Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 17

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Matthias Hecker, Markus Klug

Blatt 6 (Lösung)
Abgabe: 06.06.2017, 12:00h, Bespr.: 07.06.2017

---

1. Harmonischer Oszillator (5 Punkte, mündlich)

Um die Matrixelemente in der Basis der Eigenzustände des harmonischen Oszillators zu berechnen stellt man alle Operatoren am besten durch die Auf- und Absteiger $\hat{a}^\dagger$ und $\hat{a}$ dar. So sind

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \qquad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right). \tag{1}$$

Werden Auf- und Absteiger auf einen Zustand $\mid m\,\rangle$ angewendet, so gilt

$$\hat{a}^\dagger \mid m\,\rangle = \sqrt{m+1}\mid m+1\,\rangle, \qquad \hat{a}\mid m\,\rangle = \sqrt{m}\mid m-1\,\rangle. \tag{2}$$

Zur Berechnung der Matrixelemente muss man nun nur noch verwenden, dass die Eigenzustände $\{\mid n\,\rangle; n = 0,1,2,\dots\}$ ein Orthonormalsystem bilden, also gilt

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}. \tag{3}$$

(a) (1 Punkt) Das Matrixelement $\langle n|\hat{x}|m\rangle$ berechnet sich leicht zu

$$\langle n|\hat{x}|m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n|\hat{a}|m\rangle + \langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1}\right). \tag{4}$$

Mit den angegebenen Hermite Polynomen und der Orthogonalitätsrelation kann man ebenso berechnen

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{x}|m\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \overbrace{\langle n|x\rangle}^{\psi_n^*(x)}\, x\, \overbrace{\langle x|m\rangle}^{\psi_m(x)} = \left|\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right| \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}^{\,2}}{\sqrt{2^n n!\,2^m m!}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \xi\, e^{-\xi^2}\, H_n(\xi)\, H_m(\xi) \\
&\overset{p.i.}{=} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!\,2^m m!}} \left[\frac{-1}{2} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, H_m(\xi)\Big|_{-\infty}^{\infty}\right. \\
&\qquad \left. + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-\xi^2}\left(\underbrace{H_n'(\xi)}_{2nH_{n-1}(\xi)}\, H_m(\xi) + H_n(\xi)\, \underbrace{H_m'(\xi)}_{2mH_{m-1}(\xi)}\right)\right] \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{\pi m\omega}} \left[\frac{n}{\sqrt{2^n n!\,2^m m!}} 2^{n-1}(n-1)!\,\sqrt{\pi}\delta_{n-1,m} + \frac{m}{\sqrt{2^n n!\,2^m m!}} 2^n n!\,\sqrt{\pi}\delta_{n,m-1}\right] \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\frac{2^m}{2^{m+\frac{1}{2}}} \frac{(m+1)\,m!}{\sqrt{(m+1)!\,m!}}\delta_{n,m+1} + \frac{2^{m-1}}{2^{m-\frac{1}{2}}} \frac{m\,(m-1)!}{\sqrt{(m-1)!\,m!}}\delta_{n,m-1}\right] \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{m+1}\delta_{n,m+1} + \sqrt{m}\delta_{n,m-1}\right] .
\end{aligned}$$

(b) (1 Punkt) Für die weiteren Matrixelemente erhält man

$$\langle n|\hat{a}|m\rangle = \sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} = \sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,m} \tag{5}$$

$$\langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1} \tag{6}$$

$$\langle n|\hat{p}|m\rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\Big(\langle n|\hat{a}|m\rangle - \langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle\Big) = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\Big(\sqrt{m}\,\delta_{n+1,m} - \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1}\Big) \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}^2|m\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2|m\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\langle n|\hat{a}^2|m\rangle + \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|m\rangle + \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|m\rangle + \langle n|(\hat{a}^\dagger)^2|m\rangle\Big) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\sqrt{m(m-1)}\delta_{n+2,m} + (m+1)\,\delta_{n,m} + m\,\delta_{n,m} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\,\delta_{n,m+2}\Big) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\sqrt{m(m-1)}\,\delta_{n+2,m} + (2m+1)\,\delta_{n,m} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\,\delta_{n,m+2}\Big)\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{p}^2|m\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)^2|m\rangle \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\Big(\langle n|\hat{a}^2|m\rangle - \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|m\rangle - \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|m\rangle + \langle n|(\hat{a}^\dagger)^2|m\rangle\Big) \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\Big(\sqrt{m(m-1)}\,\delta_{n+2,m} - (2m+1)\,\delta_{n,m} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\,\delta_{n,m+2}\Big)\end{aligned} \tag{9}$$

(c) (0,5 Punkte) Die Erwartungswerte von $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ und $\hat{V} = \frac{m\omega\hat{x}^2}{2}$ für einen Eigenzustand $|\, n\,\rangle$ sind entsprechend Aufgabenteil b)

$$\langle n|\hat{T}|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1) \quad \text{und} \quad \langle n|\hat{V}|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1) \tag{10}$$

und damit für alle Eigenzustände gleich.

(d) (1,5 Punkte) Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei der Zustand $|\,\psi(t)\,\rangle$ gegeben durch

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,0\,\rangle + |\,1\,\rangle\big) \tag{11}$$

wobei $|\,0\,\rangle$ der Grundzustand und $|\,1\,\rangle$ der erste angeregte Zustand ist.
Die Zustände $|\,0\,\rangle$ und $|\,1\,\rangle$ sind Eigenzustände des Hamilton-Operators $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$ d.h. sie erfüllen die Eigenwertgleichung $\hat{H}\,|\,\psi_i\,\rangle = E_i\,|\,\psi_i\,\rangle$, explizit

$$\hat{H}\,|\,0\,\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\,|\,0\,\rangle \quad \text{und} \quad \hat{H}\,|\,1\,\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}\,|\,1\,\rangle. \tag{12}$$

Eigenzustände $|\,\psi_i\,\rangle$ haben entsprechend der Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\,|\,\psi_i\,\rangle = H\,|\,\psi_i\,\rangle = E_i\,|\,\psi_i\,\rangle$ die Zeitentwicklung $|\,\psi_i(t)\,\rangle = \exp(-iE_it/\hbar)\,|\,\psi_i(0)\,\rangle$. Das System ist zum Zeitpunkt $t = 0$ allerdings in der Superposition

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,\psi_0(0)\,\rangle + |\,\psi_1(0)\,\rangle\big) \tag{13}$$

mit $|\,\psi_0(0)\,\rangle = |\,0\,\rangle$ und $|\,\psi_1(0)\,\rangle = |\,1\,\rangle$ initialisiert. Die Superposition $|\,\psi(0)\,\rangle$ ist kein Eigenzustand, die Zeitentwicklung ist durch die Superposition der beiden zeitabhängigen Eigenzustände $|\,\psi_{0,1}(t)\,\rangle$ gegeben. Es ergibt sich also

$$\begin{aligned}|\,\psi(t)\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,\psi_0(t)\,\rangle + |\,\psi_1(t)\,\rangle\Big) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(e^{-i\omega t/2}\,|\,0\,\rangle + e^{-i3\omega t/2}\,|\,1\,\rangle\Big)\end{aligned}. \tag{14}$$

Mit der zeitabhängigen Wellenfunktion lassen sich nun die gewünschten zeitabhängigen Erwartungswerte berechnen

$$\begin{aligned}\langle\,\psi(t)\mid\hat{a}^\dagger\mid\psi(t)\,\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\langle\,0\mid\hat{a}^\dagger\mid 0\,\rangle + \langle\,0\mid\hat{a}^\dagger\mid 1\,\rangle e^{-i\omega t} + \langle\,1\mid\hat{a}^\dagger\mid 0\,\rangle e^{i\omega t} + \langle\,1\mid\hat{a}^\dagger\mid 1\,\rangle\Big)\\ &= \frac{1}{2}\Big(\langle\,0\mid\sqrt{1}\mid 1\,\rangle + \langle\,0\mid\sqrt{2}\mid 2\,\rangle e^{-i\omega t} + \langle\,1\mid\sqrt{1}\mid 1\,\rangle e^{+i\omega t} + \langle\,1\mid\sqrt{2}\mid 2\,\rangle\Big)\\ &= \frac{1}{2}e^{i\omega t}\end{aligned} \tag{15}$$

und

$$\langle\,\psi(t)\mid\hat{a}\mid\psi(t)\,\rangle = \langle\,\psi(t)\mid\hat{a}^\dagger\mid\psi(t)\,\rangle^* = \frac{1}{2}e^{-i\omega t} \tag{16}$$

damit

$$\langle\,\psi(t)\mid\hat{x}\mid\psi(t)\,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\,\psi(t)\mid\hat{a}+\hat{a}^\dagger\mid\psi(t)\,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}}{2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t) \tag{17}$$

analog

$$\langle\,\psi(t)\mid\hat{p}\mid\psi(t)\,\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle\,\psi(t)\mid\hat{a}-\hat{a}^\dagger\mid\psi(t)\,\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\frac{e^{i\omega t}-e^{-i\omega t}}{2} = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sin(\omega t) \tag{18}$$

Anmerkung: Die Oszillation des Erwartungswertes (17) bedingt, dass der Anfangszustand (11) eine Überlagerung benachbarter Eigenzustände ist. In einem reinen Eigenzustand ist der Erwartungswert $\langle\hat{x}\rangle_t = 0$. Dies können wir in Zusammenhang mit dem Ehrenfest Theorem aus Aufgabe 3, Blatt 2 stellen. Für ein quadratisches Potential ($n = 2$, $\lambda = \frac{1}{2}m\omega^2$) erhält man damit die Lösung $\langle\hat{x}\rangle_t = A\cos(\omega t + \phi_0)$, und man findet eine schöne Übereinstimmung mit dem klassischen Resultat. Die Anfangsbedingungen sind jedoch nicht so eindeutig. Das soll heissen, $A = 0$ ist hier durchaus eine realistische Wahl, und offensichtlich der Fall in einem reinen Eigenzustand.

(e) (1 Punkt) Die Matrixelemente einiger Operatoren zwischen Eigenzuständen $\mid n\,\rangle$ und $\mid m\,\rangle$ wurden schon in Aufgabenteil a) und b) berechnet. In dieser Basis lassen sich die Operatoren damit direkt als Matrizen mit den Elementen $A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle$ darstellen. Explizit sind die Auf- und Absteiger in dieser Darstellung

$$\hat{a}^\dagger \hat{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{a} \hat{=} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}, \tag{19}$$

Orts- und Impulsoperator (letzterer der Vollständigkeit halber)

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \hat{=} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{und} \tag{20}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger) \hat{=} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{21}$$

sind hermitische Operatoren, entsprechend sind auch die Matrizen hermitisch, d.h. es gilt $A_{ij} = A^*_{ji}$.
Der Hamiltonoperator

$$\hat{H} \hat{=} \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{22}$$

ist nicht nur hermitisch, in der Basis der Eigenzustände ist er natürlich diagonal, mit den Eigenwerten als Diagonalelementen.

2. Gebundener Zustand im δ-Potential (3 Punkte, schriftlich)

Hier betrachten wir gebundene Zustände ($E < 0$) im Potential $V(x) = -V_0\delta(x)$.

(a) (1 Punkt) Wir bestimmen die Energie und die Wellenfunktion des gebundenen Zustandes. Zunächst lösen wir die Schrödingergleichung im Bereich $x < 0$ und $x > 0$,

$$\partial_x^2\psi(x) - \underbrace{\frac{-2mE}{\hbar^2}}_{\kappa^2}\psi(x) = 0\ .$$

Wegen der Normierbarkeit finden wir die Lösungen

$$\begin{aligned} \psi_<(x) &= B\,e^{\kappa x} \\ \psi_>(x) &= A\,e^{-\kappa x}\ , \end{aligned}$$

und dank der Stetigkeit bei $x = 0$ muss gelten $A = B$. Integriert man die Schrödingergleichung im Intervall $[-\epsilon, \epsilon]$ und führt den Limes $\epsilon \to 0$ durch, erhält man die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_>(0) - \psi'_<(0)) - V_0\psi(0) = 0\ .$$

Nun setzen wir die Wellenfunktionen ein und erhalten

$$\begin{aligned} 0 =& -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_>(0) - \psi'_<(0)) - V_0\psi(0) \\ =& A\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-\kappa - \kappa) - V_0\right) \\ \rightarrow \quad \kappa =& \frac{mV_0}{\hbar^2} \\ \rightarrow \quad E =& -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\ . \end{aligned}$$

Normieren wir schliesslich noch die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi(x)|^2 &= A^2\int_0^{\infty} dx\,e^{-2\kappa x} + A^2\int_{-\infty}^{0} dx\,e^{2\kappa x} \\ &= A^2\left(\frac{1}{-2\kappa}(0-1) + \frac{1}{2\kappa}(1-0)\right) \\ \rightarrow \quad A &= \sqrt{\kappa}\ . \end{aligned}$$

So lautet die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa}\,e^{-\kappa|x|}.$$

Es gibt also genau einen gebundenen Zustand.

(b) (0,5 Punkte)
Die Wahrscheinlichkeit p_0 das Teilchen in einem Intervall $[-a, a]$ zu finden erhält man so:

$$
\begin{aligned}
p_0 =& \int_{-a}^{a} dx\, |\psi(x)|^2 = \kappa \left(\int_0^a dx\, e^{-2\kappa x} + \int_{-a}^{0} dx\, e^{2\kappa x} \right) \\
=& \kappa \left(\frac{1}{-2\kappa}(e^{-2\kappa a} - 1) + \frac{1}{2\kappa}(1 - e^{-2\kappa a}) \right) \\
=& 1 - e^{-2\kappa a} \\
\rightarrow \quad a =& -\frac{\ln(1-p_0)}{2\kappa} = \frac{\ln(2)}{2\kappa} \; .
\end{aligned}
$$

(c) (0,5 Punkte)
Der Übergang des Kastenpotentials in ein δ-Potential kann wie folgt gemacht werden

$$
\bar{V}(x) = -\bar{V}_0 \left\{ \begin{array}{ll} 1 & , |x| \leq a \\ 0 & , sonst \end{array} \right\} = -\underbrace{2a\bar{V}_0}_{\equiv V_0} \underbrace{\begin{cases} \frac{1}{2a} & , |x| \leq a \\ 0 & , sonst \end{cases}}_{\rightarrow \delta(x)} .
$$

Das heisst, letztlich kann $\bar{V}_0 = \frac{V_0}{2a}$ ersetzt werden und der Übergang $a \rightarrow 0$ durchgeführt werden. Das 'Spielen' am Potential wirkt eventuell ein wenig willkürlich; wichtig ist jedoch, dass das Kastenpotential und das δ-Potential das gleiche Gewicht besitzen, also $\int_{-a}^{a} dx\, \bar{V}_0 = \int_{-a}^{a} dx\, V_0\, \delta(x)$. Das ist hiermit gewährleistet.

(d) (1 Punkt)
Betrachten wir zunächst Gleichung (11) des Aufgabenblattes und entwickeln für kleine a,

$$
\begin{aligned}
\frac{\kappa}{k} =& \tan(ka) \\
\sqrt{\frac{-E}{E + \frac{V_0}{2a}}} =& \tan\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(Ea^2 + \frac{V_0 a}{2})} \right) \approx \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(Ea^2 + \frac{V_0 a}{2})} \\
\frac{-E}{\frac{V_0}{2a}} =& \frac{2m}{\hbar}(\frac{V_0 a}{2}) \\
\rightarrow \quad E =& -\frac{m V_0^2}{2\hbar} \; .
\end{aligned}
$$

Hier finden wir den gebundenen Zustand des δ-Potentials. Entwickeln wir hingegen die Gleichung (12) der ungeraden Wellenfunktion erhalten wir

$$
\begin{aligned}
-\frac{k}{\kappa} =& \tan(ka) \\
-\sqrt{\frac{E + \frac{V_0}{2a}}{-E}} =& \tan\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(Ea^2 + \frac{V_0 a}{2})} \right) \approx \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(Ea^2 + \frac{V_0 a}{2})} \\
\frac{E + \frac{V_0}{2a}}{-E} =& \frac{2m}{\hbar}(\frac{V_0 a}{2}) \approx 0 \\
\rightarrow \quad E =& -\frac{V_0}{2a} \rightarrow -\infty \, .
\end{aligned}
$$

Offensichtlich bleibt im Grenzfall $a \rightarrow 0$, wie zu erwarten war, nur ein gebundener Zustand übrig.