JINMING LU, KONRAD SCHÖNLEBER 

# Repetitorium Theoretische Quantenmechanik, WS 08/09

1. **Zweiniveausystem**

Der Hamiltonoperator eines Zweiniveausystems lautet

$$\mathcal{H} = \varepsilon(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

Dabei sind $|1\rangle$ und $|2\rangle$ die normierten Basiszustände. Der Parameter $\varepsilon > 0$ hat die Einheit einer Energie.

(a) Bestimmen Sie die Matrixdarstellung von $\mathcal{H}$ bezüglich der geordneten Basis $(|1\rangle,|2\rangle)$

(b) Bestimmen Sie die Energieeigenwerte sowie die zugehörigen normierten Eigenzustände von $\mathcal{H}$.

(c) Ein Teilchen befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$|\psi(0)\rangle = A(3|1\rangle + 4|2\rangle)$$

Bestimmen Sie die Normierungskonstante $A$ und die Wahrscheinlichkeit, bei einer Energiemessung zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den größeren Energieeigenwert zu erhalten.

(d) Wie groß sind jeweils die Wahrscheinlichkeiten, zu einem Zeitpunkt $t > 0$ das Teilchen im Zustand $|1\rangle$ bzw. $|2\rangle$ anzutreffen?

**Lösung**

(a) Wir berechnen die Matrixelemente $\mathcal{H}_{ij} = \langle i|\mathcal{H}|j\rangle$ und erhalten

$$(\mathcal{H}) = \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(b) Die Eigenwertgleichung

$$0 = \det[(\mathcal{H}) - \lambda\mathbb{I}] = \det \begin{pmatrix} -\lambda & \varepsilon \\ \varepsilon & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \varepsilon^2$$

liefert die Eigenwerte und Eigenvektoren

$$\lambda_1 = +\varepsilon \qquad \Rightarrow \begin{pmatrix} -\lambda_1 & \varepsilon \\ \varepsilon & -\lambda_1 \end{pmatrix} \vec{v}_1 = \vec{0} \qquad \Rightarrow \vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenzustand: $|\chi_1\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$

$$\lambda_2 = -\varepsilon \qquad \Rightarrow \begin{pmatrix} -\lambda_2 & \varepsilon \\ \varepsilon & -\lambda_2 \end{pmatrix} \vec{v}_2 = \vec{0} \qquad \Rightarrow \vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Eigenzustand: $|\chi_2\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$

(c) Die Normierungskonstante erhält man durch:

$$1 = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = |A|^2(9\langle 1|1\rangle + 0 + 0 + 16\langle 2|2\rangle) = 25|A|^2 \qquad \Rightarrow |A| = \frac{1}{5}$$

Wir müssen nun die Zeitentwicklung von $|\psi(t)\rangle$ berechnen. Es gilt formal:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}|\psi(0)\rangle$$

Stellt man jedoch

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n|\chi_n\rangle$$

als Linearkombination aus Eigenzuständen $|\chi_n\rangle$ des Hamiltonoperators dar, so gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}|\chi_n\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\chi_n\rangle$$

in unserem Fall gilt

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \qquad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle - |\chi_2\rangle)$$

also

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{5}(3|1\rangle + 4|2\rangle) = \frac{1}{5}\left[3\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) + 4\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle - |\chi_2\rangle)\right] =$$

$$= \frac{7}{5\sqrt{2}}|\chi_1\rangle - \frac{1}{5\sqrt{2}}|\chi_2\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{7}{5\sqrt{2}}e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}|\chi_1\rangle - \frac{1}{5\sqrt{2}}e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}|\chi_2\rangle$$

Das heißt, die Wahrscheinlichkeit, bei einer Energiemessung zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den größeren Energieeigenwert $\varepsilon$ zu erhalten, gegeben ist durch:

$$\left|\frac{7}{5\sqrt{2}}e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{49}{50}$$

(d) Es gilt

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{7}{5\sqrt{2}}e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}|\chi_1\rangle - \frac{1}{5\sqrt{2}}e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}|\chi_2\rangle \\
&= \frac{7}{5\sqrt{2}}e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) - \frac{1}{5\sqrt{2}}e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \\
&= \frac{1}{10}\left(7e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} - e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\right)|1\rangle + \frac{1}{10}\left(7e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\right)|2\rangle
\end{aligned}$$

Das heißt, die Wahrscheinlichkeiten, zu einem Zeitpunkt $t > 0$ das Teilchen im Zustand $|1\rangle$ bzw. $|2\rangle$ anzutreffen, gegeben sind durch

$$|\langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{100}\left|7e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} - e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{1}{50}\left[25 - 7\cos\left(\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)\right]$$

$$|\langle 2|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{100}\left|7e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{1}{50}\left[25 + 7\cos\left(\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)\right]$$

2. **Rechnen mit Kommutatoren**

   Gegeben seien die Komponenten des Drehimpulsoperators $L_x, L_y, L_z$ und ein Operator $A$ mit $[A, L_x] = [A, L_y] = 0$. Zeigen Sie: $[A, L_z] = 0$. *Hinweis: Setzen Sie für $L_z$ die Relation $L_z = 1/(i\hbar)[L_x, L_y]$ ein.*

   **Lösung:**

   Es gilt

$$
\begin{aligned}
i\hbar[A, L_z] &= [A, [L_x, L_y]] = [A, L_x L_y - L_y L_x] = [A, L_x L_y] - [A, L_y L_x] = \\
&= L_x[A, L_y] + [A, L_x]L_y - L_y[A, L_x] - [A, L_y]L_x = 0
\end{aligned}
$$

3. **Variationsprinzip**

   Betrachten Sie die auf 1 normierte Wellenfunktion

$$\psi_L(x) = A \exp\left(-\frac{|x|}{L}\right)$$

   (a) Berechnen Sie die Normierungskonstante $|A|$

   (b) Sei

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\left[-\beta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{x}{\beta}\right)^2\right] \qquad \text{mit } \beta = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

   Für welchen Wert der Länge $L$ ist der Erwartungswert $E_L = \langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle$ minimal? Vergleichen Sie den minimalen Wert $E_L$ mit dem Exakten Energieeigenwert des Grundzustands von $\mathcal{H}$.

   **Lösung**

   (a) Wir bestimmen zuerste die Normierungskonstante

$$\langle\psi_L|\psi_L\rangle = 2|A|^2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2x}{L}\right) dx = |A|^2 L \qquad |A| = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

   (b) Um $E_L$ zu berechnen, brauchen wir $\langle\psi_L|\frac{d^2}{dx^2}|\psi_L\rangle$ und $\langle\psi_L|x^2|\psi_L\rangle$. Für den letzeren erhalten wir

$$\langle\psi_L|x^2|\psi_L\rangle = \frac{2}{L}\int_0^\infty x^2 e^{-2x/L} dx \overset{y=2x/L}{=} \frac{2}{L}\left(\frac{L}{2}\right)^3 \int_0^\infty y^2 e^{-y} dy = \frac{L^2}{4}2! = \frac{L^2}{2}$$

   Für den ersten Erwartungswert erhalten wir:

$$
\begin{aligned}
\left\langle \psi_L \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_L \right\rangle &= \int_{-\infty}^\infty \psi_L \frac{d^2}{dx^2}\psi_L dx = -\int_{-\infty}^\infty \left(\frac{d}{dx}\psi_L\right)^2 dx = \\
&= -\frac{2}{L}\int_0^\infty \left(-\frac{1}{L}\right)^2 \exp\left(-\frac{2x}{L}\right) dx = -\frac{1}{L^2}
\end{aligned}
$$

   Also erhalten wir

$$E_L = \langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\beta^2}{L^2} + \frac{L^2}{2\beta^2}\right)$$

Extrema von $E_L$ erhalten wir durch

$$0 = \frac{dE_L}{dL} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-2\frac{\beta^2}{L^3} + \frac{L}{\beta^2}\right) \qquad = \left(\frac{L}{\beta}\right)^2 = \sqrt{2} \qquad E_L = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar\omega}{2}$$

Also ist die näherungsweise Grundzustandsenergie aus dem Variationsprinzip höher als die tatsächliche Grundzustandsenergie.

4. **Harmonischer Oszillator im elektrischen Feld**

Betrachten Sie ein Teilchen der Ladung $e$ im Potential eines harmonischen Oszillators. Zusätzlich wird ein elektrisches Feld $F$ eingeschaltet. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{eFx}_{\mathcal{H}'}$$

(a) Geben Sie die exakten Energieeigenwerte von $\mathcal{H}$ an. *(Hinweis: Sie dürfen verwenden, dass die Energieeigenwerte von $\mathcal{H}_0$ durch $E_n^0 = \hbar\omega(n + 1/2)$ gegeben sind. Formen Sie $\mathcal{H}$ geschickt um.)*

(b) Geben Sie die Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$ an. *(Hinweis: Sie dürfen verwenden, dass die Eigenfunktionen von $\mathcal{H}_0$ durch*

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

*gegeben sind.)*

(c) Betrachten Sie $\mathcal{H}_1$ als kleiner Störterm und berechnen Sie in erster und zweiter Ordnung Störungestheorie die Energiekorrekturen $\Delta E_n^{(1)}$ und $\Delta E_n^{(2)}$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem aus der Teilaufgabe (a). *(Hinweis: Benutzen Sie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren)*

(d) Wie würden Sie Störpotentiale der Form $\mathcal{H}' = \lambda x^2$, $\mathcal{H}' = \lambda x^3$, $\mathcal{H}' = \lambda x^4$ rechnerisch behandeln?

**Lösung:**

(a) Wir formen um:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + eFx = \\
&= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left[x^2 + 2x\frac{eF}{m\omega^2} + \left(\frac{eF}{m\omega^2}\right)^2\right] - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{eF}{m\omega^2}\right)^2 \\
&= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{eF}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{e^2F^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Führen wir eine Koordinatentransformation der Form $x' = x + eF/(m\omega^2)$ durch, so erhalten wir wegen $\partial_x^2 = \partial_{x'}^2$

$$\mathcal{H} = \frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{e^2F^2}{2m\omega^2} \tag{1}$$

der den Hamilton-Operator eines harmonischen Oszillators mit konstanter Energieverschiebung darstellt. Daher lauten die Energieeigenwerte

$$E_n' = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{e^2F^2}{2m\omega^2}$$

(b) Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators (1) sind gegeben durch

$$\psi_n'(x') = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x'\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x'^2}$$

also:

$$\psi_n'(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x + \frac{eF}{m\omega^2}\right)\right] e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}\left(x+\frac{eF}{m\omega^2}\right)^2}$$

(c) Wir berechnen die Energiekorrekturterme

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle n|\mathcal{H}'|n\rangle \qquad \text{und} \qquad \Delta E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|\mathcal{H}'|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

Dabei verwenden wir Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

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

Durch diese lässt sich der Störoperator ausdrücken:

$$\mathcal{H}' = eE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)$$

Die Energiekorrektur 1. Ordnung verschwindet

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle n|\mathcal{H}'|n\rangle = \left\langle n \left| eE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+) \right| n \right\rangle = 0$$

aufgrund der Gültigkeit der Relationen

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \qquad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

Nun berechnen wir die Energiekorrektur zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{(2)} &= \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|\mathcal{H}'|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0} = \sum_{k\neq n} \frac{e^2F^2\hbar}{2m\omega} \frac{|\langle k|(a + a^+)|n\rangle|^2}{\hbar\omega(n-k)} \\
&= \frac{e^2F^2}{2m\omega^2} \left[\sum_{k\neq n} \frac{n|\langle k|n-1\rangle|^2}{n-k} + \frac{(n+1)|\langle k|n+1\rangle|^2}{n-k}\right] \\
&= \frac{e^2F^2}{2m\omega^2} \left[\frac{n}{n-(n-1)} + \frac{(n+1)}{n-(n+1)}\right] = -\frac{e^2F^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Wir erhalten durch Störungsrechnung

$$E_n' = E_n^0 + \Delta E_n^{(1)} + \Delta E_n^{(2)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{e^2F^2}{2m\omega^2}$$

Diese Energieeigenwerte stimmen mit den exakten überein.

(d) Störpotentiale der Form $\mathcal{H}' = \lambda x^2$, $\mathcal{H}' = \lambda x^3$, $\mathcal{H}' = \lambda x^4$ lassen sich auch mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren rechnerisch behandeln:

$$\mathcal{H}' = \lambda x^n = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \underbrace{(a + a^+)...(a + a^+)}_{n-mal}$$

Beim "Ausmultiplizieren" muss beachtet werden, dass die Operatoren $a$ und $a^+$ nicht vertauschen. Für große $n$ ist die Rechnung aufwendig.