

# Ferienkurs *Quantenmechanik 1* – Sommer 2009

## Quantenmechanik in einer Dimension (Lösungen)

### 1 1-dimensionale Probleme

#### 1.1 Unendlich hoher Potentialtopf (\*)

Ein Teilchen der Masse  $m$  ist in einem eindimensionalen Bereich  $0 \leq x \leq a$  eingeschlossen. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist die normierte Wellenfunktion beschrieben durch:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[ 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (1)$$

a) Wie lautet die Wellenfunktion zu einem späteren Zeitpunkt  $t = t_0$ ?

LÖSUNG:

Die stationäre Schrödingergleichung für  $0 \leq x \leq a$ , zusammen mit der allgemeinen Lösung, lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E\psi \quad (2)$$

$$\psi(x) = A \sin(kx) \quad (3)$$

mit  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ . Damit wäre die Randbedingung  $\psi(0) = 0$  erfüllt. Um die andere Randbedingung  $\psi(a) = 0$  zu erfüllen, muss  $ka = n\pi$  sein. Die normierten Eigenfunktionen von  $\hat{\mathcal{H}}$  lauten folglich:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (4)$$

mit den entsprechenden Energie-Eigenwerten:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (5)$$

Eine beliebige zeitabhängige Wellenfunktion ergibt sich aus einer Linearkombination der stationären Zustände, jeweils multipliziert mit dem dazugehörigen Zeitentwicklungsoperator:

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \psi_n(x) \quad (6)$$

Unsere Wellenfunktion (1) lässt sich folgendermaßen umschreiben:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[ 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{8}{5a}} \underbrace{\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)}_{\frac{1}{2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)} \quad (7)$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\psi(x, t = 0) = \frac{2}{\sqrt{5}} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{5}} \psi_2(x)}} \quad (8)$$

Der Zustand zu  $t = t_0$  ist also gegeben durch:

$$\begin{aligned}\psi(x, t_0) &= \frac{2}{\sqrt{5}} \exp\left(-\frac{iE_1 t_0}{\hbar}\right) \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{5}} \exp\left(-\frac{iE_2 t_0}{\hbar}\right) \psi_2(x) \\ &= \sqrt{\frac{8}{5a}} \exp\left(-\frac{i\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{2}{5a}} \exp\left(-\frac{i2\pi^2 \hbar t_0}{ma^2}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\end{aligned}\quad (9)$$

b) Was ist der Erwartungswert der Energie bei  $t = 0$  und  $t = t_0$ ?

LÖSUNG:

Für allgemeine Zustände  $\psi(x, t)$  lautet der Energie-Erwartungswert:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi_m | \hat{\mathcal{H}} | \psi_n \rangle A_n A_m^* \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iE_m t}{\hbar}\right) \\ &= \sum_{n,m} E_n A_n A_m^* \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{\delta_{nm}} \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iE_m t}{\hbar}\right) \\ &= \sum_n E_n |A_n|^2 = E_1 |A_1|^2 + E_2 |A_2|^2 = \frac{4E_1 + E_2}{5}\end{aligned}\quad (10)$$

Da die Zeitentwicklungsoperatoren sich aufheben, gilt sowohl für  $t = 0$  als auch für  $t = t_0$ :

$$\langle E \rangle = E_1 |A_1|^2 + E_2 |A_2|^2 = \frac{4E_1 + E_2}{5} = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{5ma^2}\quad (11)$$

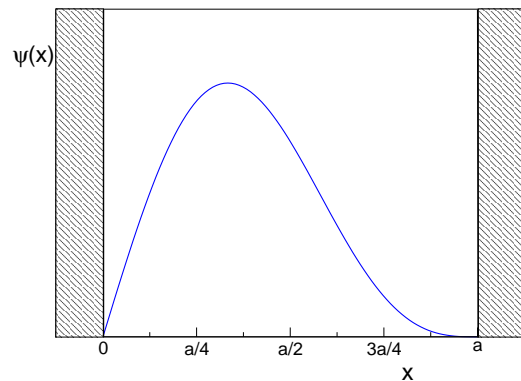
c) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei  $t = t_0$  innerhalb der linken Hälfte des Potentialtopfes ( $0 \leq x \leq a/2$ ) zu finden? Wie kann man sich so ein Ergebnis anschaulich klarmachen?

LÖSUNG:

$$\begin{aligned}P_{(0 \leq x \leq \frac{a}{2})} &= \int_0^{a/2} |\psi(x, t_0)|^2 dx \\ &= \frac{8}{5a} \int_0^{a/2} \left[ \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{4} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \left( e^{-\frac{3i\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}} + e^{\frac{3i\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}} \right) \right] dx \\ &= \frac{8}{5a} \left( \frac{a}{4} + \frac{a}{16} + \frac{2a}{3\pi} \cos\left(\frac{3\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}\right) \right) = \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos\left(\frac{3\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}\right)\end{aligned}\quad (12)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in der linken Kastenhälfte zu finden, schwankt um einen Mittelwert von 50% herum (plausibel). Durch die oszillierende  $\cos(c \cdot t_0)$  ( $c = \text{const.}$ ) Funktion ist die Wahrscheinlichkeit mal größer, mal kleiner, je nachdem wie lange man wartet.

Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist die Wellenfunktion asymmetrisch um den Punkt  $a/2$  verteilt (s. Abbildung rechts), deshalb ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf der linken Seite erstmal größer ( $P = 1/2 + 16/15\pi$ ) als auf der anderen, das Maximum der Wellenfunktion oszilliert aber mit der Zeit immer hin und her, weshalb nach gewisser Zeit die größere Fläche auf der anderen Seite sein kann, und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der linken Hälfte unter 50% absinkt.



## 1.2 1-dimensionales $\delta$ -Potential (\*\*)

Gegeben sei das eindimensionale  $\delta$ -förmige Potential:

$$V(x) = -\lambda\delta(x) \quad (\lambda > 0). \quad (13)$$

a) Welchen Anschlussbedingungen muss die Wellenfunktion  $\psi(x)$  bei  $x = 0$  genügen?

(Hinweis: Zeige, dass  $\frac{d\psi}{dx}$  bei  $x = 0$  unstetig ist, durch Integration der Schrödingergleichung über das infinitesimale Intervall  $[-\varepsilon, \varepsilon]$ .)

LÖSUNG:

Die stationäre Schrödingergleichung lautet:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (14)$$

Notwendigerweise ist die Wellenfunktion  $\psi(x)$  über  $\mathbb{R}$  stetig  $\Rightarrow$  Die Anschlussbedingung lautet:

$$\psi(0^+) = \psi(0^-) \text{ bzw. } \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(-\varepsilon) \quad (15)$$

Die Ableitung der Wellenfunktion ist aber in diesem Fall nicht stetig, da die 2. Ableitung einen unendlichen Sprung am Ursprung macht. Um dies mathematisch zu zeigen, integrieren wir die Schrödingergleichung (14) über das Intervall  $[-\varepsilon, \varepsilon]$ .

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{\mathcal{H}}\psi(x) dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi''(x) dx - \lambda \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \\ &\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] - \lambda\psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \end{aligned} \quad (16)$$

Dann machen wir den Grenzübergang  $\varepsilon \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] \right) - \lambda\psi(0) &= E \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx = 0 \\ \Rightarrow \underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(0^+) - \psi'(0^-)]}} &= \lambda\psi(0) \neq 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Da der linksseitige Grenzwert der ersten Ableitung bei  $x = 0$  nicht mit dem rechtsseitigen übereinstimmt, ist die Ableitung an der Stelle unstetig.

b) Es existiert genau ein gebundener Zustand in diesem Potential. Bestimme seinen Energie-Eigenwert und die normierte Wellenfunktion.

LÖSUNG:

Für einen gebundenen Zustand darf die Energie außerhalb vom Ursprung nicht größer als Null sein, da sonst  $E > V$  wäre, und damit kein gebundener Zustand vorliegen würde. Es gilt also:  $E < 0$ . In dem Bereich (also überall, außer am Ursprung) muss die Wellenfunktion bis ins Unendliche exponentiell abfallen. Wir nehmen also folgenden Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x} & \text{für } x < 0 \\ Be^{-\beta x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (18)$$

Wegen der Stetigkeit am Ursprung muss gelten:

$$Ae^{\beta 0} = Be^{-\beta 0} \Leftrightarrow \underline{\underline{A = B}} \quad (19)$$

Für  $x \neq 0$  gilt wegen  $V = 0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} A e^{\pm \beta x} = -\frac{\hbar^2 A}{2m} \beta^2 e^{\pm \beta x} \stackrel{!}{=} E A e^{\pm \beta x} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \quad (20)$$

Der Energie-Eigenwert ist also kleiner als Null, wie gefordert. Um aber das  $\beta$  zu ermitteln, betrachten wir die Stetigkeitsbedingung (17) für diesen Fall:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (A(-\beta) - A\beta) = \lambda A \Leftrightarrow \beta = \frac{m\lambda}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} \quad (21)$$

Als Letztes fehlt die Normierung der Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx &= A^2 \left[ \int_{-\infty}^0 e^{2\beta x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\beta x} dx \right] = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\beta x} dx \\ &= -\frac{2A^2}{2\beta} (e^{-2\beta x}) \Big|_0^{\infty} = \frac{A^2}{\beta} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow A = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar} \end{aligned} \quad (22)$$

Damit lautet die normierte Wellenfunktion, die den Zustand beschreibt:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\lambda|x|}{\hbar^2}\right) \quad (23)$$

c) Betrachte die Streuzustände (d.h.  $E > 0$ ) in diesem Potential. Unter dem Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R(E) e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ T(E) e^{ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (24)$$

berechne die Reflexionsamplitude  $R(E)$ , den Reflexionskoeffizienten  $r(E) = |R(E)|^2$ , die Transmissionsamplitude  $T(E)$  und den Transmissionskoeffizienten  $t(E) = |T(E)|^2$ .

**LÖSUNG:**

Wir betrachten wieder die Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion  $\psi$  und ihre Ableitung.

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \psi(0^+) &= \psi(0^-) \Leftrightarrow 1 + R(E) = T(E) \\ \text{(ii)} \quad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) &= -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(0) \\ &\Leftrightarrow ikT(E) - ik(1 - R(E)) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} (1 + R(E)) \end{aligned} \quad (25)$$

Dieses Gleichungssystem lösen wir jeweils nach  $R(E)$  und  $T(E)$  auf:

$$\begin{aligned} ik(1 + R(E) - 1 + R(E)) &= 2ikR(E) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} (1 + R(E)) \\ \Leftrightarrow R(E) \left[ 2ik + \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \right] &= -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \\ \Leftrightarrow R(E) &= -\frac{1}{1 + \frac{ik\hbar^2}{m\lambda}}; \quad T(E) = 1 + R(E) = \frac{1}{\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} + 1} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\Leftrightarrow r(E) = \frac{1}{1 + \frac{k^2\hbar^4}{m^2\lambda^2}} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\lambda^2}}; \quad t(E) = \frac{1}{\frac{m^2\lambda^2}{k^2\hbar^4} + 1} = \frac{1}{\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2 E} + 1} \quad (27)$$

Für große  $E$  konvergiert  $t(E)$  gegen 1 und  $r(E)$  geht gegen 0. Für hohe Energien nimmt die Transmissionswahrscheinlichkeit zu: Ein hochenergetisches Teilchen, das von links kommt, kann also nur schwer von diesem 'Schlagloch' zurückgeworfen werden. Für  $E \rightarrow 0$  konvergiert aber  $r$  gegen 1 und  $t$  geht gegen Null. Ein sehr niederenergetisches Teilchen kommt also kaum über das 'Schlagloch' drüber.

## 2 Harmonischer Oszillator

### 2.1 Auf- und Absteigeoperatoren(\*)

Betrachte einen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator mit den Eigenzuständen  $|n\rangle$ , wobei  $\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$ , sowie die Auf- und Absteigeoperatoren aus der Vorlesung mit ihrer Kommutatorrelation  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{1}$ . Zeige, dass  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ , und  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ , und damit, dass  $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ .

LÖSUNG:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right)|n\rangle = \hat{a}^\dagger\left[\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\right)\right]|n\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger\left[\hbar\omega\left((\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) + \frac{1}{2}\right)\right]|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)(\hat{a}^\dagger|n\rangle)\end{aligned}\quad (28)$$

Der Zustand  $(\hat{a}^\dagger|n\rangle)$  hat also einen Energie-Eigenwert, der zum höheren Eigenzustand  $|n+1\rangle$  gehört. Es gilt also:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle \quad (29)$$

Um die Normierung zu erhalten, bilden wir:

$$\begin{aligned}|\hat{a}^\dagger|n\rangle|^2 &= \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = (n+1)\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = n+1 \\ \Rightarrow \underline{\underline{\hat{a}^\dagger|n\rangle}} &= \underline{\underline{\sqrt{n+1}|n+1\rangle}}\end{aligned}\quad (30)$$

Beim Vernichtungsoperator verwenden wir einerseits:

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (1 + \hat{a}^\dagger\hat{a})|n\rangle = (n+1)|n\rangle \quad (31)$$

Andererseits wissen wir:

$$\hat{a}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \hat{a}\sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (32)$$

Gleichsetzen beider Terme ergibt:

$$\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}|n\rangle \quad \text{bzw.} \quad \underline{\underline{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}} \quad (33)$$

Damit weiß man, dass der Vernichtungsoperator keinen niedrigeren Zustand erzeugen kann, als der Grundzustand, denn  $\hat{a}|0\rangle = 0$ .

### 2.2 Kohärente Zustände (\*\*\*)

Die kohärenten Zustände  $|\alpha\rangle$  sind die Eigenzustände des Vernichtungsoperators eines harmonischen Oszillators der Masse  $m$  und der Frequenz  $\omega$ :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

a) Zeige, dass für jede komplexe Zahl  $\alpha$  die Identität

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

erfüllt ist, wobei  $|\alpha\rangle$  ein normierter Zustand ist, und  $|n\rangle$  die normierten Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind.

LÖSUNG:

Betrachte:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a} |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_{\nu+1} \sqrt{\nu+1} |\nu\rangle \quad (34)$$

Gleichzeitig gilt:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_{\nu} \alpha |\nu\rangle \quad (35)$$

Koeffizientenvergleich liefert:

$$c_{\nu+1} \sqrt{\nu+1} = c_{\nu} \alpha \quad \Leftrightarrow \quad c_{\nu+1} = \frac{\alpha c_{\nu}}{\sqrt{\nu+1}} \quad (36)$$

Damit hat man eine rekursive Vorschrift für die Koeffizienten  $c_{\nu}$ . Durch sukzessives Einsetzen in sich selbst bekommt man:

$$c_{\nu} = \frac{\alpha^{\nu} c_0}{\sqrt{\nu!}} \quad (37)$$

Aus  $|\alpha\rangle = \sum c_n |n\rangle$  folgt  $\langle\alpha| = \sum c_n^* \langle n|$ . Damit kann man den Zustand  $|\alpha\rangle$  normieren:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\alpha\rangle &= \sum_{n,m=0}^{\infty} c_n^* c_m \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{mn}} = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n} |c_0|^2}{n!} \\ &= |c_0|^2 \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!}}_{=\exp(|\alpha|^2)} \stackrel{!}{=} 1 \end{aligned} \quad (38)$$

Daraus erhält man den ersten Koeffizienten  $c_0$  der Entwicklung von  $|\alpha\rangle$  nach den Zuständen  $|n\rangle$ :

$c_0 = \exp(-|\alpha|^2/2)$ , woraus man aus der Rekursion alle anderen  $c_n$  bestimmen kann.

Aus (37) und (38) folgt somit:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_0 \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

b) Zeige, dass die kohärenten Zustände minimale Unschärfe haben, d.h.  $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}$ .

Hinweis: Verwende die folgenden Darstellungen durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}) \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^{\dagger} - \hat{a})$$

sowie:  $\langle\alpha|\hat{a}^{\dagger} = \langle\alpha|\alpha^*$

LÖSUNG:

Mit  $(\Delta\hat{x})^2 = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2$  und  $(\Delta\hat{p})^2 = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2$  ist die minimale Unschärfe des kohärenten Zustands zu zeigen:

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2} \quad (39)$$

1. Wir betrachten zuerst die Unschärfe des Ortsoperators  $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ :

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{x}^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger)^2 | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a}^2 | \alpha \rangle \right]\end{aligned}$$

Hier können wir die Kommutatorrelation von  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$  verwenden:  $\hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathbb{1}$

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ \langle \alpha | (\alpha^*)^2 | \alpha \rangle + \langle \alpha | \alpha^* \alpha | \alpha \rangle + \langle \alpha | (\alpha^* \alpha + 1) | \alpha \rangle + \langle \alpha | \alpha^2 | \alpha \rangle \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \underbrace{\langle \alpha | \alpha \rangle}_{=1} \left[ (\alpha^*)^2 + 2\alpha^* \alpha + \alpha^2 + 1 \right] \\ \Rightarrow \langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ (\alpha^* + \alpha)^2 + 1 \right]\end{aligned}\quad (40)$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* + \alpha)\quad (41)$$

Die Gleichung (40) zusammen mit dem Quadrat von (41) ergibt die Ortsunschärfe:

$$(\Delta \hat{x})^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ (\alpha^* + \alpha)^2 + 1 - (\alpha^* + \alpha)^2 \right] = \frac{\hbar}{2m\omega}\quad (42)$$

2. Die Ausrechnung von  $(\Delta \hat{p})^2$  verläuft ähnlich:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{p}^2 | \alpha \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 | \alpha \rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | \alpha \rangle \\ &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \alpha | \left( (\hat{a}^\dagger)^2 - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^2 - \mathbb{1} \right) | \alpha \rangle \\ &= \frac{m\omega\hbar}{2} \left[ 1 - (\alpha^* - \alpha)^2 \right]\end{aligned}\quad (43)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\alpha^* - \alpha)\quad (44)$$

(43) und (44) ergeben damit

$$(\Delta \hat{p})^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{m\omega\hbar}{2} \left[ 1 - (\alpha^* - \alpha)^2 + (\alpha^* + \alpha)^2 \right] = \frac{m\omega\hbar}{2}\quad (45)$$

3.

$$\Rightarrow (\Delta \hat{x})^2 (\Delta \hat{p})^2 = \frac{\hbar^2}{4} \Leftrightarrow \underline{\underline{\Delta \hat{x} \Delta \hat{p} = \frac{\hbar}{2}}}\quad (46)$$

Der kohärente Zustand  $|\alpha\rangle$  hat also die geringste Unschärfe, die mit der Heisenberg'schen Unschärferelation verträglich ist.

d) Berechne die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands  $|\alpha(t)\rangle$  und beweise, dass ein kohärenter Zustand mit der Zeit kohärent bleibt.

**LÖSUNG:**

Aus dem Separationsansatz der zeitabhängigen Schrödingergleichung wissen wir:

$$|\alpha(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |\alpha\rangle\quad (47)$$

dabei ist das Exponential eines beliebigen Operators gegeben durch:

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!} \Rightarrow \exp\left(-\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}\right) |n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{(-it)^k}{\hbar^k} \hat{\mathcal{H}}^k |n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{(-it)^k}{\hbar^k} (E_n)^k |n\rangle = \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (48)$$

Eingesetzt in den zeitabhängigen kohärenten Zustand:

$$|\alpha(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}\right) e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (49)$$

Die Eigenenergien des harmonischen Oszillators lauten:  $E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\alpha(t)\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \exp\left[-i\omega t \left(n + \frac{1}{2}\right)\right] |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} \left( e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right) \end{aligned}$$

Der Klammerterm sieht fast so aus wie ein kohärenter Zustand. Wir können ihn aber auf die exakte Darstellung bringen, indem wir in der mittleren  $e$ -Funktion  $|\alpha|$  durch  $|\alpha e^{-i\omega t}|$  ersetzen. (Da  $|e^{-i\omega t}| = 1$ , machen wir dadurch nichts falsch).

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \underbrace{\left( \exp\left(-\frac{|\alpha e^{-i\omega t}|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right)}_{=|\alpha e^{-i\omega t}\rangle} = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

Um die Kohärenz von  $|\alpha(t)\rangle$  zu beweisen, überprüfen wir ob er Eigenzustand des Vernichtungsoperators  $\hat{a}$  ist.

$$\begin{aligned} \hat{a} |\alpha(t)\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+1/2)} (\hat{a} |n\rangle) \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+1/2)} \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned}$$

Der Summand mit  $n = 0$  fällt raus, da  $\hat{a} |0\rangle = 0$ . Hier kann man einen Indexshift machen ( $n \rightarrow n + 1$ )

$$\begin{aligned} \hat{a} |\alpha(t)\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} e^{-i\omega t/2} e^{-i\omega t(n+1)} \sqrt{n+1} |n\rangle \\ &= \alpha e^{-i\omega t} \left[ e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+1/2)} |n\rangle \right] = \underline{\underline{\alpha e^{-i\omega t} |\alpha(t)\rangle}} \quad (50) \end{aligned}$$

$\Rightarrow |\alpha(t)\rangle$  ist Eigenzustand von  $\hat{a}$  zum Eigenwert  $\alpha e^{-i\omega t}$ , und somit ein kohärenter Zustand.

- 
- Zusatzaufgabe: Zeige, dass die Erwartungswerte von  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  im kohärenten Zustand jeweils eine klassische harmonische Bewegung vollziehen.

**LÖSUNG:**

Aus  $\hat{a} |\alpha(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega t} |\alpha(t)\rangle$  folgt (analog zum 2. Aufgabenteil):  $\langle \alpha(t) | \hat{a}^\dagger = \langle \alpha(t) | \alpha^* e^{i\omega t}$ . Da  $\alpha$  eine komplexe Zahl ist, können wir sie schreiben als Produkt aus Betrag und Phase:  $\alpha = |\alpha| e^{i\phi}$



Damit erhalten wir:

$$\hat{a}|\alpha(t)\rangle = \left(|\alpha\rangle e^{-i(\omega t - \phi)}\right)|\alpha(t)\rangle \quad \text{und} \quad \langle\alpha(t)|\hat{a}^\dagger = \langle\alpha(t)|\left(|\alpha\rangle e^{i(\omega t - \phi)}\right) \quad (51)$$

Der Erwartungswert des Ortsoperators im kohärenten Zustand lautet:

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}\rangle &= \langle\alpha(t)|\hat{x}|\alpha(t)\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\alpha(t)|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})|\alpha(t)\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} |\alpha| \left(e^{i(\omega t - \phi)} + e^{-i(\omega t - \phi)}\right) \underbrace{\langle\alpha(t)|\alpha(t)\rangle}_{=1} \\ &= \underline{\underline{\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\alpha| \cos(\omega t - \phi)}} \end{aligned} \quad (52)$$

Und für den Impulsoperator

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}\rangle &= \langle\alpha(t)|\hat{p}|\alpha(t)\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle\alpha(t)|(\hat{a}^\dagger - \hat{a})|\alpha(t)\rangle \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} |\alpha| \left(e^{i(\omega t - \phi)} - e^{-i(\omega t - \phi)}\right) \underbrace{\langle\alpha(t)|\alpha(t)\rangle}_{=1} \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} |\alpha| 2i \sin(\omega t - \phi) \end{aligned} \quad (53)$$

$$= \underline{\underline{-\sqrt{2\hbar m\omega} |\alpha| \sin(\omega t - \phi)}} \quad (54)$$

Die Erwartungswerte für Ort und Impuls verhalten sich demnach genauso wie eine klassische harmonische Oszillation. Insbesondere gilt auch:

$$m \frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} m |\alpha| \omega (-\sin(\omega t - \phi)) = -\sqrt{2\hbar m\omega} |\alpha| \sin(\omega t - \phi) = \underline{\underline{\langle\hat{p}\rangle}} \quad (55)$$

### 3 Allgemeine Sätze

#### 3.1 Ehrenfest-Theorem (\*)

Die Bedingung, dass man die Erwartungswerte quantenmechanischer Größen wie  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  wie klassische Größen behandeln kann, lautet (s. Vorlesung):

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) \quad (56)$$

- a) Leite mithilfe einer Taylorentwicklung von  $F(x)$  eine Bedingung ab, für die die geforderte Relation gilt.

**LÖSUNG:**

Zuerst muss man  $F(x)$  in eine Taylorreihe um  $\langle x \rangle$  entwickeln:

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle) \frac{\partial}{\partial x} F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} (x - \langle x \rangle)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} F(\langle x \rangle) + \dots \quad (57)$$

Dann können wir die ganze Gleichung mitteln, wobei man sich bei  $F(\langle x \rangle)$  die Mittelung sparen kann, da dies eine Zahl ist, die sich dadurch nicht verändert. Außerdem gilt:

$$\langle x - \langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle \langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0$$

Damit verschwindet der lineare Term der Taylorentwicklung.

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \left\langle \frac{1}{2} (x - \langle x \rangle)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} F(\langle x \rangle) \right\rangle + \dots \quad (58)$$

Wir sehen:  $\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle)$  genau dann, wenn die 2. und höhere Ableitungen der Kraft nach dem Ort verschwindet.

- b) Welche bekannten Systeme erfüllen diese Bedingung? Wird sie erfüllt in einem System bestehend aus einem Teilchen im Potential  $V(x) = \alpha x^4$ ? ( $\alpha > 0$ )

**LÖSUNG:**

Zwei Beispiele für solche Systeme sind sofort bekannt: Das *freie Teilchen*, wo die Kraft überall Null ist, und der *harmonische Oszillator*, wo die Kraft nur linear von  $x$  abhängt. Beim Fall  $V(x) = \alpha x^4$  ist die Kraft proportional zu  $x^3$ , daher verschwindet die zweite Ableitung der Kraft nach  $x$  nicht  $\Rightarrow$  Die Erwartungswerte von  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  genügen nicht den klassischen Bewegungsgleichungen.

### 3.2 Virialsatz (\*\*)

Der Virialsatz beschreibt den Zusammenhang zwischen den zeitlichen Mittelwerten der potentiellen und kinetischen Energie geschlossener physikalischer Systeme, z.B. eines Systems von Massenpunkten in einem endlichen Volumen, die einem Potential  $V$  ausgesetzt sind (Das Potential kann entweder auf gegenseitiger Wechselwirkung der Teilchen, oder auf einem externen Kraftfeld beruhen). Für ein Teilchen im Potential  $V$  gilt:

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \overline{\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V} \quad (59)$$

- a) Zeige, dass sich für ein System mit Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + V(\hat{\vec{r}}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$  die Operatorbeziehung

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}] = 2T - \hat{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{\vec{r}}) \quad (60)$$

ergibt.

**LÖSUNG:**

Mit der Produktregel für Kommutatoren ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}] &= \frac{i}{\hbar} \left( [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\vec{r}}] \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{r}} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\vec{p}}] \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left( \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\vec{r}} \right] \hat{\vec{p}} + \cancel{[V(\hat{\vec{r}}), \hat{\vec{r}}] \hat{\vec{p}}} + \hat{\vec{r}} \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\vec{p}} \right] + \hat{\vec{r}} [V(\hat{\vec{r}}), \hat{\vec{p}}] \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left( \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2, \hat{\vec{r}} \right] \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{r}} \left[ V(\hat{\vec{r}}), \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right] \right) \end{aligned} \quad (61)$$

Um diese beiden Kommutatoren auszuwerten, wendet man sie auf eine beliebige Testfunktion  $\Phi(\vec{r})$  an (Kommutatoren sind Operatoren!):

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2, \hat{\vec{r}} \right] \Phi(\vec{r}) &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{\vec{r}}] \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \sum_k \left( \hat{p}_k \overbrace{[\hat{p}_k, \hat{\vec{r}}]}^{=-i\hbar \hat{e}_k} + [\hat{p}_k, \hat{\vec{r}}] \hat{p}_k \right) \Phi(\vec{r}) \\ &= -\frac{2i\hbar}{2m} \hat{\vec{p}} \Phi(\vec{r}) = \underline{\underline{\left( \frac{\hbar}{im} \hat{\vec{p}} \right) \Phi(\vec{r})}} \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned}
\left[ V(\hat{r}), \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right] \Phi(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{i} V(\hat{r}) \vec{\nabla} \Phi(\hat{r}) - \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} (V(\vec{r}) \Phi(\vec{r})) \\
&= \frac{\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \left( V \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} - \frac{\partial V}{\partial x_k} \Phi - V \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \right) \hat{e}_k \\
&= \underline{\underline{i\hbar (\vec{\nabla} V) \Phi(\vec{r})}} \tag{63}
\end{aligned}$$

(62) und (63) eingesetzt in (61) ergibt:

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{r} \cdot \hat{p}] = \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\hbar}{im} \hat{p}^2 + i\hbar \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{r}) \right) = \frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{r}) = \underline{\underline{2T - \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{r})}} \tag{64}$$

- b) Zeige, dass der Erwartungswert des Kommutators  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}]$  in einem stationären Zustand gleich Null ist, und leite mithilfe der Operatorbeziehung (60) eine Relation analog zu (59) für die quantenmechanischen Erwartungswerte von T und V in einem stationären Zustand her (Quantenmechanischer Virialsatz).

**LÖSUNG:**

Sei  $|\psi_n\rangle$  ein stationärer Zustand des Hamiltonoperators  $\hat{\mathcal{H}}$  zum Eigenwert  $E_n$ :

$$\hat{\mathcal{H}} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \tag{65}$$

Da  $\hat{\mathcal{H}}$  Hermitesch ist, ist  $E_n$  reell, und es gilt genauso:

$$\langle \psi_n | \hat{\mathcal{H}} = \langle \psi_n | E_n \tag{66}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}
\langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}] \rangle &= \langle \psi_n | [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}] | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | (\hat{\mathcal{H}}\hat{A} - \hat{A}\hat{\mathcal{H}}) | \psi_n \rangle \\
&= \langle \psi_n | (E_n \hat{A} - \hat{A} E_n) | \psi_n \rangle = E_n \langle \psi_n | (\hat{A} - \hat{A}) | \psi_n \rangle = \underline{\underline{0}} \tag{67}
\end{aligned}$$

Setzen wir  $\hat{A} = \hat{r} \cdot \hat{p}$  folgt daraus:

$$\langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{r} \cdot \hat{p}] \rangle = 0 \tag{68}$$

Mit der Operatorbeziehung (60) gilt damit:

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{r} \cdot \hat{p}] \right\rangle &= \langle 2T - \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle = 2 \langle T \rangle - \langle \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle = 0 \\
\Rightarrow \underline{\underline{\langle T \rangle}} &= \underline{\underline{\frac{1}{2} \langle \hat{r} \cdot \vec{\nabla} V \rangle}} \tag{69}
\end{aligned}$$

- c) Wie lautet das Verhältnis  $\langle T \rangle / \langle V \rangle$  für einen harmonischen Oszillator in 3D?  
 $(V(\vec{r}) = m\omega^2 r^2 / 2)$

LÖSUNG:

Für  $V(\vec{r}) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$  gilt  $\vec{\nabla}V(\vec{r}) = m\omega^2 r \hat{e}_r$

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla}V(\vec{r}) = m\omega^2 r^2 \Rightarrow \langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle m\omega^2 r^2 \rangle = \langle V \rangle \Leftrightarrow \underline{\underline{\frac{\langle T \rangle}{\langle V \rangle} = 1}} \quad (70)$$

---