7. Tutorium VU Quantentheorie I, 01.12.2023 ❄

1. Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m im Potential des harmonischen Oszillators. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \tag{1}$$

In der Vorlesung wurde bereits die Transformation zur dimensionslosen zeitunabhängigen Schrödingergleichung gezeigt. Dabei wurde eine Darstellung in der Ortsbasis gewählt. In dieser Aufgabe wollen wir einen allgemeineren Zugang wählen. Wir betrachten hier die zeitabhängige Schrödingergleichung und wollen nur die fundamentale und basisunabhängige Kommutatorrelation des Orts- und Impulsoperators zugrundelegen. Dazu führen wir die dimensionslosen Größen

$$\bar{\hat{x}} = \hat{x}/x_\mathrm{s}, \quad \bar{\hat{p}} = \hat{p}/p_\mathrm{s}, \quad \bar{t} = t/t_\mathrm{s}, \quad \bar{\hat{H}} = \hat{H}/E_\mathrm{s}, \tag{2}$$

ein, wobei die Skalierungsfaktoren x_s, p_s, t_s und E_s als Funktion der Systemparameter m, ω und $\hbar$ zu bestimmen sind.

   (a) Welche beiden Bedingungen ergeben sich, wenn man ausgehend von Glg. (1) fordert, dass sich der skalierte Hamiltonoperator als

$$\bar{\hat{H}} = \frac{\bar{\hat{x}}^2}{2} + \frac{\bar{\hat{p}}^2}{2} \tag{3}$$

   schreiben lässt?
   Welche weitere Bedingung ergibt sich, wenn man fordert, dass sich die zeitabhängige Schrödingergleichung als

$$i\partial_{\bar{t}} \left|\Psi(\bar{t})\right\rangle = \bar{\hat{H}} \left|\Psi(\bar{t})\right\rangle \tag{4}$$

   schreiben lässt?

   (b) Die Schrödingergleichung alleine ist somit nicht ausreichend, um alle vier unbekannten Skalierungsfaktoren zu bestimmen. Zusätzlich fordern wir, dass sich der Kommutator des Orts- und Impulsoperators auf folgende dimensionslose Form reduziert:

$$\left[\bar{\hat{x}}, \bar{\hat{p}}\right] = i. \tag{5}$$

   Bestimmen Sie nun die Skalierungsfaktoren als Funktion der Systemparameter.

   (c) Überprüfen Sie, dass gilt

$$\bar{\hat{x}}^2 + \bar{\hat{p}}^2 = (\bar{\hat{x}} - i\bar{\hat{p}})(\bar{\hat{x}} + i\bar{\hat{p}}) + 1 \tag{6}$$

   und zeigen Sie damit, dass sich der skalierte Hamiltonoperator schreiben lässt als

$$\bar{\hat{H}} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}, \tag{7}$$

   wobei der Erzeugungsoperator definiert ist als $\hat{a} = (\bar{\hat{x}} + i\bar{\hat{p}})/\sqrt{2}$.

(d) Transformieren Sie zurück auf dimensionsbehaftete Größen und zeigen Sie, dass sich $\hat{H}$ schreiben lässt als

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{8}$$

(e) Der Erzeugungs- und Vernichtungsoperator sind per Definition dimensionslos. Überprüfen Sie, dass $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$ gilt, in dem Sie diesen Kommutator

(i) auf den Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ zurückführen,

(ii) auf den Kommutator $\left[\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{p}}\right] = i$ zurückführen.

2. Die Ortsdarstellung eines Energieeigenzustandes des harmonischen Oszillators ist

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

wobei $H_n(x)$ das n-te Hermite-Polynom bezeichnet.

(a) Rechnen Sie in der Ortsbasis explizit nach, dass gilt

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

(ii) $\hat{a}\, |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle$.

Stellen Sie dazu den Erzeuger (Vernichter) als Linearkombination des Orts- und Impulsoperators dar und verwenden Sie

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \tag{9}$$

(b) Berechnen Sie explizit die Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ des harmonischen Oszillators, indem Sie die Differentialgleichung $\hat{a}\,|0\rangle = 0$ in der Ortsbasis lösen.

(c) Berechnen Sie explizit $\psi_1(x) = \langle x|1\rangle$, indem Sie $\hat{a}^\dagger$ auf $|0\rangle$ in der Ortsbasis wirken lassen.

3. Der Paritätsoperator $\hat{\Pi}$ führt eine räumliche Spiegelung am Punkt $x = 0$ durch. Er ist definiert durch seine Wirkung auf Eigenzustände des Ortsoperators,

$$\hat{\Pi}\, |x\rangle = |-x\rangle\,, \tag{10}$$

mit

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x), \quad \langle -x|\psi\rangle = \psi(-x). \tag{11}$$

(a) Zeigen Sie, dass $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1}$ und $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger$.

(b) Zeigen Sie, dass $\hat{\Pi}$ nur Eigenwerte $\pi = \pm 1$ hat.

(c) Wir betrachten nun den Erwartungswert $\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle$ eines beliebigen Operators $\hat{Q}$ zum Zustand $|\psi\rangle$. Wir kennen bereits das Transformationsverhalten eines Zustands unter dem Paritätsoperator,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{\Pi}} |\tilde{\psi}\rangle = \hat{\Pi}\,|\psi\rangle\,. \tag{12}$$

Leiten Sie unter der Annahme, dass der Erwartungswert invariant unter einer Paritätstransformation von Zustand und Operator ist,

$$\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle\tilde{\psi}|\hat{\tilde{Q}}|\tilde{\psi}\rangle\,, \tag{13}$$

das Transformationsverhalten für Operatoren, $\hat{Q} \xrightarrow{\hat{\Pi}} \hat{\tilde{Q}}$, her.

(d) Zeigen Sie mit der Transformationregel aus (c), dass Orts- und Impulsoperator ungerade Parität besitzen,

$$\hat{\tilde{x}} = -\hat{x}, \quad \hat{\tilde{p}} = -\hat{p}. \tag{14}$$

Entspricht das Ihrer klassischen Erwartung für eine Spiegelung bei $x = 0$?

(e) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator, $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{x})$, für symmetrische Potentiale, $V(\hat{x}) = V(-\hat{x})$, mit dem Paritätsoperator kommutiert,

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0. \tag{15}$$

Aus Teilaufgabe (e) folgt nun, dass in symmetrischen Potentialen gemeinsame Eigenzustände zum Hamiltonoperator und Paritätsoperator gefunden werden können. Wir wollen diese Eigenschaft nun an einem konkreten Potential ausnutzen. Dazu betrachten wir ein Teilchen der Masse m im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ m\omega^2 x^2/2, & x > 0. \end{cases} \tag{16}$$

(f) Stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung in Ortsdarstellung auf und geben Sie die Randbedingung für die Eigenfunktionen an.

(g) Skizzieren Sie (ohne Rechnung) die Wellenfunktionen der vier niedrigsten Eigenzustände des gewöhnlichen harmonischen Oszillators ohne Wand.

(h) Geben Sie auf Basis von Symmetrieüberlegungen alle Eigenfunktionen und Eigenenergien für das Potential $V(x)$ in Glg. (16) an. Welchen Wert hat die Grundzustandsenergie dieses Potentials?

Zu kreuzen (online im *TUWEL*-Kurs zur LVA): 1/2/3abcde/3fgh.