Kai Hebeler, Jan Hoppe, Lars Zurek
Achim Schwenk
Institut für Kernphysik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 7

Abgabe der mit (∗) markierten Aufgaben: Dienstag, 30. November, Anfang der Vorlesung

23. November 2021

Aufgabe P6: Zwei-Minuten-Fragen

1. Zeigen Sie, dass Wellenfunktionen der faktorisierten Form $\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ Lösungen der Schrödingergleichung in drei Dimensionen für einen Hamiltonoperator der Form $H(\mathbf{r}) = H_1(x) + H_2(y) + H_3(z)$ sind. Was folgt daraus für die Energieeigenwerte des dreidimensionalen Systems?

2. Was ist der Unterschied zwischen einem quantenmechanischen Zustand und einer Wellenfunktion? Wie kann man die Wellenfunktion im Orts- oder Impulsraum aus dem Zustand erhalten?

3. Welche der folgenden Funktionen sind Eigenfunktionen des eindimensionalen Impulsoperators mit Eigenwert p_0?

   a) $\tilde{\psi}_{p_0}(p) = \delta(p - p_0)$
   b) $\psi_{p_0}(x) = \exp(-\frac{i}{\hbar}p_0 x)$
   c) $\psi_{p_0}(x) = \exp(+\frac{i}{\hbar}p_0 x)$

4. Schreiben Sie die zeitabhängige und die zeitunabhängige Schrödingergleichung in Bra-Ket-Notation.

5. Wie ist die Darstellung eines allgemeinen Operators in Bra-Ket-Notation? Was ergibt sich für einen hermiteschen Operator, der in seiner Eigenbasis dargestellt wird? Was erhält man im Spezialfall des $\widehat{\mathbb{1}}$-Operators?

6. Welche Eigenschaften erfüllen Operatoren, die messbare Größen beschreiben?

Aufgabe H16: Spuren von Operatoren (3 Punkte) (∗)

Die Spur eines Operators wird durch

$$\mathrm{Tr}\big(\widehat{A}\big) = \sum_i \langle n_i|\widehat{A}|n_i\rangle \ , \tag{1}$$

definiert, wobei $\{|n_i\rangle\}$ eine vollständige Orthonormalbasis des Hilbertraums $\mathcal{H}$ mit endlicher Dimension sei.

1. Zeigen Sie, dass $\mathrm{Tr}\big(|\phi\rangle\langle\psi|\big) = \langle\psi|\phi\rangle$, wobei $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ Zustände in $\mathcal{H}$ sind.

2. Zeigen Sie für Operatoren $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ und $\widehat{C}$, dass

$$\mathrm{Tr}\big(\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C}\big) = \mathrm{Tr}\big(\widehat{B}\widehat{C}\widehat{A}\big) = \mathrm{Tr}\big(\widehat{C}\widehat{A}\widehat{B}\big)\,. \tag{2}$$

3. Wir betrachten nun eine weitere Orthonormalbasis $\{|m_i\rangle\}$, die durch eine unitäre Transformation (d.h. durch die Wirkung eines Operators $\widehat{U}$ mit $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{U}\widehat{U}^\dagger = 1$) aus $\{|n_i\rangle\}$ hervorgeht: $|m_i\rangle = \widehat{U}\,|n_i\rangle$. Zeigen Sie, dass die Spur unter unitären Transformationen invariant ist, d.h. dass

$$\mathrm{Tr}\big(\widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U}\big) = \mathrm{Tr}\big(\widehat{A}\big)\,. \tag{3}$$

Aufgabe H17: Elektron in einem zwei-atomigen Molekül (7 Punkte) ($*$)

Betrachten Sie ein Elektron in einem Molekül bestehend aus zwei Atomen, A und B. $|A\rangle$ und $|B\rangle$ sind zwei orthonormale Zustände, bei denen das Elektron an Atom A bzw. B lokalisiert ist. Der Hamiltonoperator besteht aus einem Teil, der die Bindung des Elektrons an das jeweilige Molekül beschreibt,

$$\widehat{H_0} = E_A|A\rangle\langle A| + E_B|B\rangle\langle B| \tag{4}$$

mit den Energien $E_A \geq E_B$, und einem Wechselwirkungsterm

$$\widehat{W} = \gamma(|A\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A|) \tag{5}$$

mit γ reell. Dabei beschreibt $\widehat{W}$ den Vorgang, dass das Elektron von A nach B (bzw. umgekehrt) springt.

1. Bestimmen Sie die Matrixdarstellung von $\widehat{H} = \widehat{H_0} + \widehat{W}$ in der Basis $\{|A\rangle, |B\rangle\}$ und berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenzustände. Wie groß ist der Energieunterschied der beiden Eigenzustände als Funktion von γ?

2. Nähern Sie die Eigenzustände und deren Energien im Fall $|\gamma| \ll E_A - E_B$. Skizzieren Sie das Spektrum als Funktion von γ (von negativen zu positiven Werten). Das Verhalten bei $\gamma = 0$ wird manchmal auch als “avoided level crossing” bezeichnet.

Aufgabe H18: Schematisches Modell

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\widehat{H} = \epsilon \sum_{i=1}^{N} |\phi_i\rangle\,\langle\phi_i| + \lambda \sum_{i,j=1}^{N} |\phi_i\rangle\,\langle\phi_j|\ , \tag{6}$$

wobei die Vektoren $\{|\phi_i\rangle\}$ eine Orthonormalbasis bilden.

1. Schreiben Sie den Hamiltonoperator als Matrix und bestimmen Sie die Eigenwerte und normierte Eigenvektoren. Sind die Eigenvektoren orthogonal?

   Hinweis: Betrachten Sie zunächst die Spezialfälle $N = 2, 3$ und verallgemeinern Sie die Resultate auf allgemeine N.

2. Eine allgemeinere Version dieses schematischen Modells wurde von Brown und Bolsterli 1959 benutzt, um die Dipolriesenresonanz von Atomkernen zu erklären. Dabei entsprechen die ϵ der Energie der Teilchen-Loch-Anregung im Atomkern, d.h. der Energiedifferenz zwischen Orbitalen im Kern, und λ die Wechselwirkung mit dem Dipolfeld bei der Anregung. Brown und Bolsterli konnten mit dem schematischen Modell zeigen, dass ein Zustand kollektiv ist und eine viel höhere Anregungsenergie hat, wie mit der Dipolriesenresonanz beobachtet wurde. Welcher Zustand enspricht in dem schematischen Modell dem kollektiven Zustand und warum nennen wir diesen kollektiv?