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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 9

Abgabe der mit (∗) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 14. Dezember, Anfang der Vorlesung

7. Dezember 2021

Aufgabe P8: Zwei-Minuten-Fragen

1. Schreiben Sie den $\mathbb{1}$-Operator in Bra-Ket-Notation als Integral/Summe über Eigenzustände des Ortsoperators, des Impulsoperators, und des Hamiltonoperators. Nehmen Sie im letzten Fall ein diskretes Spektrum an.

2. Was ist die spektrale Darstellung eines hermiteschen Operators in Bra-Ket-Notation? Warum heißt diese spektrale Darstellung?

3. Berechnen Sie das Matrixelement $\langle x | \widehat{P} | p \rangle$.

4. Der harmonische Oszillator ist in der Quantenmechanik häufig ein sinnvolles Werkzeug zur Beschreibung von Teilchen in der Nähe von Potentialminima. Warum?

5. Der Operator $\widehat{N} = \widehat{a}^\dagger \widehat{a}$ wird auch Besetzungszahloperator genannt. Warum? Zeigen Sie für den harmonischen Oszillator, dass $[\widehat{N}, \widehat{a}] = -\widehat{a}$ und dass $[\widehat{N}, \widehat{a}^\dagger] = +\widehat{a}^\dagger$.

6. Zeigen Sie am Spektrum des harmonischen Oszillators auf, inwiefern der Grenzfall $\hbar \to 0$ der klassischen Physik entspricht.

Aufgabe H25: Bras und Kets (3 Punkte) (∗)

Zeigen Sie die folgenden Identitäten:

$$\langle x|\widehat{P}|x'\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')\,, \tag{1}$$

$$\langle p|\widehat{Q}|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \widetilde{\psi}_\alpha(p)\,, \tag{2}$$

$$\langle \beta|\widehat{Q}|\alpha\rangle = i \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\, \widetilde{\psi}^*_\beta(p) \frac{\partial}{\partial p} \widetilde{\psi}_\alpha(p)\,, \tag{3}$$

wobei $\widetilde{\psi}_\alpha(p) = \langle p|\alpha\rangle$ die Wellenfunktion im Impulsraum ist.

LÖSUNG: Um Gl. (1) zu zeigen, fügen wir eine Eins in Impulseigenzuständen ein: $\mathbb{1} = \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p|$. Damit ist

$$\begin{aligned}
\langle x| \widehat{P} |x'\rangle &= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \langle x| \widehat{P} |p\rangle \langle p|x'\rangle && (4)\\
&= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} p \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle && (5)\\
&= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} p\, e^{ip(x-x')/\hbar} && (6)\\
&= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} && (7)\\
&= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x')\,. && (8)
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde die Integraldarstellung der Delta-Distribution ausgenutzt.

Bevor wir Relation (2) zeigen, betrachten wir zunächst in Analogie zu oben

$$\begin{aligned}
\langle p|\widehat{Q}|p'\rangle &= \int \mathrm{d}x\, \langle p|\widehat{Q}|x\rangle \langle x|p'\rangle && (9)\\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int \mathrm{d}x\, e^{ix(p'-p)/\hbar} && (10)\\
&= 2\pi i\hbar^2 \frac{\partial}{\partial p} \delta(p'-p)\,. && (11)
\end{aligned}$$

Wir zeigen damit (2),

$$\begin{aligned}
\langle p|\widehat{Q}|\alpha\rangle &= \int \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar} \langle p|\widehat{Q}|p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle && (12)\\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dp'\, \delta(p'-p) \langle p|\alpha\rangle && (13)\\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \widetilde{\psi}_\alpha(p)\,. && (14)
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir sofort Gl. (3):

$$\begin{aligned}
\langle \beta|\widehat{Q}|\alpha\rangle &= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \langle \beta|p\rangle \langle p|\widehat{Q}|\alpha\rangle && (15)\\
&= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi} \widetilde{\psi}^*_\beta(p) i \frac{\partial}{\partial p} \widetilde{\psi}_\alpha(p)\,. && (16)
\end{aligned}$$

Aufgabe H26: Double-Well-Potential (7 Punkte) (∗)
Ein Teilchen der Masse m bewege sich im Double-Well-Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{mL^6}\,(x^2 - a^2)^2\,. \tag{17}$$

1. Skizzieren Sie das Potential. Nehmen Sie an, dass $a \gg L$, und dass das Teilchen im rechten Potentialminimum ist. Zeigen Sie, dass die Energie im Grundzustand näherungsweise gegeben ist durch $E \approx \hbar\omega/2$ mit $\omega = \sqrt{8}\frac{\hbar}{mL^2}\frac{a}{L}$.

LÖSUNG: Wir bestimmen das Minimum des Potentials

$$\frac{dV(x)}{dx} \stackrel{!}{=} 0 \;\Leftrightarrow\; x = 0, \pm a \tag{18}$$

und entwickeln um a:

$$V(x) = V(x)|_{x=a} + V'(x)|_{x=a}(x-a) + \frac{1}{2}V''(x)|_{x=a}(x-a)^2 + \mathcal{O}(x^3)\,. \tag{19}$$

Man erhält, dass an der Stelle $x = a$ die ersten beiden Terme verschwinden und es verbleibt als erster nicht-trivialer Term

$$V''(x)|_{x=a} = \frac{4\hbar^2}{mL^6}\left(\left(x^2 - a^2\right) + 2x^2\right)|_{x=a} = \frac{8\hbar^2 a^2}{mL^6}\,. \tag{20}$$

Somit lautet also die Entwicklung des Potentials $V(x)$ um $x = a$

$$V(x) \approx \frac{1}{2}\frac{8\hbar^2 a^2}{mL^6}(x-a)^2\,, \tag{21}$$

was (im Rahmen unserer Näherung) formal identisch zum harmonischen Oszillator-Potential $V_{\text{HO}} \equiv \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2$ mit

$$\omega = \frac{\sqrt{8}\hbar a}{mL^3} \tag{22}$$

und der Energie im Grundzustand

$$E \approx \hbar\omega/2 \tag{23}$$

ist.

2. Geben Sie die zugehörige Wellenfunktion $\psi_R(x)$ an. Zeigen Sie, dass diese Wellenfunktion kein Eigenzustand des Hamiltonoperators ist.

LÖSUNG: Zur Bestimmung der Wellenfunktion nutzen wir das aus der Vorlesung bekannte Resultat für den HO und setzen die entsprechende Frequenz ω ein:

$$\psi_R(x) = N \exp\left(-\alpha(x-a)^2\right) \tag{24}$$

mit $\alpha = m\omega/(2\hbar)$ und $N = \sqrt[4]{m\omega/(\pi\hbar)}$.

Um zu zeigen, dass die Wellenfunktion ψ_R kein Eigenzustand zu $\widehat{H}$ ist, betrachten wir die stationäre Schrödingergleichung

$$0 \stackrel{!}{=} (\widehat{H} - E)\psi_R(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{mL^6}\left(x^2 - a^2\right)^2 - E\right)\psi_R(x)\,. \tag{25}$$

Man erhält

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_R(x) = \left(-2\alpha + 4\alpha^2(x-a)^2\right)\psi_R(x)\,. \tag{26}$$

Man sieht direkt, dass Gleichung (26) nicht-verschwindende Terme proportional zu $x\,\psi_R(x)$ enthält. Offensichtlich ist das für alle anderen Terme in der Schrödingergleichung nicht der Fall. Damit ist die Schrödingergleichung als Eigenwertgleichung nicht mehr erfüllt, und ψ_R ist deshalb kein Eigenzustand zu $\widehat{H}$.

3. Sei $\psi_L(x)$ die Wellenfunktion eines Teilchens im linken Potentialminimum, $\psi_L(x) = \psi_R(-x)$. Betrachten Sie die Wellenfunktionen $\psi_\pm = N_\pm(\psi_R \pm \psi_L)$. Zeigen Sie, dass für die Normierung gilt:

$$N_\pm^{-2} = 2(1 \pm e^{-(a/l)^2}) \tag{27}$$

mit $l = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$.

Lösung: Zur Bestimmung der Normierung setzen wir

$$\psi_L(x) = N\exp\left(-\alpha(x+a)^2\right),\ \psi_R(x) = N\exp\left(-\alpha(x-a)^2\right) \tag{28}$$

an und werten diese für

$$\int \mathrm{d}x\,|\psi_\pm(x)|^2 = \int \mathrm{d}x N_\pm^2\left(\psi_R^2(x) \pm 2\psi_R(x)\psi_L(x) + \psi_L^2(x)\right) = 2N_\pm^2\left(1 \pm \int \mathrm{d}x\psi_R(x)\psi_L(x)\right) \tag{29}$$

aus. Dabei wurde verwendet, dass ψ_R und ψ_L normiert sind.

Einsetzen von Gl. (28) gibt

$$2N_\pm^2\left(1 \pm \int \mathrm{d}x N^2\exp\left(-2\alpha\left(x^2 + a^2\right)\right)\right) = 2N_\pm^2\left(1 \pm \exp\left(-2\alpha a^2\right)\right)\,. \tag{30}$$

Mit der Forderung $\int \mathrm{d}x\,|\psi_\pm(x)|^2 \stackrel{!}{=} 1$ folgt daraus nun

$$N_\pm^{-2} = 2\left(1 \pm \exp\left(-2\alpha a^2\right)\right) \tag{31}$$

was dem geforderten Ergebnis entspricht, da $2\alpha = 1/l^2$.

4. Überzeugen Sie sich, dass auch $a \gg l \equiv \sqrt{\hbar/(m\omega)}$, und berechnen Sie die Energiedifferenz

$$\Delta E = E_+ - E_- \tag{32}$$

mit

$$E_\pm = \langle\psi_\pm|\widehat{H}|\psi_\pm\rangle \tag{33}$$

zu führender Ordnung in $a/l \gg 1$.

HINWEIS: Schreiben Sie $\psi_\pm$ in Form von $\psi_{R,L}$ und verwenden Sie die Taylorentwicklung des Potentials um die Minima.
Sie sollten sehen, dass der symmetrische Zustand eine niedrigere Energie hat als der antisymmetrische, und dass die Energiedifferenz zwischen ψ_+ und ψ_- sehr klein ist.

LÖSUNG: Einsetzen von ω gibt direkt, dass $l \propto L\sqrt{L/a}$ und somit ist wegen $a \gg L$ auch $a \gg l$ erfüllt.

Wie gefordert betrachten wir nun die Energien der symmetrischen und antisymmetrischen Zustände, die sich wie folgt schreiben lassen:

$$E_\pm = \langle\psi_\pm|\,\widehat{H}\,|\psi_\pm\rangle = \frac{1}{2(1 \pm e^{-a^2/l^2})}(\langle\psi_R|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle + \langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_L\rangle \pm 2\,\langle\psi_R|\,\widehat{H}\,|\psi_L\rangle), \tag{34}$$

wobei benutzt wurde, dass die Ortsraumdarstellung der Wellenfunktion rein reell ist.

Für die Energiedifferenz erhalten wir durch Taylor-Entwickeln in e^{-a^2/l^2}:

$$\begin{aligned}\Delta E = E_+ - E_- &= \Big(\langle\psi_R|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle + \langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_L\rangle\Big)\frac{-e^{-a^2/l^2}}{1-e^{-2a^2/l^2}} + \langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle\,\frac{2}{1-e^{-2a^2/l^2}} \\ &= \Big(\langle\psi_R|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle + \langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_L\rangle\Big)\mathcal{O}(e^{-a^2/l^2}) + \langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle\Big(2 + \mathcal{O}(e^{-2a^2/l^2})\Big) \\ &\approx 2\,\langle\psi_L|\,\widehat{H}\,|\psi_R\rangle\ .\end{aligned} \tag{35}$$

Die bereits in Gleichung (19) verwendete Taylorentwicklung um $x = a$ lautet vollständig:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{(x-a)^3}{a} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{(x-a)^4}{4a^2}\ . \tag{36}$$

In Gl. (35) eingesetzt gibt dies

$$\begin{aligned}\Delta E &\approx 2\int \mathrm{d}x\,\langle\psi_L|x\rangle\,\langle x|\,\widehat{H}\,|x\rangle\,\langle x|\psi_R\rangle \\ &= 2\int \mathrm{d}x\,\psi_L(x)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{(x-a)^3}{a} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{(x-a)^4}{4a^2}\right)\psi_R(x) \\ &= 2N^2\int \mathrm{d}x\,e^{-(x^2+a^2)/l^2}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{(x-a)^3}{a} + \frac{(x-a)^4}{4a^2}\right)\right)\ ,\end{aligned} \tag{37}$$

wobei im letzten Schritt verwendet wurde, dass ψ_R die Schrödingergleichung für das rechte HO-Potential löst.

Mit $N^2 = 1/(\sqrt{\pi}l)$ (vgl. Angabe bei Gl. (24)) wird der erste Term im Integral direkt ausgerechnet und es folgt

$$\Delta E \approx 2\left(\frac{1}{2}\hbar\omega e^{-a^2/l^2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}l}\frac{1}{2}m\omega^2 e^{-a^2/l^2}\int \mathrm{d}x e^{-x^2/l^2}\left(\frac{(x-a)^3}{a} + \frac{(x-a)^4}{4a^2}\right)\right)\ . \tag{38}$$

Für $a \gg l$ ist die Gauß-Funktion im verbliebenen Integral sehr scharf im Vergleich zu den anderen Faktoren und man kann das Integral über den Faktorwert bei $x = 0$ nähern:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\pi}l}\int \mathrm{d}x e^{-x^2/l^2}\left(\frac{(x-a)^3}{a} + \frac{(x-a)^4}{4a^2}\right) &\approx \frac{1}{\sqrt{\pi}l}\int \mathrm{d}x e^{-x^2/l^2}\left(-a^2 + \frac{a^2}{4}\right) \\ &= \left(-a^2 + \frac{a^2}{4}\right) = -\frac{3a^2}{4}\ .\end{aligned} \tag{39}$$

Für die führende Ordnung in $\frac{a}{l}$ erhalten wir dann insgesamt:

$$\begin{aligned}\Delta E &\approx \omega e^{-a^2/l^2}\left(\hbar - m\omega\frac{3}{4}a^2\right)\\ &= \omega e^{-a^2/l^2}\left(\hbar - \hbar\frac{3}{4}\frac{a^2}{l^2}\right)\\ &\approx -\hbar\omega\frac{3}{4}\frac{a^2}{l^2}e^{-a^2/l^2}\,.\end{aligned} \tag{40}$$

Man sieht, dass die Energiedifferenz in der Tat sehr klein ist.

Aufgabe H27: Klassischer Grenzfall der kohärenten Zustände

In Aufgabe H22 haben Sie die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators, hier mit $\varphi(y,t)$ bezeichnet, kennengelernt. Dabei haben Sie die von der dimensionslosen Anfangsauslenkung y_0 abhängigen Entwicklungskoeffizienten aus

$$\varphi(y,0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\varphi_n(y) \tag{41}$$

zu

$$c_n(0) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{y_0}{\sqrt{2}}\right)^n e^{-y_0^2/4} \tag{42}$$

berechnet.
Betrachten Sie von nun an den Fall großer Auslenkungen.

1. Nutzen Sie die (vereinfachte) Stirling-Formel

   $$\ln(n!) \approx n\ln(n) - n \tag{43}$$

   und schreiben Sie $c_n(0)$ näherungsweise zu einer kontinuierlichen Funktion $K(n) \approx c_n(0)$ um. Berechnen Sie dann, welcher Energieeigenzustand φ_{n_0} maximal zu einem kohärenten Zuständ beiträgt.

Lösung: Aus Gl. (43) folgt nach einfachen Umformungen

$$n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n\,. \tag{44}$$

Mit $z = y_0/\sqrt{2}$ ergibt sich dann

$$K(n) \approx \left(\frac{e}{n}\right)^{n/2} z^n e^{-z^2/2}\,. \tag{45}$$

Zur Bestimmung des Extremum berechnen wir

$$0 \stackrel{!}{=} K'(n) = \frac{\ln\left(z^2\right) - \ln(n)}{2}K(n)\,. \tag{46}$$

Dies wird erfüllt für

$$n = n_0 \equiv z^2\,. \tag{47}$$

Aus dem Verhalten für kleine und für große n folgt, dass es sich dabei in der Tat um ein Maximum handelt. Somit trägt für große Auslenkungen φ_{z^2} zum zugehörigen kohärenten Zustand maximal bei.

2. Man kann die Verteilung $|K(n)|^2$ durch eine Gauß-Verteilung

$$G(n) \propto \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2(\Delta n)^2}\right) \tag{48}$$

nähern.

Zeigen Sie durch geeigneten Vergleich der Taylor-Reihe von $|K(n)|^2$,

$$|K(n)|^2 = |K(n_0)|^2 + \left[\frac{\partial}{\partial n_0}|K(n_0)|^2\right](n-n_0) + \frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial n_0^2}|K(n_0)|^2\right](n-n_0)^2 + \dots\,, \tag{49}$$

mit der Taylor-Reihe der Gauß-Verteilung, dass $\frac{\Delta n}{n_0}$ für große Auslenkungen verschwindet.

LÖSUNG: Zum Vergleichen der beiden Taylor-Reihen müssen wir nur den linearen und den quadratischen Term der $|K(n)|^2$-Reihe berechnen, der konstante Term wird durch die Normierung der Gauß-Funktion abgedeckt. Es ist

$$\frac{\partial}{\partial n_0}|K(n_0)|^2 = 0\,, \tag{50}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial n_0^2}|K(n_0)|^2 = \left(\left(\ln\left(z^2\right) - \ln\left(n_0\right)\right)^2 - \frac{1}{n_0}\right)|K(n_0)|^2 = -\frac{e^{z^2}}{z^2}\,, \tag{51}$$

wobei im letzten Schritt Gl. (47) verwendet wurde.

Gleichsetzen der quadratischen Terme der beiden Taylor-Reihen gibt

$$-\frac{(n-n_0)^2}{2(\Delta n)^2} = -\frac{e^{z^2}}{2z^2}(n-n_0)^2\,. \tag{52}$$

Damit ist

$$\left(\frac{\Delta n}{n_0}\right)^2 = \frac{1}{e^{z^2}z^2}\,, \tag{53}$$

was für große Auslenkungen verschwindet.

3. Was bedeutet die Erkenntnis aus Teilaufgabe 2 für die Energie des kohärenten Zustands? Vergleichen Sie die sich ergebende Energie mit der Energie des klassischen harmonischen Oszillators,

$$E = \frac{m\omega^2}{2}x_0^2\,. \tag{54}$$

LÖSUNG: Für große Auslenkungen trägt fast nur φ_{z^2} zur Energie des kohärenten Zustands bei, für die daher

$$E \approx \hbar\omega\left(z^2 + \frac{1}{2}\right) \approx \hbar\omega z^2 = \hbar\omega\frac{y_0^2}{2} = \frac{m\omega^2}{2}x_0^2 \tag{55}$$

gilt. Kohärente Zustände mit großen Anfangsauslenkungen haben demnach nicht nur eine dem klassischen HO entsprechende Wellenfunktion, sondern auch die zugehörige Energie.