Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 14

Prof. Dr. Gerd Schön
Andreas Heimes, Dr. Andreas Poenicke

Blatt 7
Besprechung 18.06.2014

---

1. Zeitentwicklung (4 Punkte)

Gegeben sei der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z. \tag{1}$$

Zur Zeit $t = 0$ präparieren wir einen beliebigen Zustand

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \tag{2}$$

mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

(a) (1 Punkt) Der Zeitentwicklungsoperator ist gegeben durch

$$\hat{U}(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{3}$$

Angewandt auf den Zustand zur Zeit $t = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0)\,|\psi(0)\rangle &= \hat{U}(t,0)(\alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle) \\ &= e^{i\frac{\omega_0}{2}t}\alpha\,|0\rangle + e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\beta\,|1\rangle\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für den Erwartungswert $\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_y|\psi(t)\rangle$ im Schrödingerbild

$$\begin{aligned}&(e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\alpha^*\,\langle 0| + e^{i\frac{\omega_0}{2}t}\beta^*\,\langle 1|)\hat{\sigma}_y(e^{i\frac{\omega_0}{2}t}\alpha\,|0\rangle + e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\beta\,|1\rangle) \\ &= \langle 0|\hat{\sigma}_y|1\rangle\,e^{-i\omega_0 t}\alpha^*\beta + \langle 1|\hat{\sigma}_y|0\rangle\,e^{i\omega_0 t}\alpha\beta^* \\ &= -i\alpha^*\beta[\cos(\omega_0 t) - i\sin(\omega_0 t)] + i\beta^*\alpha[\cos(\omega_0 t) + i\sin(\omega_0 t)] \\ &= 2\,\mathrm{Im}\,(\alpha^*\beta)\cos(\omega_0 t) - 2\,\mathrm{Re}\,(\alpha^*\beta)\sin(\omega_0 t)\end{aligned}$$

(b) (1 Punkt) Nun bestimmen wir $\hat{\sigma}_y^H(t)$ im Heisenbergbild. Beachten Sie, dass $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z$ und damit $\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y\hat{U}$, also

$$\begin{aligned}\hat{U}^\dagger(t,0)\hat{\sigma}_y\hat{U}(t,0) &= \hat{\sigma}_y\hat{U}^2(t,0) \\ &= \hat{\sigma}_y[\cos^2\left(\tfrac{\omega_0}{2}t\right) - \sin^2\left(\tfrac{\omega_0}{2}t\right)] - \hat{\sigma}_x 2\cos\left(\tfrac{\omega_0}{2}t\right)\sin\left(\tfrac{\omega_0}{2}t\right) \\ &= \hat{\sigma}_y\cos(\omega_0 t) - \hat{\sigma}_x\sin(\omega_0 t) = \hat{\sigma}_y^H(t)\end{aligned}$$

Damit ergibt sich der Erwartungswert

$$\langle\psi(0)|\hat{\sigma}_y^H(t)|\psi(0)\rangle = 2\,\mathrm{Im}\,(\alpha^*\beta)\cos(\omega_0 t) - 2\,\mathrm{Re}\,(\alpha^*\beta)\sin(\omega_0 t). \tag{4}$$

Wir sehen also, dass das Schrödingerbild und das Heisenbergbild dasselbe Ergebnis liefern.

(c) (1 Punkt) Zur Zeit $t = 0$ sei der Zustand (2) präpariert. Nach der Zeit τ_1 wird die Observable $\hat{\sigma}_x$ gemessen. Die Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{\sigma}_x$ sind gegeben durch

$$EW = +1: \qquad |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \tag{5}$$

$$EW = -1: \qquad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \tag{6}$$

Desweiteren kann $|\psi(t)\rangle$ als Linearkombination von $|\pm\rangle$ geschrieben werden,

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha e^{i\frac{\omega_0}{2}t} + \beta e^{-i\frac{\omega_0}{2}t})\,|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha e^{i\frac{\omega_0}{2}t} - \beta e^{-i\frac{\omega_0}{2}t})\,|-\rangle$$

Damit messen wir den EW $+1$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(+,\tau_1) = |\,\langle +|\psi(\tau_1)\rangle\,|^2 &= \frac{1}{2}\left|\alpha e^{i\frac{\omega_0}{2}\tau_1} + \beta e^{-i\frac{\omega_0}{2}\tau_1}\right|^2 \\ &= \frac{1}{2}\big(|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,(\alpha\beta^*)\cos(\omega_0\tau_1) - 2\,\mathrm{Im}\,(\alpha\beta^*)\sin(\omega_0\tau_1)\big) \\ &= \frac{1}{2}\big(1 + 2\,\mathrm{Re}\,(\alpha\beta^*)\cos(\omega_0\tau_1) - 2\,\mathrm{Im}\,(\alpha\beta^*)\sin(\omega_0\tau_1)\big) \end{aligned}$$

und den EW -1 mit der Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(-,\tau_1) = |\,\langle -|\psi(\tau_1)\rangle\,|^2 &= \frac{1}{2}\left|\alpha e^{i\frac{\omega_0}{2}\tau_1} - \beta e^{-i\frac{\omega_0}{2}\tau_1}\right|^2 \\ &= \frac{1}{2}\big(1 - 2\,\mathrm{Re}\,(\alpha\beta^*)\cos(\omega_0\tau_1) + 2\,\mathrm{Im}\,(\alpha\beta^*)\sin(\omega_0\tau_1)\big) \end{aligned}$$

(d) (1 Punkt) Nach der Messung in (c) ist das System entweder im Zustand $|+\rangle$ oder im Zustand $|-\rangle$. Die Zeitentwicklung eines solchen Zustandes ist gegeben durch

$$\begin{aligned} |\pm\rangle\,(\tau_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)}\,|0\rangle \pm e^{-i\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)}\,|1\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(e^{i\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)}[|+\rangle + |-\rangle] \pm e^{-i\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)}[|+\rangle - |-\rangle]) \\ &= \begin{cases} \cos(\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1))\,|+\rangle + i\sin(\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1))\,|-\rangle \\ i\sin(\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1))\,|+\rangle + \cos(\frac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1))\,|-\rangle \end{cases} \end{aligned}$$

D.h. die bedingte Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert ± 1 bei der zweiten Messung zu messen, ist gegeben durch

$$\begin{aligned} P_+(+,\tau_2) &= \cos^2(\tfrac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)) \\ P_+(-,\tau_2) &= \sin^2(\tfrac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)) \\ P_-(+,\tau_2) &= \sin^2(\tfrac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)) \\ P_-(-,\tau_2) &= \cos^2(\tfrac{\omega_0}{2}(\tau_2-\tau_1)) \end{aligned}$$

Die gemeinsamen Wahrscheinlichkeiten für die kombinierte Messung zu den Zeitpunkten τ_1 und τ_2 ist gegeben durch

$$\begin{aligned} P(+,\tau_2;+,\tau_1) &= P_+(+,\tau_2)P(+,\tau_1) \\ P(+,\tau_2;-,\tau_1) &= P_-(+,\tau_2)P(-,\tau_1) \\ P(-,\tau_2;+,\tau_1) &= P_+(-,\tau_2)P(+,\tau_1) \\ P(-,\tau_2;-,\tau_1) &= P_-(-,\tau_2)P(-,\tau_1) \end{aligned}$$

2. Wahrscheinlichkeitsverteilung und charakteristische Funktion (3 Punkte)

(a) (1 Punkt) Die sogenannte charakteristische Funktion ist definiert durch

$$F(z) = \langle e^{iz\hat{A}} \rangle \,, \tag{7}$$

Leitet man diese mehrfach nach z ab, so erhält man

$$\partial_z F(z) = \langle i\hat{A}e^{iz\hat{A}} \rangle \tag{8}$$

$$\vdots \tag{9}$$

$$\partial_z^n F(z) = i^n \langle \hat{A}^n e^{iz\hat{A}} \rangle \tag{10}$$

Im Limes $z \to 0$ erhalten wir

$$\langle \hat{A}^n \rangle = (-i)^n \partial_z^n F(z)\big|_{z=0} \tag{11}$$

(b) (1 Punkt) Die Wahrscheinlichkeit, a_n zu messen, wenn der Zustand $|\psi\rangle$ präpariert ist, ist gegeben durch $P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2$. Wir finden

$$\begin{aligned}
\langle e^{iz\hat{A}} \rangle &= \langle \psi| \sum_{mn} |a_m\rangle \langle a_m| e^{iz\hat{A}} |a_n\rangle \langle a_n|\psi\rangle \\
&= \sum_n |\langle a_n|\psi\rangle|^2 e^{iza_n} \\
&= \sum_n P(a_n) e^{iza_n} = F(z)
\end{aligned}$$

und damit

$$P(a_m) = \int \tfrac{dz}{2\pi} e^{-iza_m} F(z) \tag{12}$$

$$= \sum_n P(a_n) \int \tfrac{dz}{2\pi} e^{-iza_m} e^{iza_n} \tag{13}$$

Beachten Sie, dass für unseren Fall in Aufgabenteil (c) $a_n \in \mathbb{Z}$ und

$$\int_{-\pi}^{\pi} \tfrac{dz}{2\pi} e^{-iza_m} e^{iza_n} = \delta_{mn} \tag{14}$$

und damit

$$\sum_n P(a_n)\delta_{mn} = P(a_m) \tag{15}$$

Im Fall, dass $P(x)$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte einer kontinuierlichen Variable x und $F_x(z)$ die entsprechende charakteristische Funktion ist, gilt

$$P(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izx} F_x(z). \tag{16}$$

(c) (1 Punkt) Ein Zwei-Zustands-System sei im Grundzustand $|\psi\rangle = |0\rangle$ präpariert und es werde die Observable $\hat{A} = \hat{\sigma}_x$ mit den möglichen Werten a_m gemessen. Die charakteristische Funktion für diesen Fall ist gegeben durch

$$F(z) = \langle 0|e^{iz\hat{\sigma}_x}|0\rangle = \langle 0|\cos(z) + i\hat{\sigma}_x \sin(z)|0\rangle = \cos(z). \tag{17}$$

Mit (12) erhalten wir

$$\begin{aligned} P(a_m) &= \frac{1}{2}\int \tfrac{dz}{2\pi} e^{-iza_m}(e^{iz} + e^{-iz}) \\ &= \frac{1}{2}(\delta_{a_m,1} + \delta_{a_m,-1}). \end{aligned} \tag{18}$$

Damit ist die Wahrscheinlichkeit $a_m = \pm 1$ zu messen jeweils $\frac{1}{2}$.

3. Quantenmechanischer Virialsatz (3 Punkte)

Analog zur klassischen Mechanik gibt der Virialsatz auch in der Quantenmechanik einen Zusammenhang zwischen dem Erwartungswert der kinetischen Energie $\langle \hat{T} \rangle$ und dem Erwartungswert der potentiellen Energie $\langle V \rangle$. In einer Dimension gilt für stationäre Zustände:

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \left\langle \frac{\hat{P}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \hat{X}\nabla V(\hat{X}) \right\rangle. \tag{19}$$

Dieser Zusammenhang sollte hergeleitet und angewendet werden:

(a) (1 Punkt) Zuerst muss gezeigt werden, dass für einen stationären Zustand gilt

$$\langle [\hat{H}, \hat{X}\hat{P}] \rangle = \langle \hat{H}\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P}\hat{H} \rangle = 0, \tag{20}$$

man berechnet den Erwartungswert der rechten Seite von (20) direkt, wobei man berücksichtigt das für stationäre Zustände $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ gilt:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P}\hat{H} \rangle &= \langle n|\, \hat{H}\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P}\hat{H}\, |n\rangle = \langle n|\, E_n\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P}E_n\, |n\rangle \\ &= E_n \langle n|\, \hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P}\, |n\rangle = 0. \end{aligned} \tag{21}$$

(b) (1 Punkt) Nun berechnet man in (20) den Kommutator

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{X}\hat{P}] &= \hat{X}\big[\hat{H}, \hat{P}\big] + \big[\hat{H}, \hat{X}\big]\hat{P} = \hat{X}\big[V(x), \hat{P}\big] + \big[\frac{\hat{P}^2}{2m}, \hat{X}\big]\hat{P} \\ &= \hat{X}\big[V(x), \hat{P}\big] - 2i\hbar\frac{\hat{P}}{2m}\hat{P} = \hat{X}\big[V(x), \hat{P}\big] - i\hbar\frac{\hat{P}^2}{m} \end{aligned} \tag{22}$$

Der verbleibende Kommutator wird jetzt in der Ortsdarstellung ausgewertet

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{X}\hat{P}] &= \hat{X}\frac{\hbar}{i}\big(V(x)\partial_x - (\partial_x V(x)) - V(x)\partial_x\big) - 2i\hbar\frac{\hat{P}^2}{2m} \\ &= i\hbar\hat{X}\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x} - 2i\hbar\frac{\hat{P}^2}{2m} \end{aligned} \tag{23}$$

und mit (20) erhält man den Virialsatz (19).

(c) (1 Punkt) Das Potential $V(\hat{X})$ sei nun durch $V(\hat{X}) = \lambda \hat{X}^n,\ n \in \mathbb{R}$ gegeben.
Mit dem Virialsatz erhält man

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{X} \nabla V(\hat{X}) \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{X} n \lambda \hat{X}^{n-1} \rangle = \frac{n}{2} \langle V(\hat{X}) \rangle \,. \tag{24}$$

Dieses Ergebnis hätte man auch darstellungsfrei aus (22) erhalten können:
In Aufgabe 3d) von Blatt 5 haben wir gezeigt, das gilt

$$[\hat{P}, \hat{X}^n] = -in\hbar \hat{X}^{n-1} \tag{25}$$

damit

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{i}{2\hbar} \langle \hat{X} \big[\hat{P}, V(x) \big] \rangle = \frac{i}{2\hbar} \langle \hat{X} \big(-in\hbar\, \lambda \hat{X}^{n-1} \big) \rangle = \frac{n}{2} \langle \lambda \hat{X}^n \rangle = \frac{n}{2} \langle V(\hat{X}) \rangle \tag{26}$$

Für den harmonischen Oszillator $V(\hat{X}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2$ gilt also

$$\langle \hat{T} \rangle \,/\, \langle V \rangle = 1. \tag{27}$$