_0 e^{-i\omega t}\,,$$

sowie den dort bestimmten zeitabhängigen Erwartungswerten $\langle \mathbf{Q} \rangle_c(t)$ und $\langle \mathbf{P} \rangle_c(t)$ können Sie direkt die Zeitentwicklung des kohärenten Zustands erhalten als

$$\phi_c(x,t) = e^{i\theta_c}\, e^{-i\omega t/2}\, e^{i\langle \mathbf{P}\rangle_c(t)\, x/\hbar}\, \psi_0(x - \langle \mathbf{Q}\rangle_c(t))\,. \tag{7}$$

Berechnen Sie das Betragsquadrat $|\phi_c(x,t)|^2$ um zu zeigen, dass die Form des Wellenpakets zeitlich konstant ist.

S 35 WKB-Näherung (12 + 5 Punkte)

Wir betrachten die eindimensionale Schrödingergleichung im Ortsraum mit dem Potential $V(x)$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\psi(x,t) = 0\,, \tag{8}$$

und schreiben ψ in der Form $\psi(x,t) = e^{iS(x,t)/\hbar}$.

(a) Zeigen Sie, dass $S(x,t)$ die klassische Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{9}$$

erfüllt, falls

$$\left|\frac{\hbar}{p(x)}\frac{d}{dx}V(x)\right| \ll \left|\frac{p^2(x)}{m}\right|\,. \tag{10}$$

Dabei sei

$$p(x) = \frac{\partial S}{\partial x} = \sqrt{2m(E-V)}\,. \tag{11}$$

Wir werden sehen, dass $p(x)$ als ortsabhängiger Impuls interpretiert werden kann, den ein Teilchen der Energie E nach den Regeln der klassischen Mechanik am Ort x hätte.

Wie gut ist die Bedingung (10) erfüllt für

(i) ein Elektron: $m = m_e\,,\ V(x) = \frac{e^2}{x}\,,\ x = 1\AA\,,\ E = 20$ eV ?

(ii) ^{16}O - ^{16}O Streuung: $m_{\rm O} = 16$ GeV/c^2 , $V(x) = \frac{Z^2 e^2}{x}\,,\ x = 5$ fm , $E = 6$ A·MeV ?

(iii) einen Golfball: $m = 45$ g , $V(x) = mgx\,,\ x = 10$ m , $v = 50$ km/h ?

Zeigen Sie, dass Gl. (10) äquivalent ist zu

$$\left| \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1\,, \tag{12}$$

worin $\lambda(x) = \frac{h}{p(x)}$ die de Broglie-Wellenlänge ist. Was ist die physikalische Bedeutung von Gl. (12) ?

In niedrigster Ordnung in $\hbar$ ist die Schrödingergleichung also durch die Hamilton-Jacobi-Gleichung gegeben und $S(x,t)$ ist (bis auf eine additive Konstante) die klassische Wirkung. Wir wollen im Folgenden den nächsten Term in $\hbar$ betrachten, was auf die WKB- (Wentzel, Kramers, Brillouin) oder quasiklassische Näherung führt. Dazu schreiben wir (wie in der klassischen Mechanik für nicht explizit zeitabhängige Hamiltonfunktionen üblich)

$$S(x,t) = W(x) - E\,t \tag{13}$$

und entwickeln $W(x)$ in eine Potenzreihe in $\hbar$,

$$W(x) = W_0(x) + \hbar\, W_1(x) + \hbar^2\, W_2(x) + \ldots\,. \tag{14}$$

(b) Leiten Sie aus der Schrödingergleichung eine Differentialgleichung für $W(x)$ her. Zeigen Sie, dass diese in 0. Ordnung in $\hbar$ (d. h. in klassischer Näherung) gelöst wird durch

$$W_0(x) = \pm \int_{x_0}^{x} p(x')\, dx' \tag{15}$$

und begründen Sie damit die Interpretation von $p(x) = \frac{\partial S}{\partial x}$ in (11) als ortsabhängiger Impuls.

(c) Zeigen Sie weiter, dass die allgemeine Lösung bis zur 1. Ordnung in $\hbar$ (WKB-Näherung) gegeben ist durch

$$\psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\, \psi(x) \tag{16}$$

mit

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\, dx' \right) + A_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\, dx' \right) \right]\,. \tag{17}$$

Wir wollen nun annehmen, dass die klassische Bewegung im Potential $V(x)$ zwei Umkehrpunkte a und b hat, d. h. für $a < b \in \mathbb{R}$ ist $V(a) = V(b) = E$ und

$$V(x) \le E \qquad \text{für } a \le x \le b \tag{18}$$

und

$$E < V(x) \qquad \text{für } x < a \quad \text{oder} \quad x > b\,. \tag{19}$$

(d) Drücken Sie die WKB-Lösung (17) im klassisch verbotenen Bereich (19) durch $|p(x)|$ aus. Welche der Terme in (17) sind dann für $x < a$ bzw. $x > b$ zulässige Lösungen ?

(e) Warum ist die WKB-Lösung in der Nähe der Umkehrpunkte keine gute Näherung ?

(optional) (+ 2 Punkte)

Zeigen Sie, dass z. B. am Umkehrpunkt a die WKB-Näherung erst ab einem Abstand $|x-a| \gg \frac{\lambda}{4\pi}$ gültig ist.

Hinweis: In der Umgebung von a kann $V(x)$ linear approximiert werden.

Wegen der Resultate in (e) kann man an den Umkehrpunkten keine einfachen Anschlussbedingungen zwischen den Lösungen im klassisch verbotenen und klassisch erlaubten Bereich angeben. Die richtige Fortsetzung vom klassisch verbotenen in den klassisch erlaubten Bereich ist gegeben durch die folgende Ersetzungsregel (Kramers 1926):

linker Umkehrpunkt:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p(x')|\,dx'\right) \longrightarrow \frac{2}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')\,dx' - \frac{\pi}{4}\right), \tag{20}$$

$E < V$ klassisch verboten $\qquad$ $E > V$ klassisch erlaubt

rechter Umkehrpunkt:

$$\frac{2}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x')\,dx' - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p(x')|\,dx'\right) \tag{21}$$

$E > V$ klassisch erlaubt $\qquad$ $E < V$ klassisch verboten

(f) Leiten Sie aus der Übereinstimmung der beiden Lösungen, die sich durch die Ersetzungsregel im klassisch erlaubten Bereich ergeben, die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p(x)\,dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\, 2\int_a^b p(x)\,dx = n + \frac{1}{2} \tag{22}$$

her. (Das erste Integral hierin ist über eine gesamte klassische Periode zu verstehen.) Zeigen Sie, dass $n \in \mathbb{N}$ sein muss, also insbesondere dass $n \geq 0$. Warum erwartet man, dass die WKB-Näherung für große n gut ist ?

Im Falle des harmonischen Oszillators liefert die Bohr-Sommerfeld-Bedingung sogar für alle n das exakte Resultat.

(g) (optional) (+ 3 Punkte)

Bestimmen Sie die klassischen Umkehrpunkte für ein Teilchen der Energie E im Potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Berechnen Sie dann das Integral $\oint p(x)\,dx$ für eine Schwingungsperiode und zeigen Sie, dass die Bedingung (22) auf das exakte Spektrum des quantenmechanischen harmonischen Oszillators führt.

Hinweis: Ein hierbei auftretendes Integral kann nach Reskalierung der Integrationsvariable geometrisch interpretiert und dann einfach gelöst werden.