

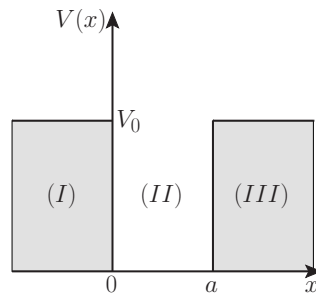
Moderne Physik für Informatiker

Vorlesung: PD Dr. S. Gieseke – Übung: Dr. M. Sekulla

Übungsblatt 13

Besprechung: Di, 25.07.2015

Aufgabe 30: Potentialtopf



Betrachten Sie ein Elektron in einem Kastenpotential, welches für $x < 0$ und $x > a$ die Höhe $V_0 > 0$ besitzt und dazwischen für $0 \leq x \leq a$ die Höhe $V_0 = 0$ (siehe Bild). Betrachten Sie einen endlichen Potentialtopf, also $V_0 \not\rightarrow \infty$. Lösen Sie die stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

mit einer Strategie analog zum Problem der kastenförmigen Potentialbarriere in der vorherigen Aufgabe. Beschränken Sie sich dabei zunächst auf Energien $E < V_0$ und benutzen Sie den Ansatz

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= r e^{\kappa x}, \\ \psi_{II}(x) &= p e^{ikx} + q e^{-ikx}, \\ \psi_{III}(x) &= t e^{-\kappa x}, \end{aligned}$$

um die Normierbarkeit der Wellenfunktion zu gewährleisten. Die Lösung dieses Problems nach den diskreten Energiewerten wird Sie letztlich auf die transzendente Gleichung $\tan(ka) = 2k\kappa/(k^2 - \kappa^2)$ führen. Die Lösung dieser Gleichung erfolgt in der Regel grafisch. Sie sollen an dieser Stelle jedoch abbrechen.

Aufgabe 31: Operatoren in der Ortsdarstellung

Orts- und Impulsoperator wirken in folgender Weise auf die Wellenfunktion im Ortsraum:

$$\begin{aligned}\vec{X}\psi(\vec{x}, t) &= \vec{x}\psi(\vec{x}, t), & X_j\psi(\vec{x}, t) &= x_j\psi(\vec{x}, t), \\ \vec{P}\psi(\vec{x}, t) &= -i\hbar\nabla\psi(\vec{x}, t), & P_j\psi(\vec{x}, t) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\psi(\vec{x}, t).\end{aligned}$$

(a) Zeigen Sie in dieser Darstellung, dass folgende Relation gilt:

$$[X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}.$$

(b) Zeigen Sie analog für ein freies Teilchen ($H = \vec{P}^2/2m$):

$$[X_k, H] = i\frac{\hbar}{m}P_k.$$

Hinweis: Um die Operatorrelationen zu beweisen benutzen Sie $[A, B]\psi(\vec{x}, t)$, und die Eigenschaften des Kommutators:

- Antisymmetrie: $[A, B] = -[B, A]$,
- (Bi-)Linearität: $[\lambda A + B, C] = \lambda[A, C] + [B, C]$,
- Jacobi-Identität: $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$,
- Produktregel: $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.

Aufgabe 32: Vektoren im Hilbertraum

Die Vektoren $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) in einem zweidimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}$, d.h. $\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$. In Abhängigkeit dieser zwei Basisvektoren definieren wir die zwei Vektoren $|\varphi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$ durch

$$|\varphi\rangle = (3 - i)|v_1\rangle + (1 + 2i)|v_2\rangle \quad \text{und} \quad |\chi\rangle = (1 + i)|v_1\rangle + (1 - i)|v_2\rangle$$

(a) Berechnen Sie das Skalarprodukt $\langle\chi|\varphi\rangle$. Zeigen Sie dann, dass die Vektoren

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|v_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|v_2\rangle \quad \text{und} \quad |u_2\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}|v_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|v_2\rangle$$

ebenfalls ein VONS bilden und bestimmen Sie die Komponenten von $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ bezüglich dieser neuen Basisvektoren.

(b) Projektoren P_i auf Unterräume $\mathcal{H}_i$ haben die Eigenschaften $P_i^2 = P_i$ (Idempotenz) und $\sum_i P_i = 1$ (Vollständigkeit), falls die $\mathcal{H}_i$ den gesamten Raum $\mathcal{H}$ aufspannen. Betrachten Sie nun die Projektoren $P_{u_1} = |u_1\rangle\langle u_1|$ und $P_{v_1} = |v_1\rangle\langle v_1|$. Welche mathem. Objekte sind durch P_{u_1} bzw. P_{v_1} beschrieben? Bestimmen Sie die Komponenten $\langle v_j | P_{u_1} | v_k \rangle$ von P_{u_1} bezüglich der $|v_i\rangle$ und die Komponenten $\langle u_j | P_{v_1} | u_k \rangle$ von P_{v_1} bezüglich der $|u_i\rangle$. Schreiben Sie schließlich P_{u_1} in der Basis $|v_i\rangle$.

Aufgabe 33: Auf- und Absteigeoperatoren des Harmonischer Oszillators

Man betrachte einen harmonischen Oszillator (mit Ladung e) in einem konstanten elektrischen Feld E , der durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + eEX$$

beschrieben wird.

- (a) Zeigen Sie, dass H durch die Auf- und Absteigeoperatoren

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}P \quad \text{und} \quad b = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}P$$

in die Form

$$H = \hbar\omega \left[b^\dagger b + \frac{eE}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (b^\dagger + b) + \frac{1}{2} \right]$$

gebracht werden kann.

Hinweis: Berechnen Sie zunächst den Kommutator $[b, b^\dagger]$.

- (b) Drücken Sie H durch $a^\dagger = b^\dagger + c$ und $a = b + c$ aus und wählen Sie $c \in \mathbb{R}$ so, dass keine in $a^\dagger$ und a lineare Terme in H auftreten. Geben Sie die Energieeigenwerte von H an und begründen Sie ihre Antwort.

- (c) Berechnen Sie die Ortsunschärfe $\Delta X^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$ des Oszillators.

Hinweis: Für die Eigenzustände $|n\rangle$ von H gilt:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \text{und} \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

Weiterführende Erläuterungen: Wellenfunktionen in der Quantenmechanik können als Vektoren in einem abstrakten Vektorraum, dem sog. Hilbertraum, interpretiert werden. Betrachten wir im Folgenden nur den eindimensionalen Fall.

- Für zwei Wellenfunktionen $\psi(x)$ und $\varphi(x)$ ist auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ein Skalarprodukt der Hilbertraumvektoren $|\psi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ durch

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(x)\varphi(x)dx$$

definiert, wobei wir hier die Darstellung im x -Raum gewählt haben und $\langle\psi|$ der zu $|\psi\rangle$ transponierte Vektor ist bzw. $\psi^*(x)$ die zu $\psi(x)$ komplex konjugierte Wellenfunktion. Die Norm einer Wellenfunktion ist durch die Norm

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = \int |\psi(x)|^2 dx$$

des entsprechenden Vektors auf diesem Vektorraum definiert und wir fordern daher, dass der Hilbertraum $\mathcal{H}$ im Speziellen nur normierte Zustände enthält, d.h. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

- Der Erwartungswert eines quantenmechanischen Operators $\hat{O}$ in einem Zustand $|\psi\rangle$ lässt sich nun auch schreiben als

$$\langle \hat{O} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} \psi \rangle = \int \psi^*(x) \hat{O}_x \psi(x) dx$$

wobei man den Index ψ in $\langle \hat{O} \rangle_\psi$ auch gerne unterdrückt, wenn klar ist von welchen Zuständen die Rede ist. Operatoren in der Quantenmechanik können daher i.A. auch als Matrixwertige Objekte auf einem abstrakten Vektorraum der Wellenfunktionen aufgefasst werden, weshalb man bei $\langle \psi | \hat{O} | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{O} \varphi \rangle$ oft auch einfach vom sog. Matrixelement des Operators $\hat{O}$ zwischen den Zuständen $\langle \psi |$ und $|\varphi\rangle$ spricht.

- Üblicherweise versucht man beliebige Vektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in Abhängigkeit von Basisvektoren $|v_i\rangle \in \mathcal{H}$, mit $i \in (1, \dots, n)$ und n der Dimension von $\mathcal{H}$, auszudrücken. Die Basisvektoren $|v_i\rangle$ bilden dabei ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS), d.h. $\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$. Findet man solch eine Zerlegung, so ist es in der Regel nicht notwendig Skalarprodukte u.Ä. über Integralbildung im Funktionenraum zu ermitteln, da die Wirkung der $|v_i\rangle$ untereinander trivial ist und die Wirkung auf gewisse Operatoren (speziell auf Observable, s.u.) oftmals von vornherein bekannt.

- Für einen beliebigen Operator $\hat{X}$ und Wellenfunktionen φ, ψ definiert die Bedingung

$$\langle \hat{X} \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{X}^\dagger \psi \rangle$$

den sog. adjungierten Operator $\hat{X}^\dagger$. Man überzeugt sich sofort davon, dass Folgendes gilt: $(\hat{X} + \hat{Y})^\dagger = \hat{X}^\dagger + \hat{Y}^\dagger$, $\langle \psi | (\hat{X} + \hat{Y}) \psi \rangle = \langle \psi | \hat{X} \psi \rangle + \langle \psi | \hat{Y} \psi \rangle$ und $\langle \hat{X} \psi | \hat{Y} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{X}^\dagger \hat{Y} \psi \rangle$. Die Adjunktion ist dabei eine Operation, welche gleichzeitig die Transposition auf dem entsprechenden Vektorraum als auch die komplexe Konjugation des Operators zur Folge hat.

- Eine wichtige Unterklasse von Operatoren ist die Klasse der sog. Hermite'schen oder selbstadjungierten Operatoren $\hat{O}_H$. Für diese gilt

$$\langle \hat{O}_H \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}_H^\dagger \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}_H \psi \rangle \quad \text{oder einfach} \quad \hat{O}_H^\dagger = \hat{O}_H$$

wobei $\hat{O}_H^\dagger$ der zu $\hat{O}_H$ adjungierte Operator ist. Hermite'sche Operatoren sind deshalb so wichtig, weil deren Erwartungswerte sämtlich reell sind und die Eigenwerte Hermite'scher Operatoren somit natürliche Kandidaten bei der Definition von physikalischen Observablen darstellen. Physikalische Observable haben also die besondere Eigenschaft, dass sie durch selbstadjungierte Operatoren dargestellt sind. Für sie gilt $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$ und $(\hat{A} + i\hat{B})^\dagger = (\hat{A} - i\hat{B})$.