Blatt 7

Ausgabe: Freitag, 18.12.20; Abgabe bis: Freitag, 08.01.2021, 14 Uhr (**40 Punkte**)

Aufgabe 1 Virialtheorem in der QM [5 Punkte]

In der klassischen Mechanik ist das Virialtheorem ein wichtiges Werkzeug, um auch für komplexe Systeme Abschätzungen über die Anteile der mittleren kinetischen und potentiellen Energie zu erhalten. Ein analoges Theorem existiert auch in der Quantenmechanik, welches wir nun zeigen wollen. Betrachten Sie den Hamiltonoperator eines Teilchens in 3 Raumdimensionen im Potential $V(\underline{\hat{x}})$

$$\hat{H} = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m} + V(\underline{\hat{x}}) \; . \tag{1}$$

Zeigen Sie im Heisenbergbild, dass im Allgemeinen

$$\frac{d}{dt}\left\langle \underline{\hat{x}} \cdot \underline{\hat{p}} \right\rangle = \left\langle \frac{\underline{\hat{p}}^2}{m} \right\rangle - \left\langle \underline{\hat{x}} \cdot \underline{\nabla} V(\underline{\hat{x}}) \right\rangle \; , \tag{2}$$

gilt. Für welche Zustände verschwindet die linke Seite, sodass sich ein Analogon zum klassischen Virialtheorem ergibt?

Aufgabe 2 Harmonischer Oszillator [15 Punkte]

In der Vorlesung haben Sie den harmonischen Oszillator als Potentialproblem in der QM kennengelernt, und die Eigenzustände $|n\rangle$ und Eigenenergien E_n ($n \in \mathbb{N}_0$) abgeleitet. Hierbei sind die Eigenzustände durch die in der Vorlesung eingeführten Leiteroperatoren $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ verknüpft: $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$, $\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$. Wir wollen dieses paradigmatische Modell und seine Eigenschaften noch etwas weiter untersuchen.

(2.a) (**3 Punkte**) Bestimmen Sie das Unschärfeprodukt $(\Delta x)^2(\Delta p)^2$ für allgemeine Energieeigenzustände $|n\rangle$. Betrachten Sie das Problem nun von der anderen Seite und verwenden Sie die Unbestimmtheitsrelation $(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar}{4}$ um zu zeigen, dass die niedrigste, mögliche Energie $E = \langle \hat{H} \rangle$ durch E_0 gegeben ist.

Die Energieeigenzustände $|n\rangle$ sind für die analytische Behandlung des harmonischen Oszillators enorm wichtig. Experimentell sind hingegen die sogenannten *kohärenten Zustände* $|\alpha\rangle$ häufig relevant. Diese lassen sich, da die Leiteroperatoren nicht hermitesch sind, durch komplexe Eigenwertgleichungen (mit $\alpha \in \mathbb{C}$) definieren:

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle \quad \text{und} \quad \langle\alpha|\,\hat{a}^\dagger = \langle\alpha|\,\alpha^* \; . \tag{3}$$

(2.b) (**2 Punkte**) Zeigen Sie, dass mit dieser Definition die kohärenten Zustände das Unschärfeprodukt für jeden Zustand $|\alpha\rangle$ minimieren:

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \ . \tag{4}$$

Um unsere weiteren Untersuchungen zu vereinfachen, definieren wir den *Verschiebeoperator*

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} \ . \tag{5}$$

(2.c) (**2 Punkte**) Zeigen Sie, dass $\hat{D}(\alpha)$ die folgenden Eigenschaften erfüllt:

i $\hat{D}(\alpha)$ ist unitär und $\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$,

ii $\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha$.

(2.d) (**2 Punkte**) Zeigen Sie damit, dass die kohärenten Zustände durch Anwenden des Verschiebeoperators auf den Vakuumzustand erzeugt werden:

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\,|0\rangle \ . \tag{6}$$

Hinweis: Beginnen Sie mit dem Ausdruck $\hat{a}\hat{D}(-\alpha)\,|\alpha\rangle$ und nutzen Sie die in 2.c gezeigten Eigenschaften.

(2.e) (**4 Punkte**) Bestimmen Sie jetzt die Darstellung von kohärenten Zuständen in der Basis der Energieeigenzustände

$$|\alpha\rangle = \sum_n \langle n|\alpha\rangle\,|n\rangle \ . \tag{7}$$

Bestimmen Sie dafür die Matrixelemente $\langle n|\alpha\rangle$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Verwenden Sie ihr Ergebnis, um die Wahrscheinlichkeit $P(n)$ zu bestimmen, $n \in \mathbb{N}_0$ Energiequanten im kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ zu finden. Benutzen Sie $\bar{N} = \langle\alpha|\hat{N}|\alpha\rangle$ um die Wahrscheinlichkeitsverteilung als Funktion der *mittleren* Besetzungszahl $\bar{N}$ auszudrücken.

(2.f) (**2 Punkte**) Aus der Vorlesung kennen Sie bereits die Zeitabhängigkeit der Leiteroperatoren im Heisenbergbild. Berechnen Sie damit die Zeitentwicklung des Ortserwartungswertes in einem kohärenten Zustand

$$\langle\hat{x}\rangle_\alpha(t) = \langle\alpha|\hat{x}(t)|\alpha\rangle \ . \tag{8}$$

Aufgabe 3 Wellenmechanik und ein spezielles Potential [20 Punkte]

Der harmonische Oszillator ist durch ein Potential $V(\hat{x})$ charakterisiert, für das sich die Eigenfunktionen des zugehörigen Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung explizit konstruieren lassen. Wir betrachten hier ein ähnliches Potential, welches sich jedoch, unter amderem, in einer wichtigen Eigenschaft des zugehörigen Spektrums unterscheidet, und dessen Eigenwertproblem sich dennoch exakt lösen lässt.

Gegeben sei der folgende Hamiltonoperator eines Teilchens der Masse M in einer Dimension, in der Ortsdarstellung:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2M} - \frac{\alpha}{2}\frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(ax)} \ , \tag{9}$$

wobei $\lambda \in \mathbb{N}$ eine positive, natürliche Zahl ist und $\alpha, a \in \mathbb{R}$. Wir wollen die Eigenfunktionen und Eigenwerte dieses Hamiltonoperators bestimmen und Sie in Relation zu denen des harmonischen Oszillators setzen.

(3.a) (**3 Punkte**) Zeigen Sie zunächst, dass die stationäre Schrödingergleichung mit der Substitution $u = \tanh(ax)$ ($u \in [-1, 1]$) in folgende Form gebracht werden kann:

$$-\frac{a^2\hbar^2}{2M}(1-u^2)\left\{(1-u^2)\frac{\partial^2}{\partial u^2} - 2u\frac{\partial}{\partial u} + \frac{M\alpha}{a^2\hbar^2}\lambda(\lambda+1)\right\}\psi(u) = E\psi(u)\ . \tag{10}$$

(3.b) (**2 Punkte**) Bestimmen Sie α und E so, dass die transformierte, stationäre Schrödingergleichung in die Legendregleichung

$$(1-u^2)\frac{\partial^2\psi}{\partial u^2} - 2u\frac{\partial\psi}{\partial u} + l(l+1)\psi(u) - \frac{m^2}{1-u^2}\psi(u) = 0\ , \tag{11}$$

mit $0 \leq |m| \leq l \in \mathbb{N}_0$ überführt wird.

(3.c) (**3 Punkte**) In der Vorlesung werden die sogenannten Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m} = g_{l,m}(\vartheta)e^{im\varphi}$ noch eine wichtig Rolle spielen. Die Funktionen $g_{l,m}(\vartheta)$ sind dabei die allgemeinen Lösungen der Differentialgleichung

$$\sin^2\vartheta\frac{d^2 g_{l,m}}{d\vartheta^2} + \sin\vartheta\cos\vartheta\frac{dg_{l,m}}{d\vartheta} - m^2 g_{l,m}(\vartheta) = -l(l+1)\sin^2\vartheta g_{l,m}(\vartheta)\ , \tag{12}$$

wobei wieder $0 \leq |m| \leq l \in \mathbb{N}_0$. Zeigen Sie, dass $g_{l,m}(u)$ mit der Substitution $u = \cos\vartheta$ ebenfalls die Legendregleichung eq. (11) löst.

(3.d) (**4 Punkte**) Betrachten Sie nun das l-te Legendrepolynom $P_l(u)$ welches durch die sogenannte Rodrigues-Formel erzeugt wird:

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l\ . \tag{13}$$

Verwenden Sie die Leibniz-Regel für höhere Ableitungen des Produktes zweier Funktionen $f(u), g(u)$

$$\frac{d^l}{du^l}(f(u)g(u)) = \sum_{n=0}^{l}\binom{l}{n}\frac{d^n f}{du^n}\frac{d^{(l-n)}g}{du^{(l-n)}} \tag{14}$$

und zeigen Sie, dass $P_l(u)$ die Legendregleichung für $m = 0$ erfüllt. *Hinweis: Betrachten sie die $(l+1)$-fache Ableitung der Funktion $(u^2-1)\frac{d}{du}(u^2-1)^l$.*

(3.e) (**4 Punkte**) Für den allgemeinen Fall $m \neq 0$ ist die Lösung von eq. (11) gegeben durch die zugeordneten Legendrepolynome

$$P_{l,m}(\vartheta) = (1-u^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{du^{|m|}}P_l(\vartheta)\ . \tag{15}$$

Berechnen Sie für $\lambda = 2$ die explizite Darstellungen der 3 energetisch niedrigsten Eigenfunktionen von $\hat{H}$. Wie viele gebundene Zustände (solche mit $E < 0$) gibt es?

(3.f) (**4 Punkte**) Wir wollen nun $\hat{H}$ bei $x = 0$ durch einen einfacheren Hamiltonoperator approximieren. Entwickeln Sie dafür $V(x)$ in eine Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung in x. Vergleichen Sie die Energien der Eigenzustände des resultierenden Hamiltonoperators mit denen, die Sie in 3.b) bestimmt haben. Was stellen Sie fest?