Prof. Dr. A. Maas
Institut für Physik

N A W I
G R A Z

Test zur Vorlesung Quantenmechanik

SS 2020

30. Juni 2020

Name: ____________________

Matrikelnummer: ____________________ ID Nummer: __________

Abgabetermin: 29.07.2020 über Moodle als Scan oder (ausreichend gute) Photograhpie von einer handschriftlichen (nicht Tablet o. ä.) Lösung via Moodle. Um die Arbeit der Korrigierenden zu erleichtern, wird dringend erbeten, die Abgabe in Form einer PDF Dateien zu kombinieren. Bitte jedes Blatt mit Name und Matrikelnummer versehen. Verwenden Sie Resultate von früheren Aufgaben oder Texte, kennzeichnen Sie bitte eindeutig die Quellen. Sie haben mit 50% der Punkte sicher bestanden.

Aufgabe T1: Störungstheorie (10+10+5=25 Punkte)

Betrachten Sie die folgenden gestörten Oszillator:

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + \hbar\Omega(a^{\dagger 4} + a^4)$$

a) Bestimmen Sie mittels Störungstheorie die Energie und den Eigenket bis zur zweiten Ordnung im kleinen Parameter Ω.

b) Verwenden Sie Variationsrechnung mit dem Versuchsket $|0\rangle + \alpha|4\rangle$ zur Bestimmung des Grundzustandes und der Grundzustandsenergie. Variieren Sie dazu α um ein optimales Ergebnis zu erzielen. Warum ist dieser Versuchsket auf den ersten Blick gut geeignet?

c) Vergleichen sie die Ergebnisse aus (a) und (b) und schätzen Sie ein, welches der beiden Ergebnisse Sie als zuverlässiger ansehen.

Aufgabe T2: Zeitentwicklung (5+10+10=25 Punkte)

Betrachten Sie das folgende 3-Zustandssystem

$$H = H_0 + \alpha\theta(t)V = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & i\delta \\ 0 & -i\delta & \Delta \end{pmatrix} + \alpha\theta(t)\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

in dem alle Konstanten reell und positiv sind und $\epsilon < \Delta - \delta$.

a) Finden Sie die vollen, zeitabhängigen Lösungen der Schrödinegrgleichung für $\alpha = 0$.

b) Den Propagator kann man auch für diskrete Systeme bestimmen. Hierzu verwendet man dann eine entsprechenden diskrete Basis anstelle von Eigenzuständen des Ortsoperators. Z.B. bildet in diesem System die übliche kartesische Basis einen Satz von drei Zuständen. Der Propagator gibt dann an, wie die Zeitentwicklung verläuft unter Berücksichtigung aller Wechsel zwischen diesen Zuständen. Verwenden Sie jetzt diesen Ansatz, um den Propagator zu bestimmen, und verwenden Sie diesen um die Zeitentwicklung des Zustandes $(1,1,1)/\sqrt{3}$ von $t=0$ zu einer späteren Zeit t zu bestimmen. Wie groß ist der Überlapp dieses Zustandes mit den Energieeigenzuständen als Funktion der Zeit?

c) Wenn α klein ist, kann man die Zeitentwicklung auch mittels zeitabhängiger Störungstheorie bestimmen. Bestimmen Sie die Zeitentwicklung des ungestörten Grundzustandes mittels der Dyson-Gleichung bis zur Ordnung α, startend bei $t_0 = 0$.

Hinweis: Zur Bestimmung von Matrixexponentialen diagonaliserbarer Matrizen hilft oft $\exp(M) = \exp(S^{-1}DS) = S^{-1}\exp(D)S$, wobei S die Matrix M zur Diagonalmatrix D transformiert.

Aufgabe T3: Interpretation (10 Punkte)

Geben Sie Ihre Interpretation, wie Sie Quantenmechanik verstehen. Begründen Sie Ihre Antwort. Verwenden Sie maximal 250 Worte.

Lösungen:

Aufgabe T1

a) Dazu werden zunächst die Matrixelemente benötigt. Diese sind

$$\langle n|V|k\rangle = \delta_{nk+4}\sqrt{(k+4)(k+3)(k+2)(k+1)} + \delta_{nk-4}\sqrt{(k-3)(k-2)(k-1)k},$$

d. h., es werden nur Zustände mit um 4 differierende Quantenzahlen verbunden.
Damit verschwindet zunächst $\Delta_0^{(0)}$. Für den Zustand trägt nur der Term bei, der den Zustand 0 und 4 verbindet, und liefert

$$|0^{(1)}\rangle = -\frac{\sqrt{3}\Omega}{\sqrt{2}\omega}|4^{(0)}\rangle.$$

wobei der Entwicklungsparameter Ω hier und im weiteren explizit mit angegeben wird.
Zur zweiten Ordnung ist die Energieänderung nicht Null und

$$\Delta_0^{(2)} = -\frac{6\Omega}{\omega}\hbar\Omega, \tag{1}$$

und verringert damit die Grundzustandsenergie. Für den Zustand selbst ist der Term mit V_{nn} nicht relevant, da dieser immer Null ist. Im ersten Term bleibt von der Doppelsumme nur der $k=8$ und $l=4$ Term übrig, da der Grundzustand selbst nicht auftauchen kann, um einmal hoch und einmal runtergehen zu können. Damit ergibt sich

$$|0^2\rangle = \frac{3\sqrt{35}\Omega^2}{2\sqrt{2}\omega^2}|8^{(0)}\rangle.$$

Zuletzt braucht es noch die Wellenfunktionsrenormierung, welche sich zu

$$Z_0 = 1 - \frac{3\Omega^2}{2\omega^2}$$

ergibt.

b) Der Versuchsket scheint gut geeignet, weil er einbaut, dass die Störung nur Zustände verbinden kann, die um je 4 Energielevel auseinander liegen.
Für die Bestimmung der Grundzustandsenergie benötigt es für den Versuchsket $|v\rangle = |0\rangle + \alpha|4\rangle$

$$\begin{aligned}\frac{\langle v|H|v\rangle}{\langle v|v\rangle} &= \frac{\langle 0|H_0|0\rangle + \alpha^2\langle 4|H|4\rangle + \alpha(\langle 0|V|4\rangle + \langle 4|V|0\rangle)}{1+\alpha^2} \\ &= \frac{\frac{\hbar\omega}{2}\left(1+9\alpha^2\right) + 4\sqrt{6}\alpha\hbar\Omega}{1+\alpha^2}.\end{aligned}$$

Ableiten nach α liefert die Minimierungsbedingung

$$\frac{4\hbar}{(1+\alpha^2)^2}\left(2\alpha\omega + \Omega\sqrt{6}(1-\alpha^2))\right) = 0,$$

was als quadratische Gleichung von

$$\alpha_\pm = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{\omega}{\Omega} \pm \sqrt{\frac{\omega^2}{\Omega^2}+6}\right)$$

gelöst wird. Das legt dann auch den optimalen neuen Grundzustandsket fest. Damit ist die obere Grenze für die Grundzustandsenergie

$$e_0 = \frac{5\hbar\omega}{2} \pm 2\sqrt{\omega^2 + 6\Omega^2}, \tag{2}$$

wovon das negative Vorzeichen die bessere Abschätzung liefert.

c) Da die Variationsrechnung eine garantierte obere Grenze liefert, dürfte ihr Ergebnis besser sein, wenn der Wert kleiner ist als das der Störungsrechnung. Man kann das entweder grafisch lösen, oder, da Ω klein ist, das Ergebnis (2) in Ω bis zur vierten Ordnung entwickeln. Bis zur zweiten Ordnung sind die Ergebnisse gleich. Das liefert

$$e_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - 6\frac{\Omega}{\omega}\hbar\Omega + 9\frac{\Omega^3}{\omega^3}\hbar\Omega + \mathcal{O}(\Omega^5).$$

Das ist eine weniger starke Absenkung als (1), und damit lässt sich die Frage nicht lösen, da das Ergebnis aus der Störungsrechnung die tatsächliche Enregie unterschießen könnte.

Aufgabe T2

a) Dies ist ein normales Eigenwertproblem einer 3×3 Matrix. Die Energien sind die Eigenwerte ϵ und $\Delta \pm \delta$. Die drei Eigenkets sind

$$|\epsilon\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}; \qquad |\Delta+\delta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\i\\1\end{pmatrix}; \qquad |\Delta-\delta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\-i\\1\end{pmatrix}.$$

Die zeitabhängigen Lösungen sind $e^{i\frac{Et}{\hbar}}|E\rangle$, da der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist.

b) Es gibt mehrere Wege, wie man den Propagator in dieser Basis bestimmen kann. Der direkteste ist durch die Berechnung

$$K_{ij}(t,t_0) = \left(e^{-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}H_0}\right)_{ij} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i(t-t_0)\epsilon}{\hbar}} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i(t-t_0)\Delta}{\hbar}}\cos\left(\frac{i(t-t_0)\delta}{\hbar}\right) & e^{-\frac{i(t-t_0)\Delta}{\hbar}}\sin\left(\frac{i(t-t_0)\delta}{\hbar}\right) \\ 0 & -e^{-\frac{i(t-t_0)\Delta}{\hbar}}\sin\left(\frac{i(t-t_0)\delta}{\hbar}\right) & e^{-\frac{i(t-t_0)\Delta}{\hbar}}\cos\left(\frac{i(t-t_0)\delta}{\hbar}\right) \end{pmatrix}_{ij}$$

was den Zeitentwicklungsoperator in dieser Basis liefert, und damit den Propagator. Die Matrixelemente ij übernehmen die Rolle von x und y. Alternativ kommt man auch mit der Formel (9.10) aus dem Skript zum selben Ergebnis.
Die Zeitentwicklung ergibt sich als

$$|t\rangle = K(t,0)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} e^{-\frac{it\epsilon}{\hbar}} \\ e^{-\frac{it\Delta}{\hbar}}\left(\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) + \sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right) \\ e^{-\frac{it\Delta}{\hbar}}\left(\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) - \sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right) \end{pmatrix}.$$

Die Überlapps sind die Skalarprodukte, und liefern

$$|\langle E|t\rangle|^2 = \frac{1}{3}$$

für alle Eigenzustände.

c) Die Dysonreihe bis zu ersten Ordnung ist

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t V_I(t)$$

Dazu braucht es

$$V_I = \alpha\theta(t)e^{\frac{it}{\hbar}H_0}Ve^{-\frac{it}{\hbar}H_0} = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\alpha\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) & e^{-\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\alpha\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) \\ -e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\alpha\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) & 0 & 0 \\ e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\alpha\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

wobei das Ergebnis der (b) verwendet wurde. Integration bis t liefert

$$\begin{aligned}
U_I(t) &= 1 - i\alpha u \\
0 &= u_{11} = u_{22} = u_{23} = u_{32} = u_{33} \\
u_{12} &= -\frac{e^{-\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\left(e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\delta - \cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\delta - i(\Delta-\epsilon)\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right)}{(\delta+\Delta-\epsilon)(\delta-\Delta+\epsilon)} \\
u_{13} &= -\frac{ie^{-\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\left(e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}(\epsilon-\Delta) + (\Delta-\epsilon)\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) + i\delta\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right)}{(\delta+\Delta-\epsilon)(\delta-\Delta+\epsilon)} \\
u_{21} &= \frac{\left(e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\left(\delta\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) - i(\Delta-\epsilon)\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right) - \delta\right)}{(\delta+\Delta-\epsilon)(\delta-\Delta+\epsilon)} \\
u_{31} &= \frac{\left(e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\left(i(\Delta-\epsilon)\cos\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) + \delta\sin\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)\right) - i(\Delta-\epsilon)\right)}{(\delta+\Delta-\epsilon)(\delta-\Delta+\epsilon)}
\end{aligned}$$

Damit bleibt nur noch das Ergebnis zu bestimmen. Die Zeitentwicklung des Grundzustandes ist damit

$$U_I(t)e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 + \frac{\alpha}{\hbar}e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\sin\frac{t\delta}{\hbar} \\ 1 - \frac{\alpha}{\hbar}e^{\frac{it(\Delta-\epsilon)}{\hbar}}\cos\frac{t\delta}{\hbar} \end{pmatrix}.$$

Aufgabe T3

Es gibt hier keine 'richtige' Antwort. Sofern die Bergündung logisch konsistent ist, und nicht im Widerspruch zu den experimentellen Resultaten steht, ist jede Antwort akzeptabel. Lediglich eine Antwort ohne Begründung, wie 'Kopenhagener Deutung' oder dergleichen, ist nicht ausreichend.

Was nicht gefragt ist, ist, z. B., die Postulate der Quantenmechanik. Es geht darum, welche Aussage die Quantemechanik nach Ansicht des Beantwortenden über die Eigenschaften der Natur macht, wie z. B. die Kopenhagener Deutung die Interpretation macht, dass die Natur inhärent nichtdeterministisch ist, und eine harte Unterscheidung zwischen klassische Physik und Quantenphysik existiert.