Institut für Theoretische Physik — Universität Heidelberg
C. Ewerz, E. Thommes — Sommersemester 2010

9. Übung zur Quantenmechanik

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: 15.06.2010
Besprechung der Präsenzaufgaben: 10./11.06.2010

Die 1. Klausur zur Quantenmechanik findet am Samstag, 12. Juni 2010, um 10 Uhr s. t. in INF 252 (Hörsaalgebäude Chemie), großer Hörsaal, statt. Es stehen Ihnen dann 120 Minuten zur Bearbeitung der Klausur zur Verfügung. Bitte bringen Sie (unbeschriebenes) Papier und Schreibgerät sowie einen Lichtbildausweis mit. Es sind keine weiteren Hilfsmittel zugelassen.

P 30 Drehimpulsalgebra (3 Punkte)

Wir wollen allgemeine Drehimpulsoperatoren betrachten, d. h. Operatoren $\vec{\mathbf{J}}$, für deren Komponenten gilt $[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l] = i\hbar\epsilon_{klm}\mathbf{J}_m$. Beispiele hierfür sind der Operator des Bahndrehimpulses $\vec{\mathbf{L}}$ mit $\mathbf{L}_k = \epsilon_{klm}\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m$ oder der Spinoperator $\vec{\mathbf{S}}$. Wir definieren $\mathbf{J}_\pm = \mathbf{J}_1 \pm i\mathbf{J}_2$.

(a) Zeigen Sie $\left[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_k\right] = 0$. Folgern Sie, daß $\left[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_\pm\right] = 0$.
Hinweis: Beachten Sie einen geeigneten früheren Hinweis.

(b) Zeigen Sie, daß $[\mathbf{J}_3, \mathbf{J}_\pm] = \pm\hbar\mathbf{J}_\pm$ und $[\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-] = 2\hbar\mathbf{J}_3$.

S 31 Ritzsches Variationsverfahren (4+3 Punkte)

Wir wollen das in der Vorlesung besprochene Ritzsche Variationsverfahren herleiten und an einem einfachen Beispiel erproben. Dazu wollen wir ein quantenmechanisches Problem mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ betrachten. Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß $\mathbf{H}$ ein diskretes Spektrum besitzt,

$$\mathbf{H}\,|\phi_n\rangle = E_n\,|\phi_n\rangle \qquad (n \in \mathbb{N})\,, \tag{1}$$

wobei die $|\phi_n\rangle$ orthonormierte Eigenzustände seien. E_0 sei die Energie des Grundzustands, die wir abschätzen wollen.

(a) Sei $|\psi\rangle$ ein beliebiger (nicht notwendig normierter) Zustand im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Zeigen Sie

$$E\,[\psi] = \frac{\langle\psi\,|\,\mathbf{H}\psi\rangle}{\langle\psi\,|\,\psi\rangle} \geq E_0\,. \tag{2}$$

Wann ist die Gleichheit erfüllt?
Hinweis: Betrachten Sie $\langle\psi\,|\,\mathbf{H}\psi\rangle$ und entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in das vollständige System $\{|\phi_n\rangle\}$ von Eigenzuständen.

Um ein Gefühl für die Qualität des Verfahrens zu bekommen, wollen wir es nun zunächst auf ein Problem anwenden, dessen exakte Lösung uns bekannt ist. In der Praxis wird man es natürlich gerade dort anwenden, wo dies nicht der Fall ist, z. B. beim Heliumatom.

(b) Wir betrachten das Kastenpotential ($a \in \mathbb{R}_+$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < a \\ \infty & \text{für } a \leq |x| \,. \end{cases} \tag{3}$$

Geben Sie die exakte Grundzustandsenergie sowie die zugehörige Wellenfunktion an. Berechnen Sie $E[\psi]$ für die Testfunktion

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \tag{4}$$

und zeigen Sie, daß dieser einfache Ansatz ein Ergebnis liefert, das nur um 1.3% vom exakten Wert abweicht. Welche wichtigen Eigenschaften hat diese Testfunktion mit der exakten Wellenfunktion gemeinsam?

(c) (optional) (+3 Punkte)
Um die Abschätzung aus (b) noch zu optimieren, betrachten wir jetzt eine Schar von Funktionen mit einem reellen Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\psi(x) = |a|^\lambda - |x|^\lambda \,. \tag{5}$$

Finden Sie eine optimale Abschätzung, indem Sie $E[\psi]$ durch Variation von λ minimieren. Wie stark weicht dieses Minumum vom exakten Wert ab?

S 32 Anharmonischer Oszillator (optional, +7 Punkte)

Der eindimensionale anharmonische Oszillator ist gegeben durch den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + W(x)\,, \tag{6}$$

worin $W(x)$ ein Polynom in x ist.

(a) Berechnen Sie für den speziellen Fall ($C \in \mathbb{R}$, $D \in \mathbb{R}_+$)

$$W(x) = Cx^3 + Dx^4 \tag{7}$$

die Energieverschiebung der Niveaus des harmonischen Oszillators in Störungstheorie 1. Ordnung. Bleibt das Spektrum unter Einfluß der Störung äquidistant?
Hinweis: Drücken Sie die Störung mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren $\mathbf{A}^\dagger$ und $\mathbf{A}$ aus. Beachten Sie, daß der Erwartungswert eines Produkts dieser Operatoren in einem reinen Zustand des ungestörten harmonischen Oszillators nur dann nicht verschwindet, wenn in dem Produkt gleich viele Auf- und Absteigeoperatoren auftreten.

(b) Betrachten Sie den harmonischen Oszillator

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{8}$$

mit der kleinen Störung ($\epsilon \ll 1$)

$$\mathbf{W} = W(x) = \frac{1}{2}\epsilon m\omega^2 x^2 \,. \tag{9}$$

Geben Sie zunächst die exakte Lösung an und entwickeln sie die Energieeigenwerte in eine Potenzreihe in ϵ. Berechnen Sie dann die Energieverschiebung in Störungstheorie bis zur 2. Ordnung und vergleichen Sie mit dem ersten Ergebnis.
Hinweis: Beachten Sie, daß in 2. Ordnung nur zwei andere Niveaus zur Energieverschiebung des n-ten Niveaus beitragen (welche?).

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/∼ewerz/qm10.html