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 $0 \leq \phi < 2\pi$. 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 $\beta = (k_B T)^{-1}$, 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 $\tau = \frac{k_B T}{\hbar\omega}$.

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.

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

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

Übungsblatt 7: Lösung

1. *Verständnisfragen*

a) In der Quantenmechanik betrachten wir eine Symmetrie-Operation, die durch einen zeitunabhängigen, unitären Operator $\hat{U}$ dargestellt werden soll. Weiter sei $|\psi\rangle$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Dann ist auch $\hat{U}|\psi\rangle$ eine Lösung und man kann folgern, dass $\hat{U}$ mit dem Hamilton-Operator des Systems vertauscht. Jeder unitäre Operator kann im Allgemeinen als $\hat{U} = \exp\left(\mathrm{i}\epsilon\hat{G}\right)$ dargestellt werden, wobei $\hat{G}$ ein hermitescher Operator ist und als erzeugender Operator bezeichnet wird. $\hat{G}$ entspricht einer Observablen. Da $\hat{U}$ mit dem Hamilton-Operator vertauscht, tut dies auch $\hat{G}$. Wegen der Heisenberg-Gleichung entspricht $\hat{G}$ einer Erhaltungsgröße, wie Sie es zum Beispiel mit dem Impulsoperator bei den räumlichen Translationen gesehen haben.
In der klassischen Mechanik betrachten wir die infinitesimale Transformation

$$q_i \to q_i' = q_i + \epsilon\tilde{q}_i(t, q, \dot{q}), \qquad t \to t' = t + \epsilon\tilde{t}(t, q, \dot{q})$$

und fragen, ob diese die Bewegungsgleichungen erhält. Dies ist der Fall, wenn sich die Wirkung höchstens um eine Konstante ändert. Dies lässt sich auf folgende Gleichung übertragen

$$\int_{t_0'}^{t_1'} \mathrm{d}t' L\left(t', q', \frac{\mathrm{d}q'}{\mathrm{d}t'}\right) = \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t L(t, q, \dot{q}) + \epsilon \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t},$$

wobei die Änderung der Wirkung infinitesimal klein sein muss, da die Transformation infinitesimal ist. Die Funktion f ist hier beliebig, lässt aber einen Schluss auf die mit der Symmetrie einhergehende erhaltene Größe zu.
In beiden Herleitungen wird überprüft, ob sich die Bewegungsgleichungen unter einer infinitesimalen, kontinuierlichen Transformation ändern.

b) Die Galilei-Gruppe ist der nicht-relativistische Grenzfall der Poincaré-Gruppe. Die Lie-Algebra wird aufgespannt durch folgende Operatoren

- $\hat{H}$, den Hamilton-Operator, als Generator für Zeit-Translationen
- $\hat{\vec{p}}$, den Impuls-Operator, als Generator für räumliche Translationen
- $-m\hat{\vec{x}}$, proportional Orts-Operator, als Generator der Boosts
- $\hat{L}_{ij} = \hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i$, ein antisymmetrischer Tensor aus dem Drehimpuls, als Generator der räumlichen Drehungen

Mehr Informationen dazu finden Sie unter: `https://en.wikipedia.org/wiki/Galilean_transformation#Origin_in_group_contraction`, `https://en.wikipedia.org/wiki/Representation_theory_of_the_Galilean_group`, und zu Boosts `https://pages.uoregon.edu/soper/QuantumMechanics/boosts.pdf`

c) Unter einer Gruppe G verstehen wir eine Menge mathematischer Objekte, zwischen denen eine Verknüpfung $\circ : G \times G \to G$ besteht. Die Verknüpfung ist assoziativ und es existieren ein neutrales sowie zu jedem Gruppenelement ein inverses Element. Falls die Reihenfolge der Elemente in der Verknüpfung vertauschbar ist, dann heißt die Gruppe außerdem Abel'sch.
Die Darstellung einer Gruppe ist ein Homomorphismus in die Gruppe der Automorphismen einer Struktur V. Wir betrachten hier *lineare* Darstellungen, die die Gruppe G in die allgemeine

lineare Gruppe $GL(N, K)$ abbilden. Dies sind die $N \times N$-Matrizen mit Koeffizienten aus dem Körper $K = \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$. Also ist die Darstellung die Abbildung $D : G \to GL(N, K)$. Operatoren auf dem Hilbertraum können als komplexwertige Matrizen dargestellt werden.
Der Unterschied zwischen Gruppen und ihrer Darstellung liegt darin, dass die Gruppe ohne ihre Darstellung existiert und für dieselbe Gruppe verschiedene Darstellungen möglich sind. Die Darstellung wird erst durch die Definition eines Koordinatensystems sinnvoll und ermöglicht eine konkrete Ausführung von Gruppenoperationen.
In der Quantenmechanik müssen Gruppenoperationen durch hermitesche Operatoren dargestellt werden, die quantenmechanische Zustände in ihrer Abhängigkeit von den Koordinaten transformieren. In der klassischen Mechanik können dagegen die Phasen- oder Ortsraumkoordinaten direkt transformiert werden.

2. *Harmonischer Oszillator: Kohärente Zustände*

Das Leben wird ein bisschen einfacher, wenn man erkennt, dass

$$\exp\left(\alpha \hat{a}^\dagger\right)|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\hat{a}^\dagger\right)^n}{n!}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,.$$

a) Die Berechnung der Norm liefert

$$\langle \alpha \,|\, \alpha \rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*\,m}}{\sqrt{m!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle m \,|\, n \rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2}\,\mathrm{e}^{|\alpha|^2} = 1.$$

b) Das Skalarprodukt $\langle n \,|\, \alpha \rangle$ ist gegeben durch

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

Die Wahrscheinlichkeiten $|\langle n \,|\, \alpha \rangle|^2$ sind demnach gegeben durch

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

$|\langle n \,|\, \alpha \rangle|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das System bei einer Messung im n-ten Energieeigenzustand zu finden.

c) Falls $|\alpha\rangle$ ein Eigenzustand zu $\hat{a}$ ist, muss gelten $\hat{a}\,|\alpha\rangle = \lambda_{\hat{a}}\,|\alpha\rangle$, wobei $\lambda_{\hat{a}}$ ein Eigenwert ist. Einsetzen liefert

$$\begin{aligned}\hat{a}\,|\alpha\rangle &= \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\hat{a}\,|n\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ &= \alpha\,\mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}|n-1\rangle = \alpha\,\mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}}|m\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,.\end{aligned}$$

Bei obiger Rechnung wurde berücksichtigt, dass $\hat{a}\,|0\rangle = 0$. Für den zugehörigen Eigenwert $\lambda_{\hat{a}}$ gilt somit $\lambda_{\hat{a}} = \alpha$.

d) Da die Zustände $|n\rangle$ Eigenzustände zum Hamilton-Operator sind, ist deren Zeitentwicklung durch $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,|n\rangle$ mit $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ gegeben, sodass mit $|\psi(0)\rangle = |\alpha_0\rangle$ gilt, dass

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,|n\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-|\alpha_0|^2/2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}\,|n\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\,\mathrm{e}^{-|\alpha(t)|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t)]^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha(t) = \alpha_0\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \rho\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \phi)} \quad \text{und} \quad |\alpha_0|^2 = |\alpha(t)|^2 \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\,|\alpha(t)\rangle\,.
\end{aligned}$$

e) Orts- und Impulsoperatoren sind nach Aufgabe 1c) als Funktion von Auf- und Absteigeoperatoren gegeben durch

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \qquad \text{und} \qquad \hat{p} = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger).$$

Da nach Aufgabenteil c) gilt, dass $\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle$, ist $\langle\alpha(t)\,|\,\hat{a}\,|\,\alpha(t)\rangle = \alpha(t)$. Es gilt dann aber auch, dass $\langle\alpha(t)|\,\hat{a}^\dagger = \alpha^*\,\langle\alpha(t)|$ und somit $\langle\alpha(t)\,|\,\hat{a}^\dagger|\,\alpha(t)\rangle = \alpha^*(t)$. Somit ist

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle = \langle\alpha(t)\,|\,\hat{x}\,|\,\alpha(t)\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle\alpha(t)\,|\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\,|\,\alpha(t)\rangle \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\alpha(t) + \alpha^*(t)] \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\rho\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \phi)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \phi)}\right] \\
&= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\rho\cos(\omega t - \phi) \equiv x_0\cos(\omega t - \phi).
\end{aligned}$$

Analog findet man

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}\rangle = \langle\alpha(t)\,|\,\hat{p}\,|\,\alpha(t)\rangle &= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\langle\alpha(t)\,|\,(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)\,|\,\alpha(t)\rangle \\
&= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\alpha(t) - \alpha^*(t)] \\
&= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\rho\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \phi)} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t - \phi)}\right] \\
&= -\sqrt{2m\hbar\omega}\,\rho\sin(\omega t - \phi) \equiv -p_0\sin(\omega t - \phi).
\end{aligned}$$

Dies sind die Lösungen der Bewegungsgleichung eines klassischen harmonischen Oszillators; daher kommt der Begriff *quasiklassische Zustände*.

f) Um die Erwartungswerte von $\hat{x}^2$ und $\hat{p}^2$ auszurechnen, drücken wir sie wieder durch die Leiteroperatoren $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ aus. Dabei nutzen wir $\hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$. So ergibt sich für den Operator $\hat{x}^2$ das Folgende

$$\hat{x}^2 = \frac{l^2}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 + 1\right).$$

Der Erwartungswert ist dann

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle\hat{x}\rangle^2 + \frac{l^2}{2}.$$

Analog können wir für den Impulsoperator rechnen und finden

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \hat{p} \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{2l^2}.$$

Die Unschärfen in den kohärenten Zuständen sind zeitlich konstant

$$(\Delta x)^2 = \frac{l^2}{2}, \qquad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2l^2}$$

und insbesondere ist das Schwankungsprodukt

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p) = \frac{\hbar}{2}$$

und nimmt somit den durch die Heisenberg'sche Unschärferelation kleinsten erlaubten Wert an.

3. *Spezifische Wärme des Festkörpers nach Einstein*

a) Erwartungswerte eines Operators in Gemischen werden durch Spurbildung mit dem Dichteoperator gebildet. Dann ist der Mittelwert der Energie

$$\begin{aligned}
\bar{E} = \langle \hat{H} \rangle &= \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\right) = \operatorname{tr}\left(\frac{1}{Z}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,\hat{H}\right) = \frac{1}{Z}\operatorname{tr}\left(\hat{H}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\right) \\
&= \frac{1}{Z}\operatorname{tr}\left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\right) = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\operatorname{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\right) = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}Z = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z \quad \checkmark
\end{aligned}$$

b) Die kanonische Zustandssumme berechnen wir, indem wir den Hamilton-Operator für den harmonischen Oszillator mit dem Besetzungszahl-Operator $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ schreiben

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + m\omega^2\hat{x}^2 = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

Dann berechnet sich die kanonische Zustandssumme Z zu

$$\begin{aligned}
Z = \operatorname{tr}\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\langle\psi_n|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,\psi_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle\psi_n|\exp\left(-\beta\hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\right)\psi_n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(-\beta\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)\underbrace{\langle\psi_n|\psi_n\rangle}_{=1} = \mathrm{e}^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(-\beta\hbar\omega n\right) \\
&= \mathrm{e}^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}\left(1 - \exp\left(-\beta\hbar\omega\right)\right)^{-1} = \left(\mathrm{e}^{\beta\frac{\hbar\omega}{2}} - \mathrm{e}^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}\right)^{-1} \\
&= \frac{1}{2\sinh\left(\beta\hbar\omega/2\right)}
\end{aligned}$$

Durch Ableitung nach $\beta = k_{\mathrm{B}}T$ erhalten wir die mittlere Energie

$$\begin{aligned}
\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z &= \frac{\partial}{\partial\beta}\log\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\frac{\cosh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\frac{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}+1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(1 + \frac{2}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1}\right) \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\omega}_{\text{Nullpunktsenergie}} + \underbrace{\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1}}_{\text{Bose-Einstein-Verteilung}}
\end{aligned}$$

Die mittlere Energie besteht also aus zwei Beiträgen: Der Energie des Grundzustands und der mittleren Energie, die einer Bose-Einstein-Verteilung entspricht.

c) Die spezifische Wärme ergibt sich zu

$$C_V(T) = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = k_\mathrm{B}\left(\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right)^2 \frac{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}}{\left(\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} - 1\right)^2} = k_\mathrm{B}\tau^{-2}\frac{\mathrm{e}^{1/\tau}}{(\mathrm{e}^{1/\tau} - 1)^2},$$

wobei wir hier die Variable $\tau = \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}$ eingeführt haben.

d) Die Grenzwerte ergeben sich wie folgt:

- $T \to 0, \tau \to 0$ ergibt sich $C_V \to 0$ exponentiell (erst bei Debye $\propto T^3$)
- $T \to \infty, \tau \to \infty$ ergibt sich $C_V \to k_\mathrm{B}$

4. Hellmann-Feynman-Theorem und der Virialsatz

a) Wir leiten den Energie-Eigenwert E_n nach dem Parameter λ ab.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda}\langle n|\hat{H}|n\rangle \\
&= \frac{\partial \langle n|}{\partial \lambda}\hat{H}|n\rangle + \left\langle n\left|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right|n\right\rangle + \langle n|\hat{H}\frac{\partial |n\rangle}{\partial \lambda} \\
&= E_n\left(\frac{\partial \langle n|}{\partial \lambda}|n\rangle + \langle n|\frac{\partial |n\rangle}{\partial \lambda}\right) + \left\langle n\left|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right|n\right\rangle \\
&= E_n \underbrace{\frac{\partial}{\partial \lambda}\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1}}_{=0} + \left\langle n\left|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right|n\right\rangle \\
&= \left\langle n\left|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right|n\right\rangle \qquad \checkmark
\end{aligned}$$

b) Die Funktion $\psi_\lambda(\vec{x})$ ist normiert:

$$\left|\psi_\lambda(\vec{x})\right|^2 = \int \mathrm{d}^3x\psi_\lambda^*(\vec{x})\psi_\lambda(\vec{x}) = \int \mathrm{d}^3x\lambda^3\psi^*(\lambda\vec{x})\psi(\lambda\vec{x}) = \int \mathrm{d}^3y\psi^*(\vec{y})\psi(\vec{y}) = 1.$$

Hier haben wir $\vec{y} = \lambda\vec{x}$ substituiert und ausgenutzt, dass die Funktion $\psi(\vec{x})$ normiert ist.
Nun überprüfen wir, ob $\psi_\lambda(\vec{x})$ ein Eigenzustand des angegebenen Hamilton-Operators $\hat{H}(\lambda)$ ist

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\lambda)\psi_\lambda(\vec{x}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^{-2}\nabla_x^2\psi_\lambda(\vec{x}) + \lambda^k V(\vec{x})\psi_\lambda(\vec{x}) \\
&= \lambda^{3/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^{-2}\nabla_x^2 + \lambda^k V(\vec{x})\right)\psi(\lambda\vec{x}).
\end{aligned}$$

Hier ist ∇_x der Gradient bezüglich dem Vektor $\vec{x}$. Im nächsten Schritt benutzen wir zuerst, dass $\lambda^k V(\vec{x}) = V(\lambda\vec{x})$ ist, und substituieren wieder $\vec{y} = \lambda\vec{x}$ also $\nabla_y = \lambda^-1\nabla_x$ gilt.

$$\hat{H}(\lambda)\psi_\lambda(\vec{x}) = \lambda^{3/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^{-2}\nabla_x^2 + V(\lambda\vec{x})\right)\psi(\lambda\vec{x}) = \lambda^{3/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_y^2 + V(\vec{y})\right)\psi(\vec{y}) = \lambda^{3/2}E\psi(\vec{y}) = E\psi_\lambda(\vec{x}) \qquad \checkmark$$

Also ist $\psi_\lambda(\vec{x}) = \lambda^{3/2}\psi(\lambda\vec{x})$ eine Eigenfunktion des Hamilton-Operators $\hat{H}(\lambda)$ mit Energie-Eigenwert E.

c) Wir haben in Teilaufgabe b) gezeigt, dass der Energie-Eigenwert E unabhängig von dem Parameter λ ist. Dann ist die rechte Seite im Hellmann-Feynman-Theorem gleich Null.

$$\left\langle \psi_\lambda \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \middle| \psi_\lambda \right\rangle = 0.$$

Die Ableitung des Hamilton-Operators ist

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} = 2\lambda^{-3} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + k\lambda^{k-1} V(\vec{x}) = -2\lambda^{-3} T(\vec{p}) + \frac{k}{\lambda} V(\vec{y})$$

Also folgt aus dem Hellmann-Feynman-Theorem

$$2\lambda^{-3} \langle \psi_\lambda | T(\vec{p}) | \psi_\lambda \rangle = k\lambda^{-1} \langle \psi_\lambda | V(\vec{y}) | \psi_\lambda \rangle \,,$$

was durch Einsetzen von $\lambda = 1$ zum Virialsatz für homogene Potentiale wird.