5. Übung zur Quantentheorie [Krüger, WS 2019/20]
Ausgabe: 05.11.2019, Abgabe: 12.11.2019

Aufgabe 12: Genauigkeit einer Variationsrechnung [9 Punkte]

Ein Testzustand $|\phi\rangle$ wird zur näherungsweisen Berechnung der Grundzustandsenergie E_0 eines Hamiltonoperators $\hat{H}$ verwendet. Denken Sie sich $|\phi\rangle$ in einen Anteil $c\,|\varphi_0\rangle$, der parallel zum exakten normierten Grundzustandsvektor $|\varphi_0\rangle$ ist, und einen dazu orthogonalen Rest $|\tilde{\chi}\rangle$ zerlegt:

$$|\phi\rangle \,=\, c\,|\varphi_0\rangle \,+\, |\tilde{\chi}\rangle \,:=\, c\big(|\varphi_0\rangle \,+\, \varepsilon\,|\chi\rangle\big)$$

mit:

$$\langle\chi|\chi\rangle \,=\, 1 \qquad \text{und} \qquad c,\, \varepsilon \text{ komplexe Zahlen .}$$

Die in der obigen Gleichung eingeführte Größe ε ist ein Maß für die Größe der Abweichung zwischen $|\phi\rangle$ und $|\varphi_0\rangle$.

a) [3P] Zeigen Sie, dass für $|\varepsilon| \ll 1$ die Abweichung zwischen den Energien $\tilde{E} = \dfrac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}$ und E_0 von der Größenordnung $|\varepsilon|^2$ ist.

b) [6P] Sei nun $\hat{H}$ der Hamiltonoperator eines verschobenen harmonischen Oszillators:

$$\hat{H} \,=\, -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{d^2}{d\,x^2} \,+\, \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2 \,-\, m\,\omega^2\,L\,x \qquad \text{mit} \qquad L \ll \frac{1}{\alpha} \,=\, \left(\frac{m\,\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} \;.$$

i) Geben Sie die exakte Grundzustandsenergie und die exakte Grundzustandswellenfunktion an.

ii) Berechnen Sie $\tilde{E}$, indem Sie als Testzustand $|\phi\rangle$ die Grundzustandswellenfunktion des <u>unverschobenen</u> harmonischen Oszillators benutzen.

iii) Berechnen Sie nun c, $|\tilde{\chi}\rangle$ und $|\varepsilon|^2$.

Aufgabe 13: Transformation von Operatoren [4 Punkte]

a) [2P] Beweisen Sie für zwei Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ die Identität

$$e^{i\,\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-i\,\hat{A}} = \sum_{n\,=\,0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}\,\hat{D}_n\,, \quad \text{wobei} \quad \hat{D}_0 \,=\, \hat{B} \quad \text{und} \quad \hat{D}_n = [\hat{A},\, \hat{D}_{n-1}] \quad \text{für} \quad n = 1,\, 2,\, ...$$

sind.

Hinweis: Betrachten Sie dazu die sich aus der operatorwertigen Funktion

$$\hat{F}\,(t) \,=\, e^{i\,\hat{A}\,t}\,\hat{B}\,e^{-i\,\hat{A}\,t} \qquad \text{mit} \qquad t \,\in\, \mathbb{R}$$

ergebende Differentialgleichung.

b) [2P] Verwenden Sie das Ergebnis aus a), um die Transformation

$$\hat{x}\,' \,=\, \hat{T}_a^{-1}\,\hat{x}\,\hat{T}_a$$

des Ortsoperators $\hat{x}$ durch den Translationsoperator $\hat{T}_a \,=\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,a\,\hat{p}_x}$ zu berechnen. Dabei ist a eine reelle Zahl und $\hat{p}_x$ ist der Impulsoperator.

Aufgabe 14: Zeitumkehrsymmetrie **[7 Punkte]**

a) [1P] Zeigen Sie, dass für den Vektor $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ der Pauli-Matrizen folgende Relation gilt

$$\hat{\sigma}_y^{-1}\,\hat{\vec{\sigma}}\,\hat{\sigma}_y = -\hat{\vec{\sigma}}^* \; .$$

b) [2P] Der Zeitordnungsoperator für ein Teilchen mit $\frac{1}{2}$-Spin ist durch

$$\hat{\mathcal{T}} = -i\,\hat{\sigma}_y\,\hat{K}$$

gegeben. Dabei ist $\hat{K}$ der Operator der komplexen Konjugation. Zeigen Sie, dass

i) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{r}} = \hat{\vec{r}}\hat{\mathcal{T}}$,

ii) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{p}} = -\hat{\vec{p}}\hat{\mathcal{T}}$,

iii) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{S}} = -\hat{\vec{S}}\,\hat{\mathcal{T}}$

gilt.

c) [1P] Zeigen Sie, dass $\hat{\mathcal{T}}^2 = -1$ ist und geben Sie den inversen Operator $\hat{\mathcal{T}}^{-1}$ an.

d) [1P] Beweisen Sie für die Zustände

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_+(\vec{r}\,) \\ \phi_-(\vec{r}\,) \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \psi = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}\,) \\ \psi_-(\vec{r}\,) \end{pmatrix}$$

die Beziehungen

$$\langle\psi|\hat{\mathcal{T}}|\phi\rangle = -\langle\phi|\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle \qquad \text{und} \qquad \langle\hat{\mathcal{T}}\,\psi|\tilde{\mathcal{T}}\,\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \; .$$

e) [2P] Ein Elektron befinde sich im Zustand

$$\psi(\vec{r}, \vec{s}\,) = f(\vec{r}\,)\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \qquad \text{mit} \qquad \int |f(\vec{r}\,)|^2\,d^3r = 1 \; .$$

Geben Sie den zeitumgekehrten Zustand $\tilde{\psi}(\vec{r}, \vec{s}\,) = \hat{\mathcal{T}}\,\psi(\vec{r}, \vec{s})$, sowie den Spinerwartungswert für ψ und $\tilde{\psi}$ an.