

Universität Osnabrück Fachbereich Physik	Numerische Physik WS 2004/2005	Apl. Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uos.de
---	-----------------------------------	--

Aufgabenblatt 5

4.1 Arbeiten mit nichtorthogonalen Basen

In einigen Gebieten der Theoretischen Physik ist es manchmal günstig, mit nicht-orthogonalen Basen zu arbeiten.¹ Solche Basen können durch kohärente Zustände gegeben sein, die in der Quantenoptik oder der Teilchenphysik verwendet werden. Ein anderes Beispiel sind spin-kohärente Zustände, die in der Theorie des Magnetismus verwendet werden. In dieser Aufgabe sollen die kohärenten Zustände (in einer Raumdimension) vorgestellt werden.

Kohärente Zustände sind nichts anderes als Gaußsche Wellenpakete, die unnormiert die folgende Form haben

$$\langle x | r_m, k_m \rangle = \exp \left\{ -\frac{(x - r_m)^2}{2a} + ixk_m \right\}. \quad (1)$$

Kohärente Zustände sind also durch die beiden Parameter r_m und $k_m = p_m/\hbar$ gekennzeichnet. Die Breite aller Wellenpakete sei hier durch ein festes reelles a gegeben.

- Stellen Sie zwei von Ihnen gewählte kohärente Zustände mit einem Programm Ihrer Wahl dar, einmal mit $k_m = 0$ und einmal mit $k_m \neq 0$.
- Die Parameter r_m und k_m haben eine einfach anschauliche Bedeutung, die sich Ihnen erschließt, wenn Sie die Erwartungswerte von \tilde{x} und $\tilde{k} = \tilde{p}/\hbar$ berechnen.
- Für das folgende Beispiel der approximativen Berechnung der Energieeigenwerte und -eigenvektoren des unendlich hohen Kastenpotentials brauchen wir die folgenden beiden Matrixelemente $\langle r_m, k_m | r_n, k_n \rangle$ und $\langle r_m, k_m | \tilde{k}^2 | r_n, k_n \rangle$ **analytisch**. Dabei beschreibt der erste Ausdruck die sogenannte Überlappmatrix, d.h. die Skalarprodukte zwischen den verschiedenen kohärenten Zuständen, der zweite Ausdruck ist die Matrixdarstellung der kinetischen Energie, wobei alle „unwichtigen“ Konstanten weggelassen wurden.

Die Qual des Ausrechnens wollte ich Ihnen eigentlich ersparen, aber kurz darauf habe ich herausgefunden, daß Mathematica die Matrixelemente

$$O_{mn} = \langle r_m, k_m | r_n, k_n \rangle, \quad (2)$$

$$T_{mn} = \langle r_m, k_m | \tilde{k}^2 | r_n, k_n \rangle. \quad (3)$$

analytisch berechnen kann. Beim zweiten sollte man nur den Spezialfall berechnen, bei dem die k_m alle Null sind. Selbst dann ist die Formel, die Mathematica liefert, noch sehr lang. Wenn man ein konkretes a vorgibt, z.B. $a = 13$, kann man die Kurzfassung sehen.

¹Dieses Thema kommt in der üblichen Ausbildung praktisch überhaupt nicht vor. Man findet aber zum Beispiel in *Quantum Mechanics* von Eugen Merzbacher (Wiley, New York, 3. Auflage, 1998) einen Abschnitt darüber.

- d. Im folgenden Schritt wollen wir die Energieeigenwerte für ein Kastenpotential der Länge 1, d.h. von $x = 0$ bis $x = 1$ approximativ mit kohärenten Zuständen ausrechnen. In einem ersten Anlauf nehmen wir $N = 10$ Zustände für die gelten soll: $r_m = m/N - 0.5/N$ und $k_m = 0$ mit $m = 1, \dots, N$, d.h., die Wellenpakete sitzen gleichabständig wie Hühner auf der Stange. Für a wählen wir $a = N^{-2}$

Da die gewählten Basiszustände nicht orthogonal sind, können wir nicht einfach die Eigenwerte der Matrix T_{mn} bestimmen, sondern müssen die folgende Bestimmungsgleichung verwenden

$$\sum_n (T_{mn} - E_k O_{mn}) \langle r_n, k_n | \phi_k \rangle = 0. \quad (4)$$

Lösen Sie dieses Eigenwertproblem mit einem Verfahren Ihrer Wahl und vergleichen Sie die Eigenwerte mit den exakten. Überprüfen Sie, wie sich die Lösung ändert, wenn Sie 20 statt 10 kohärente Zustände nehmen.

- e. Vielleicht fällt Ihnen folgendes auch auf: Das Ergebnis ist nicht sonderlich gut, ja es erfüllt nicht einmal die Grenzwerteigenschaft des Ritzverfahrens (Was war das noch mal?). Haben Sie eine Idee, warum? Wenn man viel mehr Zustände nimmt, wird alles nur noch schlimmer. Warum?
- f. **Zusatzaufgabe:** Die Eigenzustände, die von den entsprechenden Routinen wie `dsygv.f` (LAPACK) ausgegeben werden, sind nicht orthogonal. Schauen Sie sich die Dokumentation an und versuchen Sie, sie zu verstehen. Wie kann ich orthogonale Eigenvektoren bekommen? Berechnen und plotten Sie den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand.

Die Spaltenvektoren sind nicht orthonormal, wohl aber die kompletten Eigenfunktionen. Das erklärt übrigens, warum die Spaltenvektoren so normiert sind und nicht anders!