

Theoretische Physik III - Quantenmechanik (SoSe 2016) -

Übungsblatt 05 ($30 + \pi^2$ Punkte)¹

Ausgabe 09.05.16 – Abgabe 17.05.16 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

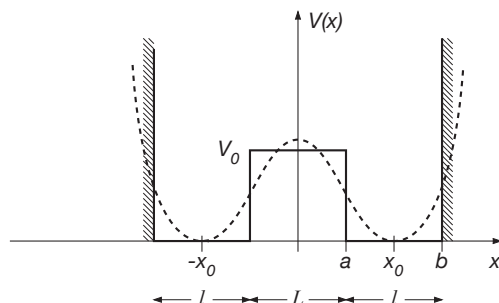
▷ Aufgabe 1 (Doppelmuldenpotential)*

(10 Punkte)

Das Ammoniakmolekül NH_3 stellt man sich gerne als Pyramide vor mit den drei Wasserstoffatomen als Basis, und dem Stickstoff im Apex. Die drei Wasserstoffatome bilden eine Ebene P , die durch das Stickstoffatom führende Senkrechte zu dieser Ebene sei mit S bezeichnet. Die Lage des Stickstoffatoms auf der Geraden S wird mit der Koordinate x angegeben; der Wert $x = 0$ bezeichnet den Durchstoßpunkt der Geraden S mit der Ebene P .

Die Abhängigkeit der potentiellen Energie des Ammoniakmoleküls von der Konfigurationsvariablen x stellt sich folgendermaßen dar. In der Gleichgewichtslage $x = x_0 \approx 0.4 \text{ \AA}$ hat das Potential ein Minimum. Für kleinere Werte wächst die potentielle Energie und nimmt für $x = 0$, wenn also das Stickstoffatom in der Basisebene liegt, ein lokales Maximum an. Wenn x negativ wird klappt das Molekül um “wie ein Schirm im Wind”. Aus Gründen der Symmetrie erreicht das Molekül für $x = -x_0$ wieder eine stabile Gleichgewichtslage. Die beiden klassischen stabilen Konfigurationen des Ammoniakmoleküls heißen die R - und L -Konfiguration. Klassisch kann man das Molekül von der R - in die L -Konfiguration nur unter Aufbringung einer Energie $V_0 \approx 0.4 \text{ eV}$ bringen. Quantenmechanisch reicht dafür – dank Tunneleffekt – viel weniger. Das Umklappen heißt in der Quantenchemie “Inversion”. Da das Ammoniakmolekül polar ist, ist mit dem Umklappen ein oszillierendes Dipolmoment verknüpft: beim hin-und-her tunnelt strahlt das Molekül, was im Ammoniak-Maser seine Anwendung findet.

Wir modellieren das Konfigurationspotential durch ein stückweise stetiges Doppelmuldenpotential, vgl. Abbildung. Gestrichelt das “exakte Potential”, durchgezogen das Modellpotential.



¹Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft ...

- (a) Lösen Sie das Eigenwertproblem

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

für das in Abb. skizzierte Modellpotential. Bestimmen Sie zunächst nur die Form der Eigenfunktionen und die transzendente Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte.

Hinweis: Machen Sie frühzeitig von der Symmetrie des Potentials unter Raumspiegelung Gebrauch, $V(x) = V(-x)$.

- (b) Bestimmen Sie für den Fall der “genügend hohen und breiten Barriere”

$$V_0 \gg E, \frac{\hbar^2}{mL^2} \quad (2)$$

näherungsweise die Energiewerte und Eigenfunktionen des Grundzustands und ersten angeregten Zustands. Machen Sie sich ein Bild der Wahrscheinlichkeitsdichten $|\varphi_n(x)|^2$, $n = 0, 1$.

- (c) Zum Zeitpunkt $t = t_0$ sei das Molekül nun in einem Zustand präpariert

$$\Psi(x, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_0(x) + \varphi_1(x)] \quad (3)$$

Machen Sie sich ein Bild von $|\Psi(x, t_0)|^2$. Bestätigen Sie, dass sich das Molekül jetzt in einer R - (oder L -Konfiguration) befindet. Bestimmen Sie nun die zeitliche Entwicklung dieser Konfiguration. Nach welcher Zeit T_{inv} hat sich die Konfiguration invertiert?

▷ **Aufgabe 2 (Tunneleffekt)*** (π^2 Punkte)

Wir betrachten die Streuung an der Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (4)$$

mit $V_0 > 0$.

- (a) Mit welchen physikalischen Systemen kann ein derartiges Streuexperiment realisiert werden?
- (b) Wie lautet die Streumatrix? Zeigen Sie, daß die Streumatrix unitär ist.
- (c) Diskutieren Sie den Transmissionskoeffizienten als Funktion der Teilchenenergie. In welchem Parameterbereich ist der Transmissionskoeffizient näherungsweise exponentiell in der Breite der Barriere?
- (d) Schauen Sie in Ihr Physikbuch, Stichwort “Tunnelmikroskopie”. Entnehmen Sie typische Parameterwerte und berechnen den Wertebereich des Transmissionskoeffizienten.

Bemerkung: Die Aufgabe ist ein Klassiker der Quantenmechanik. Wer sie beherrscht hat etwas fürs Leben. Als kleine (nun ja . . .) Zusatzaufgabe (π Punkte) wäre noch die Orthogonalität und Vollständigkeit der Streulösungen zu zeigen.

▷ **Aufgabe 3 (HO und Hermitepolynome)**

(10 Punkte)

Einen Ausdruck für die Ortsdarstellung des n -ten angeregten Zustandes eines Harmonischen Oszillators (HO, Masse m , Eigenfrequenz ω) wurde Ihnen in der Vorlesung angegeben

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} \varphi_0(x), \quad (5)$$

mit

$$\varphi_0(x) = \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right]^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right\}, \quad (6)$$

und \hat{a}^\dagger in Ortsdarstellung ein Differentialoperator erster Ordnung, $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{b} - b \frac{d}{dx} \right)$ mit

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (7)$$

die charakteristische Längenskala des HO.

- (a) Zeigen Sie: die Wellenfunktion des n ten angeregten Zustands ist das Produkt aus einem Polynom n ter Ordnung und einer Gaussfunktion,²

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi b}} H_n(x/b) e^{-(x/b)^2/2}. \quad (8)$$

wobei die hier eingeführten *Hermitepolynome* H_n aus (5) abgelesen werden können,

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}. \quad (9)$$

- (a) Alternativ, mittels sog *Rodriguezformel*,

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (10)$$

was wir Sie bitten zu beweisen.

- (b) Zeigen Sie: Die niedrigsten Hermitepolynome lesen sich

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 & H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 & H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 & H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned} \quad (11)$$

- (c) Bestätigen Sie: Die Eigenfunktionen sind reell. In Übereinstimmung mit dem Knotensatz hat der n te Eigenzustand n Nullstellen. Eigenfunktionen zu geradem (ungeradem) n haben gerade (ungerade) Parität. Die Eigenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem.

²Funktionen dieser Provinienz fallen in die wichtige Klasse der parabolischen Zylinderfunktionen. Allgemein handelt es sich dabei um Lösungen der Gleichung $\psi'' + (ax^2 + bx + c)\psi = 0$.

▷ **Aufgabe 4 (Kohärente Zustände)**

(10 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Eigenvektoren von $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ kennengelernt, sog *Fockzustände* $|n\rangle$, wobei $\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ (in Ortsdarstellung $\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle$). Fockzustände, daran darf ich Sie erinnern, sind die stationären Zustände des harmonischen Oszillators.

Bei den stationären Zuständen bewegt sich bekanntlich nichts. Nun hat man beim harmonischen Oszillator aber immer ein schwingendes Teilchen vor Augen. Um dieses Bild auch in der Quantenmechanik wieder zu finden, muss die zeitliche Entwicklung linearer Überlagerungen von Fockzuständen studiert werden. Und eine besonders wichtige Klasse von solchen linearen Überlagerungen sind die sog *kohärenten Zustände*,

$$|\alpha\rangle := e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (12)$$

worin $\alpha \in \mathbb{C}$ eine komplexe Zahl. Zeigen Sie

- (a) Ein kohärenter Zustand $|\alpha\rangle$ ist Eigenvektor des Vernichtungsoperators zum Eigenwert α ,

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (13)$$

Im Folgenden verwenden wir geeignete Einheiten für Ort \hat{q} und Impuls \hat{p} , so daß $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p})$ mit $[\hat{q}, \hat{p}] = i$. Zeigen Sie:

- (b) Erwartungswerte von Ort und Impuls im kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ lauten

$$\langle \hat{q} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \alpha^*), \quad (14)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(\alpha^* - \alpha), \quad (15)$$

- (c) $|\alpha\rangle$ ist Zustand minimaler Unschärfe, $\delta_\alpha q \delta_\alpha p = 1/2$.

- (d) Die Ortsdarstellung von $|\alpha\rangle$, $\psi_\alpha(x) := \langle x|\alpha\rangle$ ist eine um $\langle q \rangle$ zentrierte Gaussfunktion der Breite $1/\sqrt{2}$ und Phasenfaktor $e^{i\langle p \rangle x}$.

Hinweis: Besinnen Sie sich auf die Vorlesung und wie da die Ortsdarstellung des Grundzustands gewonnen wurde.

- (e) Studieren Sie nun die Dynamik des kohärenten Zustands eines harmonischen Oszillators. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei der harmonische Oszillator in einem kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$. Zeigen Sie, daß der harmonische Oszillator dann auch zu irgendeinem späteren Zeitpunkt in einem kohärenten Zustand ist. Bestimmen Sie die Amplitude $\alpha(t)$. Machen Sie sich ein Bild von $\alpha(t)$ (komplexe Ebene benutzen!) und $|\langle x|\alpha(t)\rangle|$. Genießen Sie die augenfällige Übereinstimmung mit dem Bild vom schwingenden Teilchen. Machen Sie sich klar, dass die komplexe α -Ebene im engen Zusammenhang mit dem klassischen Phasenraum steht.

Im Kontext der Elektrodynamik/Quantenoptik heißen Ort und Impuls Quadraturamplituden; “Ort” entspricht dabei der elektrischen Feldstärke, “Impuls” ihrer zeitlichen Ableitung. Der Operator $\hat{n} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$ heißt Photonenzahloperator. Zeigen Sie:

(f) Im kohärenten Zustand ist die Photonenzahl Poisson-verteilt,

$$P(n) \equiv |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} |\alpha|^{2n} / n!; \quad (16)$$

(g) Erwartungswert und Quadratvarianz der Photonenzahl im kohärenten Zustand sind

$$\langle \hat{n} \rangle = |\alpha|^2 \quad (17)$$

$$\Delta_\alpha^2 n = |\alpha|^2 \quad (18)$$

Der Fachschaftsrat MaPhy bittet um Kenntnisnahme:

- LAN-Party—3.6.—17 Uhr—2.28.0.102/104
- MaPhy-Sportfest—Juni—Sportplatz am Neuen Palais