

Übung 1. Reeller Energieerwartungswert. Zeige Gleichung (2.4.5) aus dem Vorlesungsskript,

$$\langle H \rangle = \langle H \rangle^* \quad , \quad (1)$$

wobei $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$.

Lösung. Zuerst zeigen wir $\langle p^2 \rangle^* = \langle p^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle^* &= \int_{\mathbb{R}} dx (\Psi(x, t)^* (-\hbar^2 (\partial_x^2 \Psi)(x, t)))^* \\ &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t) (\partial_x^2 \Psi^*)(x, t) \end{aligned}$$

Eine zweifache partielle Integration liefert (wobei wir annehmen wollen, dass die entsprechenden Randterme verschwinden)

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle^* &= \hbar^2 \int_{\mathbb{R}} dx (\partial_x \Psi)(x, t) (\partial_x \Psi^*)(x, t) \\ &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} dx (\partial_x^2 \Psi)(x, t) \Psi(x, t)^* \\ &= \langle p^2 \rangle \quad . \end{aligned}$$

Das impliziert mit V reellwertig

$$\begin{aligned} \langle H \rangle - \langle H \rangle^* &= \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle - \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle^* + \langle V \rangle - \langle V \rangle^* \\ &= \langle V \rangle - \langle V \rangle^* \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx V(x) \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) - \int_{\mathbb{R}} dx V(x) \Psi(x, t) \Psi(x, t)^* \\ &= 0 \end{aligned}$$

Übung 2. Untere Schranke für Energie-Eigenwerte.

Beweise für ein Teilchen in einem nach unten beschränkten dreidimensionalen Potential $V(\mathbf{x})$, d. h. $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} V(\mathbf{x}) = V_0 > -\infty$, dass für den tiefsten Eigenwert (Grundzustands-Eigenwert) E_1 von $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x})$ gilt:

$$E_1 \geq V_0$$

Hinweis: Berechne $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_1(\mathbf{x})^* (H\psi_1)(\mathbf{x})$ für die Grundzustands-Eigenfunktion $\psi_1(\mathbf{x})$ und führe an geeigneter Stelle eine partielle Integration durch, wobei $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \psi_1(\mathbf{x}) = 0$ zu beachten ist.

Lösung. Schrödinger-Gleichung:

$$E\psi = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\mathbf{x})\psi$$

Multiplizieren wir beide Seiten dieser Gleichung mit $\psi(x, t)^*$ und integrieren anschliessend bzgl. der Variablen \mathbf{x} über die reellen Zahlen so erhalten wir:

$$\begin{aligned} E &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}) (H\psi)(\mathbf{x}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}) (\Delta\psi)(\mathbf{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Im ersten Term rechts machen wir die partielle Integration mit Hilfe der Formel

$$\nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi) \equiv \operatorname{div}(\psi^* \nabla \psi) = |\nabla \psi|^2 + \psi^* \Delta \psi$$

und dem Gauss'schen Theorem

$$\int_V d^3x \operatorname{div} \mathbf{A} = \int_S dS (\mathbf{n} \cdot \mathbf{A}), \quad \mathbf{n} \text{ ist normal zur der Oberfläche } S,$$

wobei das Oberflächenintegral mit $\mathbf{A} = \psi^* \nabla \psi$ verschwindet für die normierbare Funktionen ψ . Es ergibt sich dann

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \Delta \psi(\mathbf{x}) + \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\int d^3x |\nabla \psi(\mathbf{x})|^2}_{\geq 0} + \underbrace{\int d^3x [V(\mathbf{x}) - V_0] |\psi(\mathbf{x})|^2}_{\geq 0} + V_0 \underbrace{\int d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2}_1 \geq V_0 \end{aligned}$$

ged. Diese untere Schranke gilt sowohl für die Erwartungswerte der Energie in einem beliebigen Zustand, als auch für alle Energie-Eigenwerte.

Übung 3. Zeitableitungen von Erwartungswerten.

Betrachte ein Teilchen der Masse m in einer Dimension, das einem äusseren Potential $V(x)$ ausgesetzt ist. Der Hamiltonian für dieses quantenmechanische System ist also $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$.

(a) Zeige

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle V'(x) \rangle$$

wobei $V'(x)$ die Ortsableitung von $V(x)$ ist. Verwende dieses Resultat anschliessend um Gleichung (2.3.7) aus dem Vorlesungsskript,

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\frac{1}{m} \langle V'(x) \rangle \quad (2)$$

zu verifizieren.

(b) Nun wollen wir verstehen inwiefern Gleichung (2) sich zur Newtonschen Bewegungsgleichung für die "klassische Position" $\langle x \rangle$ umformen lässt. Dies ist genau dann der Fall wenn $\langle V'(x) \rangle = V'(\langle x \rangle)$ gilt. Nehme im Folgenden ein homogenes Potential $V(x) = V_0 x^n$ an mit $V_0 > 0$ und $n \in \mathbb{N}$.

Für welche n gilt

$$\langle V'(x) \rangle = V'(\langle x \rangle) \quad ? \quad (3)$$

(c) Welche Gleichung erfüllt der Erwartungswert $\langle x \rangle$ für $n = 2$ und $V_0 = \frac{1}{2} m \omega^2$? Löse diese für die Anfangsbedingungen $\langle x \rangle(t=0) = 0$ und $\left(\frac{d}{dt} \langle x \rangle\right)(t=0) = v_0$.

Lösung.

(a) Unter Verwendung von $i\hbar(\partial_t\Psi)(x,t) = (H\Psi)(x,t)$ und H hermitesch finden wir elementar

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt}\langle p \rangle\right)(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x,t)^* \frac{\hbar}{i} (\partial_x \Psi)(x,t) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{\mathbb{R}} dx ((\partial_t \Psi)(x,t))^* (\partial_x \Psi)(x,t) + \Psi(x,t)^* (\partial_x \partial_t \Psi)(x,t) \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx ((H\Psi)(x,t))^* (\partial_x \Psi)(x,t) - \Psi(x,t)^* (\partial_x H\Psi)(x,t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx ((\Delta\Psi)(x,t))^* (\partial_x \Psi)(x,t) - \Psi(x,t)^* (\Delta\partial_x \Psi)(x,t) \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}} dx (V(x)\Psi(x,t))^* (\partial_x \Psi)(x,t) - \Psi(x,t)^* (\partial_x V\Psi)(x,t) \end{aligned}$$

Beim ersten Integral können wir den ersten Term zweimal partiell integrieren. Wie wir bei Übung 1 gesehen haben fällt dann das erste Integral weg. Wir finden des weiteren

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt}\langle p \rangle\right)(t) &= \int_{\mathbb{R}} dx (V(x)\Psi(x,t))^* (\partial_x \Psi)(x,t) - V(x)\Psi(x,t)^* (\partial_x \Psi)(x,t) - V'(x)\Psi(x,t)^* \Psi(x,t) \\ &= -\langle V'(x) \rangle \end{aligned}$$

Dieses Resultat impliziert mit Gleichung (2.3.6) aus der Vorlesung,

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle \quad ,$$

schlussendlich

$$\begin{aligned} m \left(\frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle\right)(t) &= \frac{d}{dt}\langle p \rangle \\ &= -\langle V'(x) \rangle \end{aligned}$$

(b) Es gilt

$$\langle V'(x) \rangle = nV_0\langle x^{n-1} \rangle \quad .$$

Die rechte Seite stimmt (für alle Wellenfunktionen Ψ) lediglich für die Fälle $n = 0, 1, 2$ mit dem erwünschten Ausdruck $nV_0\langle x \rangle^{n-1} = V'(\langle x \rangle)$ überein. Die Gleichheit für $n = 0, 1, 2$ ist klar. Dass Gleichung (3) für $n > 2$ nicht für alle Wellenfunktionen gilt scheint intuitiv klar zu sein und kann aber auch mithilfe der funktionalen Ableitung gezeigt werden. Da die Gleichheit im gegebenen Falle dann für alle Wellenfunktionen gelten muss, folgt für beliebiges x_0 (t sei fest und wir unterdrücken es in der Notation):

$$\frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} \langle x^{n-1} \rangle_{\Psi} = \frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} (\langle x \rangle_{\Psi})^{n-1} . \quad (4)$$

Wir berechnen im Einzelnen ($n \geq 2$):

$$\frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} \langle x^{n-1} \rangle_{\Psi} = \frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} \int dx x^{n-1} \Psi(x)^* \Psi(x) \quad (5)$$

$$= x_0^{n-1} (\Psi(x_0) + \Psi(x_0)^*) \quad (6)$$

und

$$\frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} (\langle x \rangle_{\Psi})^{n-1} = (n-1) (\langle x \rangle_{\Psi})^{n-2} \frac{\delta}{\delta\Psi(x_0)} \langle x \rangle_{\Psi} \quad (7)$$

$$= (n-1) (\langle x \rangle_{\Psi})^{n-2} x_0 (\Psi(x_0) + \Psi(x_0)^*) \quad (8)$$

dies führt für generische Wellenfunktionen auf $(n-1) (\langle x \rangle_{\Psi})^{n-2} = x_0^{n-2}$ und somit gilt Gleichung (3) nur für $n = 0, 1, 2$.

(c) Für $n = 2$ und $V_0 = \frac{1}{2}m\omega^2$ nimmt 2 die Form

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle \quad .$$

Die eindeutige Lösung zu den Anfangsbedingungen lautet

$$\langle x \rangle(t) = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t \quad .$$

Übung 4. *Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld.*

Wir betrachten die Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m und Ladung q in drei Dimensionen unter dem Einfluss eines äusseren, im Allgemeinen zeitabhängigen, elektromagnetischen Feldes, welches in der üblichen Weise durch die Potentiale $\phi(\mathbf{x}, t)$ und $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ beschrieben wird. Hierbei bezeichnen fett markierte Symbole Vektoren, insbesondere \mathbf{x} die Position des Teilchens. Der zeitabhängige Hamiltonian für das Teilchen ist dann gegeben durch

$$H = \frac{1}{2m}(p - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t))^2 + q\phi(\mathbf{x}, t) \quad . \quad (9)$$

Sei im Folgenden Λ eine beliebige aber fest gewählte Eichtransformation, die die Potentiale gemäss

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (10)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (11)$$

transformiert. Wir wissen bereits, dass sich dadurch das entsprechende elektromagnetische Feld nicht ändert. Im Folgenden möchten wir untersuchen wie sich die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t)$ des Teilchens unter dieser Eichtransformation verändert, wobei wir die Forminvarianz der Schrödinger Gleichung unter Eichtransformationen annehmen wollen, d.h. es gilt auch für die umgezeichnete Wellenfunktion Ψ' , $i\hbar\partial_t\Psi' = H'\Psi'$, wo H' durch (9) gegeben ist (mit den Potentialen ϕ' , \mathbf{A}'). Zusätzlich fordern wir noch, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$ unverändert bleibt, d.h. wir nehmen an $\Psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i\chi(\mathbf{x}, t)}\Psi(\mathbf{x}, t)$, mit einer reellwertigen Funktion $\chi(\mathbf{x}, t)$. Leite eine inhomogene partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung für χ her und überprüfe, dass $\chi = \frac{q}{\hbar}\Lambda + const$ eine Lösung ist.

Lösung. Wir berechnen

$$\begin{aligned}
2m(H'\Psi')(\mathbf{x}, t) &= \left(\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) \right)^2 + 2mq\phi'(\mathbf{x}, t) \right) (e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} \Psi(\mathbf{x}, t)) \\
&= \left(\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) \right)^2 + 2mq\phi(\mathbf{x}, t) - 2mq(\partial_t\Lambda)(\mathbf{x}, t) \right) (e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} \Psi(\mathbf{x}, t)) \\
&= \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) \right) e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) + \hbar(\nabla\chi)(\mathbf{x}, t) \right) \Psi(\mathbf{x}, t) \\
&\quad + e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} 2mq(\phi(\mathbf{x}, t) - (\partial_t\Lambda)(\mathbf{x}, t)) \Psi(\mathbf{x}, t) \\
&= e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) + \hbar(\nabla\chi)(\mathbf{x}, t) \right)^2 \Psi(\mathbf{x}, t) \\
&\quad + e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} 2mq(\phi(\mathbf{x}, t) - (\partial_t\Lambda)(\mathbf{x}, t)) \Psi(\mathbf{x}, t) \\
&= e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} 2m(H\Psi)(\mathbf{x}, t) + e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} ((-q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) + \hbar(\nabla\chi)(\mathbf{x}, t))^2 \\
&\quad + e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} ((-q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) + \hbar(\nabla\chi)(\mathbf{x}, t)) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \\
&\quad + \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) (-q(\nabla\Lambda)(\mathbf{x}, t) + \hbar(\nabla\chi)(\mathbf{x}, t)) - 2mq(\partial_t\Lambda)(\mathbf{x}, t)) \Psi(\mathbf{x}, t)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
i\hbar(\partial_t\Psi')(\mathbf{x}, t) &= i\hbar\partial_t e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} \Psi(\mathbf{x}, t) \\
&= e^{i\chi(\mathbf{x}, t)} i\hbar(\partial_t\Psi)(\mathbf{x}, t) - \hbar(\partial_t\chi)(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t)
\end{aligned}$$

Die Forminvarianz der Schrödingergleichung zusammen mit der Abkürzung $\Omega := \hbar\chi - q\Lambda$ führt dann auf

$$0 = \left((\partial_t\Omega) + \frac{1}{2m}(\nabla\Omega)^2 + \frac{1}{2m}(\nabla\Omega) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) \cdot (\nabla\Omega) \right) \Psi. \quad (12)$$

Wir sehen dass $\Omega = \text{const}$, das heisst $\chi = \frac{q}{\hbar}\Lambda + k$ mit $k \in \mathbb{R}$, eine Lösung ist. Die Eindeutigkeit (bis auf eine reelle Konstante) folgt jedoch erst wenn man die Invarianz von Erwartungswerten sämtlicher Observablen fordert. In der Tat kann überprüft werden, dass die Invarianz des kinetischen Impulses $m\mathbf{v} := \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ impliziert, dass Ω lediglich von der Zeit abhängt. Diese Tatsache zusammen mit Gleichung (7) liefert dann direkt $\Omega = \text{const}$ und somit die Eindeutigkeit der Phase χ bis auf eine reelle additive Konstante.