Aufgabe 26: Eigenwertprobleme **(mündlich, 3 Punkte)**

Gegeben sei ein Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit einer vollständigen orthonormalen Basis $|\chi_m\rangle$. Betrachten Sie einen hermiteschen Operator $\hat{A}$. Gesucht sind dessen Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ mit Eigenwerten a_n.

a) [1 Punkt] Entwickeln Sie die (noch unbekannten) Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ in der Basis, d. h. $|\psi_n\rangle = \sum_m c_m^{(n)} |\chi_m\rangle$ und zeigen Sie, dass die Entwicklungskoeffizienten $\vec{c}^{\,(n)}$ (d. h. der Vektor $c_m^{(n)}$, $m = 1, 2, ...$) die Standard-Eigenwertgleichung $\underline{\underline{A}}\,\vec{c}^{\,(n)} = a_n\,\vec{c}^{\,(n)}$ der Linearen Algebra erfüllen („Diagonalisierung einer selbstadjungierten Matrix").

b) [1 Punkt] Aus der Linearen Algebra ist bekannt, dass die $\vec{c}^{\,(n)}$ orthonormal gewählt werden können, d. h. $\sum_m c_m^{(n)*}\, c_m^{(n')} = \delta_{nn'}$. Zeigen Sie, dass daraus die Orthonormalität der $|\psi_n\rangle$ resultiert.

c) [1 Punkt] Man kann nun die $|\psi_n\rangle$ als neue VONS-Basis verwenden. Geben Sie die unitäre Transformationsmatrix zwischen den $\{|\chi_m\rangle\}$ und den $\{|\psi_n\rangle\}$ an. Wie transformiert sich die Matrixdarstellung eines Operators $\hat{B}$?

Aufgabe 27: Energieminimierung **(schriftlich, 7 Punkte)**

Betrachten Sie einen beliebigen Hamiltonoperator $\hat{H}$ mit der einzigen Einschränkung, dass sein Grundzustand $|\psi_0\rangle$ nicht entartet sei.

a) [2 Punkte] Zeigen Sie, dass für jedes normierte $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ für den Energie-Erwartungswert gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0 \ .$$

Zeigen Sie ferner, dass die *Gleichheit* nur für $|\psi\rangle = e^{i\,\alpha}\,|\psi_0\rangle$ realisiert wird (mit beliebigem Phasenfaktor $e^{i\,\alpha}$).

Der Befund aus a) kann benutzt werden, um den Energie-Erwartungswert einer parameter-kontrollierten Ansatzfunktion $|\psi\rangle$ durch Variation des/der Parameter(s) zu minimieren. Versuchen Sie dies am Beispiel eines **harmonischen Oszillators** (Masse m, Kreisfrequenz ω). Als Ansatzfunktion betrachten Sie $\psi(x) = A\,e^{-\gamma\,x^2}$ mit Parameter $\gamma > 0$.

b) [1 Punkt] Bestimmen Sie A so, dass $\psi(x)$ normiert ist.

c) [2 Punkte] Bestimmen Sie die Erwartungswerte der kinetische und potenziellen Energie (als Funktion von γ).

d) [1 Punkt] Minimieren Sie nun die Gesamtenergie

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \langle \hat{T} \rangle_\psi + \langle \hat{V} \rangle_\psi \qquad \text{bzgl. } \gamma \ .$$

Vergleichen Sie Ihr Ergebnis für $\psi(x)$ und für $\langle \hat{H} \rangle$ mit dem exakten bekannten Grundzustand.

e) [1 Punkt] Für zu großes oder zu kleines γ wird die kinetische bzw. potenzielle Energie sehr groß. Erläutern Sie dieses Verhalten!

Aufgabe 28: Matrixdarstellung (schriftlich, 5 Punkte)

Gegeben sei ein eindimensionaler harmonischer Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H \;=\; \frac{p^2}{2\,m} \,+\, \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2 \;.$$

Die durch die Eigenwertgleichung $H\,|n\rangle \;=\; E_n\,|n\rangle$ mit $E_n \;=\; \hbar\,\omega\,\left(n \,+\, \frac{1}{2}\right)$ definierten Zustände $|n\rangle$ bilden eine Basis des Hilbertraumes.

a) [2 Punkte] Berechnen Sie die Matrixelemente $a_{nn'} \;=\; \langle n|a|n'\rangle$ und $a^\dagger_{nn'} \;=\; \langle n|a^\dagger|n'\rangle$ der Operatoren

$$a \;=\; \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,x \,+\, \frac{i}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p\;, \qquad a^\dagger \;=\; \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,x \,-\, \frac{i}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p\;.$$

Verwenden Sie dazu die aus der Vorlesung bekannten Eigenschaften von a und $a^\dagger$.

b) [1 Punkt] Wie lauten damit die Matrixelemente $x_{nn'}$ und $p_{nn'}$ des Orts- bzw. Impulsoperators?

c) [1 Punkt] Der Erwartungswert eines Operators A im Zustand $|n\rangle$ ist durch das Diagonalelement A_{nn} in der entsprechenden Matrixdarstellung gegeben. Berechnen Sie die Erwartungswerte der Operatoren x, p, x^2 und p^2. *Hinweis*: Die Matrixdarstellung des Operators A^2 erhält man aus der Matrixdarstellung von A durch Matrixmultiplikation.

d) [1 Punkt] Berechnen Sie die Orts- und Impulsunschärfe im Zustand $|n\rangle$ und zeigen Sie, dass die Heisenberg'sche Unschärferelation

$$(\Delta\,x)\,(\Delta\,p) \;\geq\; \frac{\hbar}{2}$$

erfüllt ist.

Aufgabe 29: Erwartungswerte (mündlich, 5 Punkte)

Berechnen Sie für die Eigenzustände $|n\rangle$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators mit

$$V \;=\; \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2$$

folgende Erwartungswerte:

a) [1,5 Punkte] $\langle x^3\rangle$,

b) [1,5 Punkte] $\langle x^4\rangle$,

c) [2 Punkte] Zeigen Sie, das das quantenmechanische Analogon zum Virial-Theorem

$$\langle V\rangle \;=\; \langle T\rangle \;=\; \frac{\langle H\rangle}{2}$$

gilt. Dabei ist $T \;=\; \frac{p^2}{2\,m}$ der Operator der kinetischen Energie und $H \;=\; T \,+\, V$ der Hamiltonoperator.