Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 5, 13.12.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 08.01.2013

Aufgabe 11: Harmonischer Oszillator
Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator.

a) Benutzen Sie

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right), \quad a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,,$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right), \quad a^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,,$$

um $\langle m|\,x\,|n\rangle$, $\langle m|\,p\,|n\rangle$, $\langle m|\,\{x,p\}\,|n\rangle$, $\langle m|\,x^2\,|n\rangle$ and $\langle m|\,p^2\,|n\rangle$ zu berechnen.

b) Überprüfen Sie, dass das Virialtheorem

$$\left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle = \left\langle x\frac{d}{dx}V \right\rangle$$

für die Erwartungswerte der kinetischen und potentiellen Energie in Bezug auf Energieeigenzustände gilt. Dieses Theorem besagt, dass die kinetische und die potentielle Energie beim harmonischen Oszillator im Mittel gleich groß sind.

Aufgabe 12: Kohärente Zustände
Ein kohärenter Zustand eines eindimensionalen harmonischen Oszillators ist definiert als Eigenzustand des (nicht-hermiteschen) Vernichtungsoperators a:

$$a\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle\,,$$

wobei λ eine i. allg. komplexe Zahl ist.

a) Zeigen Sie, dass

$$|\lambda\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} e^{\lambda a^\dagger}\,|0\rangle$$

ein normierter kohärenter Zustand ist, d.h. dass $a\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle$ und dass $\langle\lambda|\,\lambda\rangle = 1$.

Hinweis: Schreiben Sie $e^{\lambda a^\dagger}$ in der Reihendarstellung und zeigen Sie, dass dieser Zustand ein Eigenzustand des Vernichtungsoperators ist. Nutzen Sie dabei aus, dass

$$a{a^\dagger}^n = {a^\dagger}^n a + n{a^\dagger}^{n-1}\,.$$

b) Zeigen Sie, dass ein kohärenter Zustand auch erzeugt werden kann durch das Anwenden des Translationsoperators $e^{-\frac{ipl}{\hbar}}$ auf den Grundzustand des harmonischen Operators für eine endliche Verschiebung l, wobei p der Impulsoperator ist.
Hinweis: Stellen sie p durch a und $a^\dagger$ dar und verwenden Sie das Baker-Hausdorff-Lemma in der Form

$$e^{A+B} = e^a e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]},\ \text{falls}\ [A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0\,.$$

bitte wenden!

Aufgabe 13: "Halber" Oszillator
Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m, das sich in einem eindimensionalen Potentialtopf folgender Form befindet:

$$V = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2 & for \quad x \geq 0 \\ \infty & for \quad x < 0. \end{cases}$$

a) Bestimmen Sie die Grundzustandsenergie.

b) Was ist der Erwartungswert $\langle x^2 \rangle$ im Grundzustand?