

Theoretische Physik 3 (Quantenmechanik)
Sommersemester 2015

Übungsblatt Nr. 6

Abgabe bis Donnerstag, 28.05.15, 12:00 neben PH 3218.
Dieses Blatt wird in den Übungen vom 01.06. - 05.06.15 besprochen.

Aufgabe 1:
Quantisierung eines Rotators in einer Ebene **2 Punkte**

Gegeben sei ein Rotator mit Trägheitsmoment I und Drehimpuls L , der auf einer Ebene rotiert. Dabei sei $\phi \in [0, 2\pi)$ dessen Winkel der Auslenkung zur Startposition und $\dot{\phi} \equiv d\phi/dt$ die zeitliche Ableitung.

Die Lagrangefunktion \mathcal{L} ist in diesem Fall gegeben durch

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = T - V = T = \frac{I\dot{\phi}^2}{2}. \quad (1)$$

Die Bewegungsgleichung ergibt sich aus der Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi}. \quad (2)$$

Der zum Winkel ϕ konjugierter Drehimpuls L ist definiert als

$$L = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}. \quad (3)$$

Die Hamiltonfunktion erhält man durch Legendre-Transformation der Lagrangefunktion

$$\mathcal{H}(\phi, L) = \dot{\phi}(\phi, L)L - \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}(\phi, L)). \quad (4)$$

In diesem Fall ist die Bewegungsgleichung bestimmt durch folgende Differentialgleichungen

$$\dot{\phi} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial L}, \quad \dot{L} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi}. \quad (5)$$

- (a) Ermitteln Sie aus der Lagrangefunktion \mathcal{L} die Hamiltonfunktion \mathcal{H} .
- (b) Stellen Sie jeweils die Bewegungsgleichungen auf und zeigen Sie, dass diese übereinstimmen.

Die Poisson-Klammer zweier Funktionen u und v bezüglich der kanonischen Variablen (ϕ, L) ist gegeben durch

$$\{u, v\} = \frac{\partial u}{\partial \phi} \frac{\partial v}{\partial L} - \frac{\partial u}{\partial L} \frac{\partial v}{\partial \phi}. \quad (6)$$

Für die Quantisierung können wir das Korrespondenzprinzip zwischen der Poisson-Klammer und dem Kommutator verwenden:

$$\{A, B\} = C \quad \implies \quad [\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \hat{C}. \quad (7)$$

- (c) Berechnen Sie die Poisson-Klammer $\{\phi, L\}$.
- (d) Bestimmen Sie durch Anwendung des Korrespondenzprinzips den Kommutator $[\hat{\phi}, \hat{L}]$ und zeigen Sie, dass dieser vereinbar ist mit $L = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$.
- (e) Stellen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung auf und bestimmen Sie die möglichen Energieeigenfunktionen und deren Eigenwerte.

Aufgabe 2: **3 Punkte**
Virialsatz in der Quantenmechanik

In der klassischen Mechanik beschreibt der Virialsatz den Zusammenhang zwischen den zeitlichen Mittelwerten der potentiellen Energie \bar{V} und kinetischer Energie \bar{T} von gebunden Systemen. Für ein Teilchen der kinetischen Energie T in einem System mit Potential V gilt dabei

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r})}. \quad (8)$$

Sei zusätzlich V ein homogenes Potential vom Grad k ,¹ d.h. $\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) = kV(\mathbf{r})$, dann gilt

$$\bar{T} = \frac{k}{2} \bar{V}. \quad (9)$$

Im Folgenden gilt es, das quantenmechanische Analogon herzuleiten. Zeigen Sie zunächst, dass für den Hamilton Operator $H = T + V = \sum_{n=1}^3 \frac{p_n^2}{2m} + V(\{x_i\})$, bei welchem das Potential $V = V(\{x_i\})$ nur eine Funktion von den Ortskoordinaten x_i für $i = 1, 2, 3$ ist, gilt

$$\sum_{n=1}^3 \frac{i}{\hbar} [H, x_n p_n] = 2T - \sum_{n=1}^3 x_n \frac{\partial V(\{x_i\})}{\partial x_n}. \quad (10)$$

Dabei sind die Kommutatoren $[H, x_n] = -i\frac{\hbar}{m} p_n$ und $[H, p_n] = i\hbar \frac{\partial V(\{x_i\})}{\partial x_n}$ zu verwenden.

Bilden Sie anschließend den Erwartungswert und benutzen Sie das Ehrenfesttheorem, um damit einen Virialsatz analog zur klassischen Mechanik, d.h. Gleichungen (8) und (9), für quantenmechanische Systeme herzuleiten. Beachten Sie dabei, dass Energieeigenzustände stationäre Zustände beschreiben.

¹Ein Potenzial heißt homogen vom Grad k , wenn für $\alpha > 0$ gilt: $V(\alpha \mathbf{r}) = \alpha^k \mathbf{r}$.

Aufgabe 3:
Harmonischer Oszillator

2 Punkte

Betrachten Sie die Eigenzustände eines harmonischen Oszillators der Masse m und der Frequenz ω mit dem dazugehörigen Potential $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ bzw. der dazugehörigen kinetischen Energie $T = \frac{p^2}{2m}$.

- Wie lautet der (quantenmechanische) Virialsatz im Falle des harmonischen Oszillators?
- Zeigen Sie, dass dieser, unter Verwendung der unten genannten Wellenfunktionen, erfüllt ist. Vergleichen Sie dabei $\langle T \rangle$ mit $\langle V \rangle$.
- Benutzen Sie den Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, um $\langle T \rangle$ bzw. $\langle V \rangle$ explizit zu bestimmen.

Hinweis:

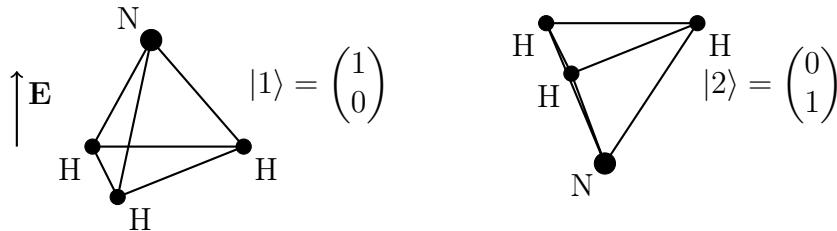
Die Eigenfunktion sind sowohl in der Orts- als auch in der Impulsdarstellung gegeben durch

$$\psi_n(\xi_\alpha) = \left(\frac{M_\alpha \omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi_\alpha) e^{-\xi_\alpha^2/2}, \quad (11)$$

mit $\xi_\alpha = \sqrt{\frac{M_\alpha \omega}{\hbar}} \alpha$ für $\alpha = x$ bzw. $\alpha = p$ und $M_x = m$ bzw. $M_p = \frac{1}{m\omega^2}$.

Aufgabe 4:
Ammoniakmolekül im elektrischen Feld

3 Punkte



Das Ammoniakmolekül NH_3 bildet einen Tetraeder mit je einem Atom an den vier Ecken. Die 3 H-Atome definieren die Ebene. Das N-Atom hat dann zwei gleichberechtigte, energetisch bevorzugte Positionen über und unter der Ebene, die wir mit den Zuständen $|1\rangle$ (oben) und $|2\rangle$ (unten) bezeichnen. Dies kann man als eine effektive Beschreibung eines symmetrischen Potentials mit zwei Minima bei niedrigen Energien auffassen (vgl. Blatt 5 Aufgabe 4). Das elektrische Dipolmoment des Moleküls hat für diese Zustände die Werte $\pm \mathbf{p}_{\text{dip}}$. In einem elektrischen Feld \mathbf{E} ist dann

$$H = (H_{nn'}) = \begin{pmatrix} E_0 - \beta & W \\ W^* & E_0 + \beta \end{pmatrix} \quad (12)$$

mit $\beta = |\mathbf{p}_{\text{dip}} \cdot \mathbf{E}|$ ein plausibler Ansatz für die reelle Hamiltonmatrix in dem Raum dieser Zustände. Dabei sorgt der Term W dafür, dass symmetrische gegenüber antisymmetrischen Ortswellenfunktionen für das N-Atom energetisch bevorzugt sind.

- Berechnen Sie die Energien und Eigenzustände des Systems. Diskutieren Sie die Abhängigkeit des Resultats von der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} .

- (b) Welche Bedingung muss W bei $\mathbf{E} = 0$ erfüllen, damit der symmetrische Zustand gegenüber dem antisymmetrischen energetisch bevorzugt ist (wie aufgrund von Blatt 5 Aufgabe 4 zu erwarten).

Hinweis:

Benutzen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Matrixdarstellung:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \implies \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$