Übung 1. Freies Teilchen im Heisenberg-Bild

Lernziel: Im Heisenberg-Bild sind Operatoren statt Wellenfunktionen zeitabhängig. Wir betrachten als illustratives Beispiel das freie Teilchen im Heisenberg-Bild.

(a) *Betrachte ein freies Teilchen in 1D mit Hamilton-Operator $H = \frac{p^2}{2m}$ und bestimme den Ortsoperator $X_H(t)$ im Heisenberg-Bild.*

(b) *Zeige, dass hier gilt*

$$\Delta X_H(0) \cdot \Delta X_H(t) \geq \frac{\hbar t}{2m}. \tag{1}$$

Lösung The Hamiltonian of a free particle is $H = \frac{P^2}{2m}$.

Let $X_H(0)$ be the position operator at time $t = 0$. Using Equation (7.31) in the script, $X_H(t)$ satisfies the following equation:

$$i\hbar \frac{d}{dt} X_H(t) = [X_H(t), H_H(t)] + (\partial_t X)_H = [X_H(t), H] \ , \tag{L.1}$$

where we used $\partial_t X = 0$ and $H_H(t) = H$ as the Hamiltonian is independent of the time. Plugging

$$[X_H(t), H] = \left[X_H(t), \frac{P^2}{2m}\right] = i\hbar \frac{P}{m} \tag{L.2}$$

into Equation (L.1) we get

$$\frac{d}{dt} X_H(t) = \frac{P}{m} \ , \tag{L.3}$$

which means

$$X_H(t) = \frac{P}{m} t + X_H(0) \ . \tag{L.4}$$

Note that in all the above equations P is just the momentum operator in the Schrödinger picture, as $H_H(t) = H$.

We can now use Equation L.4 to calculate the commutator of $X_H(0)$ with $X_H(t)$:

$$[X_H(0), X_H(t)] = \left[X_H(0), \frac{P}{m} t + X_H(0)\right] \tag{L.5}$$

$$= \frac{t}{m}[X_H(0), P] + [X_H(0), X_H(0)] \tag{L.6}$$

$$= \frac{i\hbar t}{m} \ . \tag{L.7}$$

Using the uncertainty relation we get,

$$\Delta X_H(0) \cdot \Delta X_H(t) \geq \frac{1}{2} |\langle i[X_H(0), X_H(t)]\rangle| = \frac{\hbar t}{2m} \ . \tag{L.8}$$

Übung 2. Gestörter Potentialtopf

Lernziel: In dieser Aufgabe soll die stationäre nicht-entartete Störungstheorie geübt werden.

Wende die stationäre (nicht-entartete) Störungstheorie für den eindimensionalen Potentialtopf $H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + H'$,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq L/2 \\ \infty & |x| > L/2, \end{cases} \tag{2}$$

mit Störung $H' = \lambda x$ *an und bestimme die Korrekturen der Grundzustandsenergie bis zur zweiten Ordnung im Störterm* H'. *Sind die Korrekturen negativ oder positiv?*
Hinweis: Das Resultat ist eine unendliche Summe. Benutze, dass für ganzzahlige m *gilt*

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta\, \theta \cos\theta \sin(2m\theta) = (-1)^{m+1} \frac{8m}{(4m^2-1)^2}. \tag{3}$$

Lösung Die allgemeine Form der Korrektur in der Energie in erster Ordnung ist

$$E_n^{[1]} = \langle \psi_n^{[0]} | H' | \psi_n^{[0]} \rangle, \tag{L.9}$$

wobei H' die Störung ist, und $|\psi_n^{[0]}\rangle$ die Lösung/Wellenfunktion des Potentialtopfs ohne Störung. In zweiter Ordnung ist

$$E_n^{[2]} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{[0]} | H' | \psi_n^{[0]} \rangle|^2}{E_n^{[0]} - E_m^{[0]}}. \tag{L.10}$$

Die Störung $H' = \lambda x$ führt zu folgender Korrektur der Grundzustandsenergie in erster Ordnung:

$$E_1^{[1]} = \lambda \langle \psi_1^{[0]} | x | \psi_1^{[0]} \rangle = \lambda \langle x \rangle = 0. \tag{L.11}$$

Beachte, dass diese Ordnung nicht verschwindet, wenn wir den Topf asymmetrisch positionieren (und damit $\langle x \rangle \neq 0$) .

In zweiter Ordnung brauchen wir Matrixelemente der Form

$$\langle \psi_1^{[0]} | x | \psi_m^{[0]} \rangle = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos(\frac{\pi}{L} x)\; x\; \psi_m^{[0]}(x) dx, \tag{L.12}$$

wobei $\psi_m^{[0]}(x)$ die ungestörten geraden

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \tag{L.13}$$

und ungerade Zustände

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \tag{L.14}$$

des eindimenionalen Potentialtopfes sind.

Aus Symmetriegründen besteht ein Unterschied zwischen geraden und ungeraden Lösungen: Für ungerade m ist die Wellenfunktion $\psi_m^{[0]}(x)$ symmetrisch auf dem Intervall $[-L/2, L/2]$ und das Resultat des Integrals gleich 0. Somit müssen wir die Matrixelemente nur für gerade m berechnen: Zur Vereinfachung schreiben wir $m = 2k$, mit k ganzzahlig.

$$\begin{aligned}
\langle\psi_1^{[0]}|x|\psi_{2k}^{[0]}\rangle &= \frac{2}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} x\ \cos(\frac{\pi}{L}x)\ \sin(\frac{2k\pi}{L}x)dx \\
&= \frac{2L}{\pi^2}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \theta\ \cos(\theta)\ \sin(2k\theta)d\theta \\
&= -\frac{L}{\pi^2}\frac{16(-1)^k k}{(1-4k^2)^2}.
\end{aligned} \tag{L.15}$$

Zusammen mit den Energien $E_{2k}^{[0]} = \frac{4k^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ ergibt sich für die Korrektur in zweiter Ordnung

$$E_1^{[2]} = \frac{2^9 m\lambda^2 L^4}{\pi^6\hbar^2}\sum_k \frac{k^2}{(1-4k^2)^5}. \tag{L.16}$$

Diese Summe ist konvergent und ergibt (Resultat wird nicht erwartet)

$$\sum_k \frac{k^2}{(1-4k^2)^5} = \frac{\pi^2(\pi^2-15)}{12288} < 0 \tag{L.17}$$

Die Korrektur zur Grundzustandsenergie in zweiter Ordnung ist also negativ.

Übung 3. Harmonischer Oszillator im elektrischen Feld

Lernziel: In dieser Aufgabe üben wir die zeitabhängige Störungstheorie, wobei die Störung abrupt eingeschaltet wird. Das st"orungstheoretische Resultat wird mit der exakten Lösung verglichen.

Ein geladenes Teilchen der Ladung $e > 0$ befinde sich in einem harmonischen Potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$ im Grundzustand $|0\rangle$. Zur Zeit $t = 0$ wird ein konstantes, homogenes elektrisches Feld $E > 0$ angelegt.

(a) *Unter Verwendung der zeitabhängigen Störungstheorie soll die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{0\to1}$, mit welcher das Teilchen von Zustand $|0\rangle$ in Zustand $|1\rangle$ übergeht (zu einer Zeit $t > 0$) berechnet werden. $|1\rangle$ bezeichnet dabei den ersten angeregten Zustand des ungestörten Systems. Finde das Resultat bis einschliesslich $O(t^2)$.*

(b) *Beantworte die gleiche Frage für $P_{0\to0}$. Was kann man jetzt über $P_{0\to n}$ für $n \geq 2$ sagen?*

Hinweis: Betrachte Gleichung (9.84) des Skripts.

(c)* *Löse das Problem exakt (d.h. finde eine exakte Formel für $P_{0\to n}$). So kann man durch Vergleich explizit sehen bis auf welche Zeitskala die Störungstheorie eine gute Approximation der exakten Lösung ist.*

Hinweis:
I. Schreibe den Hamilton-Operator mit dem Translationsoperator $T = e^{-ix_0p/\hbar}$, und benutze, dass $e^{ix_0p/\hbar}|0\rangle = |\alpha_0\rangle$ ein kohärenter Zustand ist (vgl. Serie 7).

II. Der Überlapp zwischen zwei kohärenten Zuständen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ ist gegeben durch $\langle\alpha\rangle\,\beta = e^{-|\alpha-\beta|^2/2}e^{iIm(\alpha^*\beta)}$.

Lösung Der freie Hamilton-Operator (ohne E-Feld) lautet:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2. \tag{L.18}$$

Der volle, zeitabhängige Hamilton-Operator ist

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad H'(t) = -eEx\Theta(t), \tag{L.19}$$

mit der Heaviside-Theta Funktion $\Theta(t)$, so dass für $t > 0$:

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (x - x_0)^2 + \varepsilon_0, \tag{L.20}$$

wobei $x_0 = \frac{eE}{m\omega^2}$ und $\varepsilon_0 = -\frac{m\omega^2}{2} x_0^2$. $H(t)$ stellt also einen bis auf eine additive Konstante ε_0 um x_0 verschobenen harmonischen Oszillator dar.

(a) Für den Übergang $0 \to 1$ können wir Formel (9.88) des Skripts anwenden:

$$P_{0\to1}(t) = \left(\frac{\sin \frac{\omega_{01} t}{2}}{\frac{\hbar\omega_{01}}{2}} \right)^2 |\langle 1| (-eEx) |0\rangle|^2 + O(t^4), \tag{L.21}$$

wobei $\hbar\omega_{01} = (E_1 - E_0) = \hbar\omega$, also

$$P_{0\to1}(t) = 4 \left(\frac{eE}{\hbar\omega} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right) |\langle 1|x|0\rangle|^2 + O(t^4). \tag{L.22}$$

Es ist $\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1| a + a^\dagger |0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$, so dass mit $\alpha_0 = -\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_0$ folgt

$$P_{0\to1}(t) = \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{\hbar m\omega^3} (\omega t)^2 + O(t^4) = |\alpha_0|^2 (\omega t)^2 + O(t^4). \tag{L.23}$$

(b) Um $P_{0\to0}$ bis einschliesslich $O(t^2)$ in zeitabhängiger Störungstheorie zu berechnen, müssen wir auch den $O(H'^2)$-Term in der Störreihe berechnen, denn gemäss Skript (9.84):

$$P_{0\to0}(t) = \Big| \underbrace{\langle 0\rangle\, 0}_{=1} - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \langle 0|H'_D(t_1)|0\rangle}_{=0} \tag{L.24}$$

$$- \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \mathrm{d}t_2 \langle 0|T[H'_D(t_1) H'_D(t_2)]|0\rangle + O(t^3) \Big|^2, \tag{L.25}$$

wobei $H'_D(t) = e^{itH_0/\hbar} H'(t) e^{-itH_0/\hbar}$, und $T[\ldots]$ das zeitgeordnete Produkt bedeutet. Wegen $\langle 0|x|0\rangle$ verschwindet das erste Integral, so dass:

$$P_{0\to0}(t) = \left| 1 - I(t) + O(t^3) \right|^2 = 1 - 2\,\mathrm{Re}\, I(t) + O(t^3), \tag{L.26}$$

mit $I(t) = \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \mathrm{d}t_2 \langle 0|T[H'_D(t_1) H'_D(t_2)]|0\rangle$. Bleibt uns noch das Integral $I(t)$:

$$I(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle 0|H'_D(t_1) H'_D(t_2)|0\rangle \tag{L.27}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 e^{i(E_0 - E_n)(t_1 - t_2)/\hbar} \langle 0|H'|n\rangle \langle n|H'|0\rangle \tag{L.28}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 e^{-in\omega(t_1 - t_2)} \langle 0|H'|n\rangle \langle n|H'|0\rangle, \tag{L.29}$$

wobei wir das Integral über $\mathrm{d}t_2$ von 0 bis t_1 laufen lassen und wegen $T[\ldots]$ ein Faktor 2 bekommen. Hier ist $H' = -eEx = \alpha_0\hbar\omega(a + a^\dagger)$, so dass $\langle 0|H'|n\rangle = \hbar\omega\alpha_0\delta_{n,1}$. Somit:

$$I(t) = |\alpha_0|^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \omega^2 e^{-i\omega(t_1-t_2)} = |\alpha_0|^2 \int_0^\tau \mathrm{d}\tau_1 \frac{1}{i}\left[1 - e^{-i\tau_1}\right] \tag{L.30}$$

$$= |\alpha_0|^2 \left(-i\tau + (1 - e^{-i\tau})\right). \tag{L.31}$$

Also ist

$$2\,\mathrm{Re}\, I(t) = 2|\alpha_0|^2(1-\cos\tau) = 4|\alpha_0|^2 \sin^2(\frac{\omega t}{2}) = |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4), \tag{L.32}$$

und $P_{0\to 0} = 1 - |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4)$.

(c)* Da der Hamilton-Operator ein nach x_0 verschobener harmonischer Oszillator ist, können wir diesen ausdrücken als

$$H = TH_0T^{-1} + \varepsilon_0, \tag{L.33}$$

wobei T der Translationsoperator $T = e^{-ix_0p/\hbar}$ ist (denn $TxT^{-1} = x - x_0$). Daher sind $\tilde{E}_n = E_n + \varepsilon_0$, $n \in \mathbb{N}$ die Eigenwerte von H, und die zugehörigen Eigenvektoren sind $|\tilde{n}\rangle = T|n\rangle$, wobei $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ und $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$.

Aus Gl. (L.33) folgt auch dass

$$U(t) = e^{-itH/\hbar} = e^{-it\varepsilon_0/\hbar}\, TU_0(t)T^{-1}, \tag{L.34}$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator des freien Systems $U_0(t) = e^{-itH_0/\hbar}$. Die Wahrscheinlichkeit das System zur Zeit $t > 0$ im n-ten angeregten Zustand bzgl. H_0 zu messen, ist gegeben durch:

$$P_{0\to n}(t) = |\langle n|U(t)|0\rangle|^2. \tag{L.35}$$

Wir berechnen $P_{0\to n}$ exakt:

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}\langle n|TU_0(t)T^{-1}|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}\langle n|TU_0(t)|\alpha_0\rangle \tag{L.36}$$

$$= e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar} e^{-i\omega t/2}\langle n|T|\alpha(t)\rangle, \tag{L.37}$$

wobei wir benutzen das $T^{-1}|0\rangle = e^{ix_0p/\hbar}|0\rangle = |\alpha_0\rangle$ ein kohärenter Zustand ist, und $U_0(t)|\alpha_0\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$, mit $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$.

Folglich müssen wir also noch $\langle n|T|\alpha(t)\rangle$ berechnen. Fangen wir an mit $\langle n|T = (T^\dagger|n\rangle)^\dagger$:

$$T^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}T^{-1}(a^\dagger)^n TT^{-1}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}T^{-1}(a^\dagger)^n T|\alpha_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(T^{-1}a^\dagger T)^n|\alpha_0\rangle. \tag{L.38}$$

Schreiben wir jetzt $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p)$ und benutzen $T^{-1}xT = (x + x_0)$ und $T^{-1}pT = p$, dann folgt

$$T^{-1}a^\dagger T = |\alpha_0| + a^\dagger. \tag{L.39}$$

Demzufolge haben wir

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar} e^{-i\omega t/2}\langle\alpha_0|\frac{1}{\sqrt{n!}}(|\alpha_0| + a)^n|\alpha(t)\rangle. \tag{L.40}$$

Aber da kohärenten Zustände $|\alpha\rangle$ Eigenvektoren zum Eigenwert α des Vernichtunsoperators a sind, also $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, erhalten wir

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar} e^{-i\omega t/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} (|\alpha_0| + \alpha(t))^n \langle\alpha_0\rangle\, \alpha(t) \tag{L.41}$$

$$= e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar} e^{-i\omega t/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} |2\alpha_0|^n \sin^n\left(\frac{\omega t}{2}\right) e^{-in\left(\frac{\omega t-\pi}{2}\right)} \langle\alpha_0\rangle\, \alpha(t). \tag{L.42}$$

Aus $|\alpha_0 - \alpha(t)|^2 = 4|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$ und $\alpha_0^*\alpha(t) = |\alpha_0|^2(\cos\omega t - i\sin\omega t)$ folgt schliesslich:

$$\langle\alpha_0\rangle\, \alpha(t) = e^{-2|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)} e^{-i|\alpha_0|^2 \sin\omega t}, \tag{L.43}$$

und als Endergebnis für die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{0\to n}$ erhalten wir somit:

$$P_{0\to n} = \frac{1}{n!} |2\alpha_0|^{2n} \sin^{2n}\left(\frac{\omega t}{2}\right) e^{-4|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}. \tag{L.44}$$

Bis auf $O(t^4)$ finden wir dann:

$$P_{0\to 0}(t) = e^{-4|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)} = 1 - |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4), \tag{L.45}$$

und

$$P_{0\to 1}(t) = 4|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) e^{-4|\alpha_0|^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)} = |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4). \tag{L.46}$$

Beachte, dass $1 - P_{0\to 0}(t) - P_{0\to 1}(t) = O(t^4)$, da aus $\sum_{n=0}^{\infty} P_{0\to n}(t) = 1$ folgt

$$1 - P_{0\to 0}(t) - P_{0\to 1}(t) = \sum_{n\geq 2} P_{0\to n}(t), \tag{L.47}$$

und die rechte Seite ist $O(t^4)$ gemäss Gl. (L.44). Weiterhin sehen wir, dass t und ω immer gepaart auftreten. Neben $|\alpha_0|$ entscheidet deshalb auch ωt über die Güte der Approximation. Beide dimensionslosen Parameter sollten möglichst klein sein, damit eine störungstheoretische Behandlung des Problems möglich ist. Eine Approximation des exakten Resultats durch eine endliche Ordnung der Störreihe ist daher maximal auf einer Zeitskala $t \sim \omega^{-1}$ sinnvoll.