Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 7

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 31. Mai - 04. Juni 2021
Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!
Nutzen Sie dazu den Link `https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291`

1. *Verständnisfragen*

a) Vergleichen Sie die Herleitungen des Noether-Theorems in der klassischen und in der Quantenmechanik. Können Sie die quantenmechanische auf die klassisch-mechanische Herleitung übertragen?

b) Können Sie die Generatoren der Galilei-Gruppe angeben?

c) Diskutieren Sie den Unterschied zwischen Gruppen, ihren Darstellungen und Operatoren, die Gruppenoperationen im Hilbert-Raum ausführen.

2. *Harmonischer Oszillator: Kohärente Zustände*

Betrachten Sie die normierten Energieeigenzustände des eindimensionalen harmonischen Oszillators $|n\rangle$ mit $n \in \mathbb{N}_0$. Sei ein sog. *kohärenter* bzw. *quasiklassischer Zustand* gegeben durch

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \exp\left(\alpha \hat{a}^\dagger\right) |0\rangle \,,$$

wobei $\hat{a}^\dagger$ der Aufsteigeoperator ist und $\alpha \in \mathbb{C}$. Für kohärente Zustände sind die Orts- und Impulsunschärfen zeitlich konstant und das Schwankungsprodukt $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ ist minimal. D.h. kohärente Zustände zerfließen weder im Orts- noch im Impulsraum.

a) Zeigen Sie, dass $|\alpha\rangle$ normiert ist.

b) Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeiten $|\langle n \,|\, \alpha \rangle|^2$ einer Poisson-Verteilung folgen,

$$|\langle n \,|\, \alpha \rangle|^2 = \frac{\lambda^n}{n!} \mathrm{e}^{-\lambda} \,.$$

Welchen Wert hat λ? Welche Wahrscheinlichkeit gibt $|\langle n \,|\, \alpha \rangle|^2$ an?

c) Zeigen Sie, dass $|\alpha\rangle$ ein Eigenzustand zum Absteigeoperator $\hat{a}$ ist, und bestimmen Sie den zugehörigen Eigenwert.

d) Der Oszillator sei zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\alpha_0\rangle$ mit $\alpha_0 = \rho\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$, wobei $\rho \in \mathbb{R}_+$ und $0 \le \phi < 2\pi$. Zeigen Sie, dass der Zustand für beliebige t ebenfalls ein kohärenter Zustand ist, der als $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2} |\alpha(t)\rangle$ geschrieben werden kann. Bestimmen Sie $\alpha(t)$ in Abhängigkeit von ρ, ϕ, ω und t.

e) Bestimmen Sie mit der Lösung von d) die Zeitentwicklung der Erwartungswerte von $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{p} \rangle$. Erklären Sie damit die Bezeichnung „quasiklassischer Zustand".
Hinweis: Drücken Sie $\hat{x}$ und $\hat{p}$ wieder durch die Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{a}^\dagger$ und $\hat{a}$ aus.

f) Bestimmen Sie die Erwartungswerte der Operatoren $\hat{x}^2$ und $\hat{p}^2$.

3. *Spezifische Wärme des Festkörpers nach Einstein*

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

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{H}),$$

worin $\beta = (k_\mathrm{B}T)^{-1}$, k_B die Boltzmann-Konstante und $Z = \mathrm{tr}\left[\exp(-\beta\hat{H})\right]$ die kanonische Zustandssumme sind. $\hat{H}$ ist der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators.

a) Zeigen Sie, dass der Mittelwert der Energie sich ergibt als

$$\bar{E} = \langle\hat{H}\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z.$$

b) Berechnen Sie Z und daraus die mittlere Energie $\bar{E}$ als Funktion von β.

c) Bestimmen Sie weiter die spezifische Wärme des harmonischen Oszillators

$$C_V(T) = \frac{\partial\bar{E}}{\partial T}.$$

d) Diskutieren Sie die Grenzwerte kleiner und großer Temperaturen und skizzieren Sie C_V als Funktion der Variablen $\tau = \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}$.

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 Raumdimensionen gegeben. In drei Dimensionen hat ein Kristallgiter 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 vertraglich mit dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik. Debye verbesserte die Einstein'sche Theorie der spezifischen Wärme noch, indem er statt einer *festen* Kreisfrequenz der Oszillatoren ein *kontinuierliches Frequenzspektrum* der Schwingungsmoden unterhalb eines cutoff ω_D annahm.

4. *Hellmann-Feynman-Theorem und der Virialsatz*

In dieser Aufgabe wollen wir das Hellmann-Feynman-Theorem, das 1936 bzw. 1939 von Hans Gustav Adolf Hellmann und Richard Feynman unabhängig gefunden wurde, beweisen und dann nutzen, um den Virialsatz für homogene Potentiale herzuleiten.

a) Zeigen Sie, dass für einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator $\hat{H}(\lambda)$, der von einem Parameter λ abhängt,

$$\left\langle n\left|\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\right|n\right\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial\lambda}$$

gilt. Hier sind $|n\rangle$ die normierten Eigenzustände des Hamilton-Operators zum Eigenwert E_n.

Im Folgenden betrachten wir den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x}),$$

wobei $V(\vec{x})$ ein homogenes Potential vom Grad k ist, d.h. $V(\lambda\vec{x}) = \lambda^k V(\vec{x})$. Außerdem sei $\psi(\vec{x})$ eine normierte Eigenfunktion dieses Hamilton-Operators zum Eigenwert E.

b) Zeigen Sie, dass dann die Funktion

$$\psi_\lambda(\vec{x}) = \lambda^{3/2}\psi(\lambda\vec{x})$$

für jeden Wert $\lambda \neq 0$ normiert und eine Eigenfunktion zum Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2}\nabla^2 + \lambda^k V(\vec{x})$$

zum selben Eigenwert E wie $\psi(\vec{x})$ ist.
Hinweis: Benutzen Sie die Substitution $\vec{y} = \lambda\vec{x}$.

c) Nutzen Sie das Hellmann-Feynman-Theorem aus Aufgabenteil a), um mit ihrem Ergebnis aus Teil b) den Virialsatz für homogene Potentiale herzuleiten.
Hinweis: Nutzen Sie aus, dass der Eigenwert E unabhängig vom Parameter λ ist und wenden Sie die Hellmann-Feynman-Formel für $\lambda = 1$ an.