Gesamtpunktzahl: **14 Punkte**

Übungsbetreuung: Stefan Liebler (stefan.liebler@kit.edu)

Aufgabe 1: Quantenmechanischer Virialsatz **2+3 = 5 Punkte**

Betrachten Sie die stationären Zustände gegeben durch die Energieeigenfunktionen $|\psi_E\rangle$ mit

$$H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle\,, \qquad H = \frac{1}{2m}P_x^2 + V, \qquad H = H^\dagger\,.$$

(a) Zeigen Sie, dass für jeden Operator A der Erwartungswert $\langle\psi_E|\,[A,H]\,|\psi_E\rangle$ im Zustand $|\psi_E\rangle$ verschwindet. *Hinweis:* Führen Sie die Rechnung vollständig im Hilbert-Raum mit $|\psi_E\rangle$ durch, eine Verwendung der Orts- oder Impulsraumdarstellung ist nicht notwendig!

(b) Beweisen Sie für eindimensionale Potentiale der Form $V = \alpha x^k$ mit α, k reell den quantenmechanischen Virialsatz für Erwartungswerte von Energieeigenzuständen:

$$\left\langle \frac{1}{2m}P_x^2 \right\rangle = \frac{k}{2}\langle V\rangle \qquad .$$

Hinweis: Betrachten Sie den Kommutator $[H, P_x X]$ und benutzen Sie (a). Nutzen Sie hier den Impulsoperator im Ortsraum. Sie erhalten für den angegebenen Kommutator $[H, P_x X] = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{m}P_x^2 - kV\right)$.

Lösung der Aufgabe 1

(a) Hier folgt durch einfache Umformungen

$$\begin{aligned}\langle\psi_E|\,[A,H]\,|\psi_E\rangle &= \langle\psi_E|(AH - HA)\psi_E\rangle \\ &= \langle\psi_E|AH\psi_E\rangle - \langle\psi_E|HA\psi_E\rangle = \langle\psi_E|AE\psi_E\rangle - \left\langle H^\dagger\psi_E|A\psi_E\right\rangle \\ &= \langle\psi_E|AE\psi_E\rangle - \langle H\psi_E|A\psi_E\rangle = E\,\langle\psi_E|A\psi_E\rangle - \langle\psi_E E|A\psi_E\rangle \\ &= E\,\langle\psi_E|A\psi_E\rangle - E^*\,\langle\psi_E|A\psi_E\rangle = E\,\langle\psi_E|A\psi_E\rangle - E\,\langle\psi_E|A\psi_E\rangle = 0\,.\end{aligned}$$

Dabei wurde benutzt, dass $H = H^\dagger$ und daher auch $E = E^*$ gilt.

(b) Wie angegeben betrachten wir den Kommutator $[H, P_x X]$ und finden

$$[H, P_x X] = \left[\frac{P_x^2}{2m} + V, P_x X\right] = \underbrace{\left[\frac{P_x^2}{2m}, P_x X\right]}_{=:1)} + \underbrace{[V, P_x X]}_{=:2)}\,.$$

Es folgt für 1)

$$\begin{aligned}\left[\frac{P_x^2}{2m}, P_x X\right] &= \underbrace{\left[\frac{P_x^2}{2m}, P_x\right]}_{=0} X + P_x\left[\frac{P_x^2}{2m}, X\right] \\ &= \frac{P_x}{2m}\left[P_x^2, X\right] = \frac{P_x}{2m}\left(P_x\,[P_x, X] + [P_x, X]\,P_x\right) = \frac{P_x}{2m}2\frac{\hbar}{i}P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{P_x^2}{2m}\,.\end{aligned}$$

Hierbei wurde der Kommutator $[P_x, X] = \frac{\hbar}{i}$ gemäß Vorlesung benutzt. Weiter ergibt sich für 2)

$$[V, P_x X] = \left[\alpha X^k, P_x X\right] = \left[\alpha X^k, P_x\right] X + P_x \underbrace{\left[\alpha X^k, X\right]}_{=0} = (\alpha X^k P_x X - \alpha P_x X^{k+1}) .$$

Im Ortsraum ist nun $X = x$ und $P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ und somit

$$[V, P_x X] = (\alpha x^k \frac{\hbar}{i} - \alpha \frac{\hbar}{i}(k+1)x^k) = \frac{\hbar}{i}\alpha x^k (1 - (k+1)) = -\frac{\hbar}{i} kV .$$

Damit folgt der angegebene Hinweis

$$[H, P_x X] = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{P_x^2}{m} - kV\right) .$$

Gemäß Teilaufgabe (a) verschwindet der Erwartungswert von $\langle\psi_E|[H, P_x X]|\psi_E\rangle$ und daher ergibt sich

$$\frac{\hbar}{i}\left\langle \psi_E | \frac{P_x^2}{m} | \psi_E \right\rangle = \frac{\hbar}{i}\langle\psi_E|kV|\psi_E\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \left\langle \frac{1}{2m} P_x^2 \right\rangle = \frac{k}{2}\langle V\rangle .$$

Aufgabe 2: Teilchen in einem Magnetfeld **2+2+1+1 = 6 Punkte**

Wir betrachten in dieser Aufgabe ein Teilchen in einem Magnetfeld und möchten uns bekannte klassische Resultate auf die Quantenmechanik übertragen.

(a) Zunächst betrachten wir die klassische Theorie. Ausgangspunkt ist die Lagrangefunktion

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + \frac{q}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}(\vec{x})$$

mit $\vec{v} = \dot{\vec{x}}$ für ein Teilchen der Masse m mit Ladung q in einem Magnetfeld $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Zeigen Sie, dass der zu $\vec{x}$ konjugierte Impuls durch $\vec{p} = m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}$ gegeben ist, und die Hamilton-Funktion durch

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 .$$

(b) Wir erhalten nun die Quantentheorie des Teilchens im Magnetfeld, indem wir $\vec{x}$ und $\vec{p}$ durch Operatoren $\vec{X}$ und $\vec{P}$ ersetzen, die die kanonischen Vertauschungsrelationen erfüllen. Bestimmen Sie den Operator $\vec{V}$, der der Geschwindigkeit $\vec{v}$ des Teilchens entspricht, und berechnen Sie den Kommutator $[V_i, V_j]$ in der Ortsdarstellung. Was stellen Sie fest? *Hinweis:* Starten Sie mit $\vec{P} = m\vec{V} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{X})$. Sie sollten $[V_i, V_j] = i\frac{q\hbar}{cm^2}\epsilon_{ijk}B_k$ erhalten.

(c) Für den Fall eines konstanten Magnetfelds $\vec{B} = (0, 0, B_0)^T$ in z-Richtung können wir $\vec{A} = (-yB_0, 0, 0)^T$ wählen (sogenannte Landau-Eichung). Bestimmen Sie für diesen Fall den Hamilton-Operator und zeigen Sie, dass dieser mit der x- und z-Komponente des Impulsoperators $\vec{P}$ vertauscht.

(d) Stellen Sie noch immer für den Fall des konstanten Magnetfelds die stationäre Schrödingergleichung (mit Energie E) für die Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ auf. Machen Sie einen Produktansatz $\psi(x, y, z) = \exp(ip_0 x/\hbar)\chi(y)$ und finden Sie die Wellengleichung für $\chi(y)$.

Lösung der Aufgabe 2

(a) Die Lagrangefunktion lautet wie angegeben

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + \frac{q}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}(\vec{x})\,.$$

Wir wählen $\vec{x}$ als verallgemeinerten Ort, $\vec{q} = \vec{x}$ und erhalten den zugehörigen Impuls gemäß

$$(\vec{p})_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + \frac{q}{c}A_i(x) = \Big(m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big)_i\,.$$

Die Hamilton-Funktion folgt dann nach

$$\begin{aligned} H = \vec{p}\cdot\dot{\vec{q}} - L &= \Big(m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big)\cdot\vec{v} - \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - \frac{q}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}(\vec{x}) \\ &= \frac{1}{2}m\vec{v}^2 = \frac{1}{2m}\Big(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big)^2\,. \end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt mit Hilfe von $\vec{v} = \frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}))$ alles durch die kanonischen Variablen $\vec{p}$ und $\vec{x}$ ausgedrückt.

(b) Wir stellen die kanonischen Variablen $\vec{x}$ und $\vec{p}$ durch Operatoren mit der kanonischen Vertauschungsrelation $[X_i, P_j] = \delta_{ij} i\hbar\mathbb{I}$ dar. In der Ortsdarstellung ist

$$\begin{aligned} X_i :& \quad \text{Multiplikationsoperator}: \quad X_i\psi(\vec{x}) = x_i\psi(\vec{x}) \\ P_i :& \quad \text{Ableitungsoperator}: \quad P_j\psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\psi(\vec{x})\,. \end{aligned}$$

Mit der Ersetzung $\vec{V} = \frac{1}{m}(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{X}))$ folgt

$$\begin{aligned} [V_i, V_j] &= \frac{1}{m^2}\Big[P_i - \frac{q}{c}A_i(\vec{X}), P_j - \frac{q}{c}A_j(\vec{X})\Big] \\ &= -\frac{1}{m^2}\frac{q}{c}\Big(\Big[P_i, A_j(\vec{X})\Big] + \Big[A_i(\vec{X}), P_j\Big]\Big) \\ &= i\frac{q\hbar}{cm^2}\left((\partial_i A_j(\vec{x})) - (\partial_j A_i(\vec{x}))\right)\,. \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Produktregel benutzt, z.B. $\partial_i A_j\psi = (\partial_i A_j)\psi + A_j\partial_i\psi$, so dass sich einige Terme wegheben. Die Komponenten der Geschwindigkeit vertauschen demnach nicht, sofern ein Magnetfeld im Spiel ist. Wegen $\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$ können wir auch schreiben

$$[V_1, V_2] = i\frac{q\hbar}{cm^2}B_3(\vec{x})\,, \qquad [V_2, V_3] = i\frac{q\hbar}{cm^2}B_1(\vec{x})\,, \qquad [V_3, V_1] = i\frac{q\hbar}{cm^2}B_2(\vec{x})$$

oder in kurz $[V_i, V_j] = i\frac{q\hbar}{cm^2}\epsilon_{ijk}B_k$. Man nennt $m\vec{V}$ auch den kinetischen Impuls.

(c) Für den Hamiltonoperator erhalten wir

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m}\left(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{X})\right)^2 \\ &= \frac{1}{2m}\left(\vec{P}^2 - \frac{q}{c}(\vec{P}\cdot\vec{A}(\vec{X}) + \vec{A}(\vec{X})\cdot\vec{P}) + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}^2(\vec{X})\right) .\end{aligned}$$

Für $\vec{A} = (-B_0 Y, 0, 0)^T$ ist $\vec{A}^2 = B_0^2 Y^2$ und $\vec{P}\cdot\vec{A}(\vec{X}) = P_x(-B_0 Y) = -B_0 Y P_x = \vec{A}(\vec{X})\cdot\vec{P}$. Somit ergibt sich

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 + 2\frac{q}{c}B_0 Y P_x + \frac{q^2}{c^2}B_0^2 Y^2\right) .$$

Offenbar kommt weder X noch Z in H vor, daher vertauscht H mit P_x und P_z. Es gilt

$$[P_x, H] = [P_z, H] = 0 .$$

(d) Die stationäre Schrödingergleichung im Ortsraum ist $H\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$ und somit

$$\frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 + 2\frac{q}{c}B_0 y P_x + \frac{q^2}{c^2}B_0^2 y^2\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) .$$

Der Ansatz $\psi(x,y,z) = \exp(ip_0 x/\hbar)\chi(y)$ ist ein verallgemeinerter Eigenzustand zum Eigenwert p_0 von P_x und zum Eigenwert 0 von P_z. Einsetzen in die obige Gleichung liefert

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}\left(p_0^2 + P_y^2 + 2\frac{q}{c}B_0 y p_0 + \frac{q^2}{c^2}B_0^2 y^2\right)\chi(y) = E\chi(y) \\ &\frac{1}{2m}\left[P_y^2 + \left(\frac{q}{c}B_0 y + p_0\right)^2\right]\chi(y) = E\chi(y) \\ &\left[\frac{1}{2m}P_y^2 + \frac{q^2 B_0^2}{2mc^2}\left(y + \frac{p_0 c}{qB_0}\right)^2\right]\chi(y) = E\chi(y) .\end{aligned}$$

Wir fügen hinzu, dass es sich dabei um die stationäre Schrödingergleichung des eindimensionalen harmonischen Oszillators handelt (mit verschobenem Potential) mit Frequenz

$$\frac{1}{2}m\omega^2 = \frac{1}{2}\frac{q^2 B_0^2}{mc^2} \quad \rightarrow \quad \omega = \frac{qB_0}{mc} .$$

Die Energieniveaus für die Bewegung in der x-y-Ebene ($p_z = 0$) sind unabhängig von p_0 udn äquidistant mit $E_n = \hbar\frac{qB_0}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right)$. Diese diskreten Niveaus sind charakteristisch für Teilchen im Magnetfeld, sind messbar in der Festkörperphysik und heißen Landau-Niveaus:
`https://de.wikipedia.org/wiki/Landau-Niveau`

Aufgabe 3: Observablen und Projektoren **1+1+2 = 4 Punkte**

Wir betrachten ein Teilchen in einer Dimension, dessen Zustand durch eine Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben wird. Nun wird eine Messung durchgeführt. Das Messgerät ist so konstruiert, dass es genau dann ausschlägt, wenn sich das Teilchen in einem bestimmten Intervall I auf der reellen Achse befindet.

(a) Konstruieren Sie die zu dieser Messung gehörende Observable.

(b) Leiten Sie aus den Postulaten der Quantenmechanik eine Formel für die Wahrscheinlichkeit her, das Teilchen bei der Messung im Intervall I zu finden.

(c) Angenommen, bei der Messung findet man, dass sich das Teilchen nicht im Intervall I befindet. Finden Sie, basierend auf den Postulaten der Quantenmechanik, eine Formel für die Wellenfunktion unmittelbar nach der Messung.

Lösung der Aufgabe 3

(a) Klassisch betrachtet ist die Frage, ob das Messgerät ausschlägt eine Funktion von x gemäß

$$O_I(x) = \begin{cases} \text{schlägt aus falls} & x \in I \\ \text{schlägt nicht aus falls} & x \notin I \end{cases} .$$

Wir fassen dies mathematisch in der Form

$$O_I(x) = \left\{ \begin{matrix} 1 & \text{für } x \in I \\ 0 & \text{für } x \notin I \end{matrix} \right\} = \chi_I(x) .$$

Letztere Bezeichnung mit $\chi_I(x)$ erfolgt in Analogie zur charakteristischen Funktion in der Mathematik. In der Quantenmechanik wird x zum Operator und somit auch O_I per Funktionalkalkül. Insbesondere ist O_I in der Ortsdarstellung ein Multiplikationsoperator der Form

$$(O_I\psi)(x) = \chi_I(x)\psi(x) .$$

O_I ist übrigens gleichzeitig ein Projektionsoperator (siehe Blatt 5) auf dem Eigenraum mit Eigenwert 1, denn

$$\begin{aligned} O_I^2 &= \chi_I^2 = \chi_I = O_I \\ O_I^\dagger &= \overline{\chi_I} = \chi_I = O_I \\ O_I &= \mathbb{I}O_I + 0 \cdot (\mathbb{I} - O_I) . \end{aligned}$$

(b) Sei $|x\rangle$, $x \in \mathbb{R}$ ein Eigenvektor von x. Wenn $x \in I$, dann ist $|x\rangle$ ein Eigenvektor von O_I. Daher ergibt sich für die gefragte Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(\text{schlägt aus}) &= P(\text{Messwert } 1) \\ &= \int_{\text{Eigenraum zu 1}} dx\, |\langle \cdot|\psi\rangle|^2 = \int_I dx|\, \langle x|\psi\rangle\, |^2 = \int_I dx|\psi(x)|^2 . \end{aligned}$$

(c) Nach der Messung mit Ergebnis 0 ("schlägt nicht aus") ist das System im Zustand

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_0|\psi\rangle}} P_0 \,|\psi\rangle \ ,$$

wobei P_0 der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert 0 ist. Wir finden explizit für die einzelnen Terme

$$\begin{aligned} P_0 &= 1 - \chi_I \\ \langle\psi|P_0|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx|\psi(x)|^2(1 - \chi_I(x)) = \int_{\mathbb{R}/I} dx|\psi(x)|^2 \\ P_0\,|\psi\rangle &= (1 - \chi_I(x))\psi(x) = \chi_{\mathbb{R}/I}(x)\psi(x) . \end{aligned}$$