Institut für Theoretische Physik
H. G. Dosch

Universität Heidelberg
Sommersemester 2001

4. Übung zur Quantenmechanik

Abgabe der Hausübungen: 23. Mai in der Vorlesung
Besprechung der Präsenzübungen: 18. Mai

P 12 Harmonischer Oszillator (3 Punkte)

(a) Sei $\mathbf{B}$ ein selbstadjungierter Operator, und seien $|\phi_1\rangle$ und $|\phi_2\rangle$ zwei Eigenzustände mit Eigenwerten b_1 und b_2. Es gelte $b_1 \neq b_2$. Zeigen Sie, daß $|\phi_1\rangle$ und $|\phi_2\rangle$ orthogonal sind. Welche Anwendung hat dies im Fall des harmonischen Oszillators?

(b) Berechnen Sie den ersten angeregten Zustand $\psi_1(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators aus der Wellenfunktion $\psi_0(x)$ des Grundzustands.

(c) Der Hamiltonoperator des dreidimensionalen anisotropen harmonischen Oszillators ist

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i=1}^{3}\frac{m\omega_i^2}{2}x_i^2\,, \tag{1}$$

wobei ω_i drei Konstanten sind. Geben Sie die möglichen Zustände des Systems und deren Energieniveaus an. (Hinweis: Der eindimensionale harmonische Oszillator darf hier als bekannt vorausgesetzt werden.)

H 13 Kontinuitätsgleichung (5 Punkte)

Wir betrachten die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \mathbf{H}|\psi\rangle \tag{2}$$

im Ortsraum. Der Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\,, \tag{3}$$

wobei wir annehmen, daß das Potential V reellwertig sei. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion $\rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2$ kann als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Es sei

$$\vec{J}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)\,. \tag{4}$$

Zeigen Sie durch Kombination der Schrödingergleichung mit ihrer komplex konjugierten, daß ρ und $\vec{J}$ die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J} \tag{5}$$

erfüllen. Welche Interpretation hat demzufolge $\vec{J}$? Zeigen Sie weiter, daß die Gesamtwahrscheinlichkeit $\int_{\mathbf{R}^3} \rho(\vec{x}, t) d^3x$ zeitlich konstant ist.

H 14 Harmonischer Oszillator II (5 Punkte)

Wir betrachten den eindimensionalen harmonischen Oszillator. Der Absteigeoperator $\mathbf{A}$ ist definiert (vgl. Vorlesung) als

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\mathbf{Q}} + i\hat{\mathbf{P}} \right) , \tag{6}$$

worin mit der Masse m, einer Konstanten ω und $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\hat{\mathbf{Q}} = \frac{\mathbf{Q}}{b} , \qquad \hat{\mathbf{P}} = \frac{b}{\hbar} \mathbf{P} . \tag{7}$$

Es wird definiert $\mathbf{N} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}$. Der Hamiltonoperator ist dann

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \left(\mathbf{N} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) . \tag{8}$$

Die normierten Eigenzustände von $\mathbf{N}$ zu den Eigenwerten $\nu \in \mathbb{N}$ seien $|\psi_\nu\rangle$.

(a) Berechnen Sie $[\mathbf{N}, \mathbf{A}]$ und $\left[\mathbf{N}, \mathbf{A}^\dagger\right]$.

(b) Zeigen sie, daß $\mathbf{A}^\dagger |\psi_\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1}\, |\psi_{\nu+1}\rangle$ und

$$\left(\mathbf{A}^\dagger\right)^n |\psi_0\rangle = \sqrt{n!}\, |\psi_n\rangle . \tag{9}$$

(c) Zeigen Sie

$$\langle \psi_n \mid \mathbf{Q}\psi_n \rangle = 0 , \qquad \langle \psi_n \mid \mathbf{P}\psi_n \rangle = 0 \tag{10}$$

und berechnen Sie das Schwankungsprodukt $(\Delta\mathbf{Q})(\Delta\mathbf{P})$ im reinen Zustand $|\psi_n\rangle$.

Schließlich betrachten wir den isotropen dreidimensionalen harmonischen Oszillator. Die Eigenzustände sind $|\psi_{n_1,n_2,n_3}\rangle = |\psi_{n_1}\rangle \otimes |\psi_{n_2}\rangle \otimes |\psi_{n_3}\rangle$. Der dreidimensionale Ortsoperator sei $\vec{\mathbf{Q}} = (\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{Q}_3)$.

(d) Wann ist

$$\left\langle \psi_{n_1,n_2,n_3} \,\middle|\, \mathbf{Q}_i \psi_{n_1',n_2',n_3'} \right\rangle \neq 0 \tag{11}$$

und welchen Wert hat dieser Ausdruck dann?

H 15 Spezifische Wärme des Festkörpers nach Einstein (5 Punkte)

In der statistischen Mechanik findet man, daß der Dichteoperator $\boldsymbol{\rho}$ für einen harmonischen Oszillator im Wärmebad der Temperatur T berechnet werden kann als

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \mathbf{H}) \,, \tag{12}$$

worin $\beta = (kT)^{-1}$, k die Boltzmann–Konstante und $Z = \mathrm{tr}\,[\exp(-\beta \mathbf{H})]$ die kanonische Zustandssumme sind. $\mathbf{H}$ ist der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators (siehe Aufg. H 14). Zeigen Sie, daß der Mittelwert der Energie sich ergibt als

$$\bar{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \,. \tag{13}$$

Berechnen Sie Z (Hinweis: geometrische Reihe) und daraus die mittlere Energie $\bar{E}$ als Funktion von β. Bestimmen Sie weiter die spezifische Wärme des harmonischen Oszillators, $C_V(T) = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}$. Diskutieren Sie die Grenzwerte kleiner und großer Temperaturen und skizzieren Sie C_V als Funktion der Variablen $\tau = \frac{kT}{\hbar\omega}$.

Zur Interpretation:
Die Gitterschwingungen eines Festkörpers (die Phononen) können als unabhängige Oszillatoren aufgefaßt werden. Ihre Zahl ist durch die Zahl N der Gitterpunkte (d. h. der Atome) und durch die Raumdimension gegeben. In drei Dimensionen hat ein Kristallgitter demzufolge $3N$ unabhängige Schwingungsmoden. Einsteins Annahme dabei war, daß diese Schwingungen alle durch harmonische Oszillatoren *gleicher Kreisfrequenz* ω realisiert sind. Die spezifische Wärme des Festkörpers kann dann analog zu unserer obigen Rechnung bestimmt werden, das Ergebnis ist dasselbe bis auf einen zusätzlichen Faktor $3N$. Einsteins Resultat gibt die spezifische Wärme eines typischen Festkörpers qualitativ gut wieder und ist verträglich mit dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik. Debye verbesserte die Einsteinsche Theorie der spezifischen Wärme noch, indem er statt einer *festen* Kreisfrequenz der Oszillatoren ein *kontinuierliches Frequenzspektrum* der Schwingungsmoden unterhalb eines cut–off ω_D annahm.

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qmueb01.html
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~dosch/qm01.html