Heiko Dumlich, Max Hoffmann 25. November 2006

6 Übungsblatt Theoretische Physik IV

6.1 (Ehrenfest-Theorem)

Es ist zu zeigen, dass die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators bezüglich eines beliebigen Zustands $|\psi(t)\rangle$ die folgenden Differentialgleichungen erfüllen:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{m} \qquad \frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}})\rangle.$$

Mit $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$.
Es gilt mit der Schrödingergleichung:

$$E|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \Leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \frac{\hat{H}}{i\hbar}|\psi\rangle, \tag{1}$$

somit also auch:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}^\dagger = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}, \tag{2}$$

da $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, der Hamiltonoperator hermitesch ist. Wir können für den ersten zu zeigenden Term schreiben:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{\mathbf{r}}\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right), \tag{3}$$

nun können wir (1) und (2) in (3) einsetzen:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{\mathbf{r}}\frac{\hat{H}}{i\hbar}|\psi\rangle,$$

da der Ortsoperator zeitunabhängig ist werden wir den mittleren Term los und schreiben um:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \langle\psi|\frac{\hat{\mathbf{r}}\hat{H}}{i\hbar} - \frac{\hat{H}\hat{\mathbf{r}}}{i\hbar}|\psi\rangle,$$

Wie wir erkennen, ist dies der Kommutator $\left[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}\right]$. Explizites Einsetzen des Hamiltonians und Anwendung der auf Aufgabenblatt 5 gezeigten Relation $\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right]$ und $\left[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]$ bringt uns:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{\mathbf{r}},\hat{H}\right]|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{\mathbf{r}},\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\right]|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{\mathbf{r}},V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right]|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}\right]\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m}\left[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}\right]|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{\mathbf{r}},\sum_{n=0}^{N}c_n\hat{\mathbf{r}}^n\right]|\psi\rangle\end{aligned}$$

Nun nutzen wir unsere selbst im Schlaf allgegenwärtigen Kommutatorbeziehungen $[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}] = i\hbar$ und $[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{r}}] = 0$, somit fällt der dritte Term weg (da wir im ungünstigen Falle von $N \geq 1$ wieder unsere Kommutatorrelation aus Aufgabenblatt 5 benutzen können und somit auf den bekannten Kommutator zurückführen können) und wir erhalten:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \langle\psi|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}|\psi\rangle,$$

somit ist:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{m},$$

gezeigt.

Um zu zeigen, dass auch die zweite Differentialgleichung erfüllt ist, betrachten wir zuerst $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$. Wir setzen dabei das allgemeine Potential $V(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{N} c_n\mathbf{r}^n$ an, somit liefert die Anwendung von ∇ auf das Potential:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) = -\nabla\sum_{n=0}^{N}c_n\mathbf{r}^n = -\sum_{n=0}^{N}c_n\nabla\mathbf{r}^n = -\sum_{n=0}^{N}c_n\frac{\partial\mathbf{r}^n}{\partial\mathbf{r}} = -\sum_{n=1}^{N}n\,c_n\mathbf{r}^{n-1}.$$

Somit folgt also für $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}) = -\nabla V(\hat{\mathbf{r}}) = -\sum_{n=1}^{N} n\,c_n\hat{\mathbf{r}}^{n-1}$. Es ist zu zeigen, dass:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}})\rangle,$$

Wir können umschreiben zu:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{\mathbf{p}}\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right),$$

mit $\hat{\mathbf{p}}$ nicht explizit zeitabhängig entfällt der Mittelterm und wir können zusätzlich wie oben die Zeitableitungsterme ersetzen:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{\mathbf{p}}\frac{\hat{H}}{i\hbar}|\psi\rangle,$$

Diesmal erhalten wir den Kommutator $\left[\hat{\mathbf{p}},\hat{H}\right]$:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi | \left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}\right] |\psi\rangle.$$

Wir können diesen berechnen, wobei wir den Hamiltonian einsetzen:

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}\right] = \left[\hat{\mathbf{p}}, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}^2\right] + \left[\hat{\mathbf{p}}, V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right].$$

Der erste Komutator verschwindet, da wir ihn auf $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}] = 0$ zurückführen können, beim zweiten Kommutator können wir das Potential einsetzen:

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}\right] = \left[\hat{\mathbf{p}}, \sum_{n=0}^{N} c_n \hat{\mathbf{r}}^n\right],$$

Wir können die Summe nun aufteilen auf N Kommutatoren:

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \sum_{n=0}^{N} c_n \hat{\mathbf{r}}^n\right] = [\hat{\mathbf{p}}, c_0] + [\hat{\mathbf{p}}, c_1\hat{\mathbf{r}}] + \left[\hat{\mathbf{p}}, c_2\hat{\mathbf{r}}^2\right] + \cdots + \left[\hat{\mathbf{p}}, c_N\hat{\mathbf{r}}^N\right].$$

Somit folgt:

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \sum_{n=0}^{N} c_n \hat{\mathbf{r}}^n\right] = 0 - c_1\left[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}\right] + c_2\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^2\right] + \cdots + c_N\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^N\right],$$

Nun können wir ausnutzen, dass z.B. $\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^2\right] = [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}]\,\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{r}}\,[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}] = -2 \cdot i\hbar\hat{\mathbf{r}}$, bzw. $\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^N\right] = [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}]\,\hat{\mathbf{r}}^{N-1} + \hat{\mathbf{r}}\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^{N-1}\right] = [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}]\,\hat{\mathbf{r}}^{N-1} + \hat{\mathbf{r}}\,[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}]\,\hat{\mathbf{r}}^{N-2} + \hat{\mathbf{r}}\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^{N-2}\right]$ etc. somit also $\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}^N\right] = -N \cdot i\hbar\hat{\mathbf{r}}^{N-1}$ gilt. Dies eingesetzt und dann ausklammern von $-i\hbar$ und umschreiben in eine Summe liefert:

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \sum_{n=0}^{N} c_n \hat{\mathbf{r}}^n\right] = -i\hbar \sum_{n=1}^{N} n\, c_n \hat{\mathbf{r}}^{n-1}.$$

Dies können wir nun wieder einsetzen und erhalten:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi | i\hbar \sum_{n=1}^{N} n\, c_n \hat{\mathbf{r}}^{n-1} |\psi\rangle = \langle \psi | \sum_{n=1}^{N} n\, c_n \hat{\mathbf{r}}^{n-1} |\psi\rangle = \langle \psi | \mathbf{F}\left(\hat{\mathbf{r}}\right) |\psi\rangle,$$

und somit ist:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \langle \mathbf{F}\left(\hat{\mathbf{r}}\right) \rangle$$

gezeigt.

Alternativ:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}})\rangle$$

Beweis: Der Erwartungswert eines Operator $\hat{A}$ ist im Schrödinger- und Heisenbergbild identisch.

$$\left\langle\hat{A}\right\rangle = \left\langle\psi_S\left|\hat{A}_S\right|\psi_S\right\rangle = \left\langle\psi_H\left|\hat{A}_H\right|\psi_H\right\rangle,$$

wobei

$$\hat{A}_H = \hat{U}_S^\dagger\hat{A}_S\hat{U}_S.$$

Weil

$$\frac{\partial\hat{A}_S}{\partial t} = 0$$

und

$$\frac{\partial\psi_H}{\partial t} = 0$$

ist es in diesem Fall leichter, die zeitliche Ableitung im Heisenbergbild zu bestimmen. Danach gilt

$$\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle = \left\langle\psi_H\left|\frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t}\right|\psi_H\right\rangle$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{U}_S^\dagger\hat{A}_S\hat{U}_S\right)\\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_S^\dagger\right)\hat{A}_S\hat{U}_S + \underbrace{\hat{U}_S^\dagger\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_S\right)\hat{U}_S}_{0} + \hat{U}_S^\dagger\hat{A}_S\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_S\right)\\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_S^\dagger\right)\hat{A}_S\hat{U}_S + \hat{U}_S^\dagger\hat{A}_S\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_S\right).
\end{aligned}$$

Weil

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$$

gegeben ist, wählt man den Ansatz

$$\hat{U}_S = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)}$$

und bestimmt

$$\frac{\partial\hat{U}_S}{\partial t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{H}_S = -\frac{i}{\hbar}\hat{U}_S\hat{H}_S$$

und analog

$$\frac{\partial\hat{U}_S^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{U}_S^\dagger\hat{H}_S.$$

Außerdem ist zu beachten, dass $\hat{U}_S$ eine Potenzreihe von $\hat{H}_S$ ist, und daher

$$\left[\hat{H}_S, \hat{U}_S\right] = 0.$$

Setzt man die gewonnenen Erkenntnisse in obige Gleichung ein erhält man:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \hat{H}_S \hat{A}_S \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \hat{A}_S \hat{U}_S \hat{H}_S\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \hat{H}_S \hat{A}_S \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \hat{A}_S \hat{H}_S \hat{U}_S\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \left[\hat{H}_S, \hat{A}_S\right] \hat{U}_S\right).
\end{aligned}$$

Jetzt kann man die konkreten Operatoren:

$$\hat{A} = \hat{\mathbf{p}}$$

und

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{\mathbf{p}}_S^2}{2m} + V\left(\hat{\mathbf{r}}\right),$$

wobei

$$\hat{\mathbf{p}}_S = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

einsetzen und erhält

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{\mathbf{p}}_H}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \left[\hat{H}_S, \hat{\mathbf{p}}_S\right] \hat{U}_S\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \hat{H}_S \hat{\mathbf{p}}_S \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \hat{\mathbf{p}}_S \hat{H}_S \hat{U}_S\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_S^2}{2m} + V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right) \hat{\mathbf{p}}_S \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \hat{\mathbf{p}}_S \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_S^2}{2m} + V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right) \hat{U}_S\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_S^\dagger V\left(\hat{\mathbf{r}}\right) \hat{\mathbf{p}}_S \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \hat{\mathbf{p}}_S V\left(\hat{\mathbf{r}}\right) \hat{U}_S\right) \\
&= \left(\hat{U}_S^\dagger V\left(\hat{\mathbf{r}}\right) \vec{\nabla} \hat{U}_S - \hat{U}_S^\dagger \vec{\nabla} V\left(\hat{\mathbf{r}}\right) \hat{U}_S\right).
\end{aligned}$$

Laut Produktregel gilt nun aber

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}\left(VU\right) &= \left(\vec{\nabla}V\right)U + V\left(\vec{\nabla}U\right) \\
\Leftrightarrow -\left(\vec{\nabla}V\right)U &= -\vec{\nabla}\left(VU\right) + V\left(\vec{\nabla}U\right)
\end{aligned}$$

und eingesetzt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{\mathbf{p}}_H}{\partial t} &= \hat{U}_S^\dagger \left(-\vec{\nabla}V\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right) \hat{U}_S \\
&= \hat{U}_S^\dagger \left(\mathbf{F}_S\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right) \hat{U}_S \\
&= \mathbf{F}_H\left(\hat{\mathbf{r}}\right)
\end{aligned}$$

oder

$$\frac{\partial \langle \hat{\mathbf{p}}_H \rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{F}_H (\hat{\mathbf{r}}) \rangle \Rightarrow \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{F} (\hat{\mathbf{r}}) \rangle$$

□

Es ist zu ermitteln, welche speziellen Potentiale die Gleichung $\langle \mathbf{F} (\hat{\mathbf{r}}) \rangle = (\mathbf{F} (\hat{\mathbf{r}}))$ erfüllen: Dies gilt für lineare und konstante Kräfte, somit gilt dies für quadratische, lineare und konstante Potentiale.

6.2 (Spin-Präzession)

Für ein Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen der Ladung q im Magnetfeld $\vec{B}$ ist der Hamiltonoperator $\hat{H} = -\frac{q}{m}\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}$ mit dem Spinoperator $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$. Die Basis $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ der Eigenkets von $\hat{S}_z$ ist gegeben mit:

$$\hat{S}_z | \uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} | \uparrow\rangle, \qquad \hat{S}_z | \downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} | \downarrow\rangle.$$

In dieser Basis werden die Operatoren der Komponenten von $\hat{\sigma}$ dargestellt durch die Pauli-Matrizen. Das Magnetfeld sei homogen in z-Richtung, $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$ mit konstantem B_0 und dem Einheitsvektor $\mathbf{e}_z$ in z-Richtung.

a)

Es ist die zeitliche Entwicklung des Zustands $|\alpha, t_0; t\rangle$ für $t > 0$, wenn das System bei $t_0 = 0$ im Zustand $|\alpha, t_0; t_0\rangle = c_\uparrow | \uparrow\rangle + c_\downarrow | \downarrow\rangle$ ist, zu bestimmen. Hierfür müssen wir den Zeitentwicklungsoperator bestimmen, wobei wir für den Hamiltonoperator erhalten:

$$\hat{H} = -\frac{q}{m}\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{qB_0\hbar}{2m}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{e}_z = -\frac{qB_0\hbar}{2m}\hat{\sigma}_z = -\frac{qB_0}{m}\hat{S}_z.$$

Für die ungestörte Zeitentwicklung gilt:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U} (t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle.$$

Mit dem Zeitentwicklungsoperator:

$$\hat{U} (t, t_0) = \hat{U} (t_0, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H} \left(t'\right) \hat{U} \left(t', t_0\right),$$

da unser Hamiltonoperator in diesem Fall nicht explizit zeitabhängig ist, vereinfacht sich der Ansatz zu:

$$\hat{U} (t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} (t - t_0)\right).$$

Diesen können wir nun einsetzen:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} (t - t_0)\right) |\alpha, t_0; t_0\rangle,$$

wobei wir zudem noch den Anfangszustand und den für dieses Problem expliziten Hamiltonoperator einsetzen können:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\left(i\frac{qB_0}{2m}\hat{\sigma}_z\,(t - t_0)\right)(c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle)\,.$$

Dies können wir nun explizit berechnen, da wir bereits auf Aufgabenblatt 4 Aufgabenteil e) gezeigt haben, dass man diese Exponentialfunktion umschreiben kann zu, wobei wir diesmal σ_3 anstatt σ_2 betrachten:

$$\exp\left(i\frac{qB_0}{2m}t\hat{\sigma}_z\right) = e^{i\frac{\sigma_2\alpha}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(i\frac{qB_0}{2m}t\hat{\sigma}_z\right)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} i^{2n}\frac{\left(\frac{qB_0}{2m}t\right)^{2n}}{(2n)!}\hat{\sigma}_z^{2n} + i\sum_{n=0}^{\infty} i^{2n}\frac{\left(\frac{qB_0}{2m}t\right)^{2n+1}}{(2n+1)!}\hat{\sigma}_z^{2n+1}$$

dies ist äquivalent zu:

$$\exp\left(i\frac{qB_0}{2m}\hat{\sigma}_z t\right) = \cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\hat{E} + i\hat{\sigma}_z\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right),$$

wobei $t_0 = 0$ gesetzt wurde und $\hat{E}$ der Identitätsoperator sei. Zudem wissen wir, dass die Basis der Eigenkets mit $\hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$ und $\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$ gegeben ist, dies können wir nun anwenden:

$$\begin{aligned}
|\alpha, t_0; t\rangle &= \left[\cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\hat{E} + i\hat{\sigma}_3\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\right](c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle) \\
&= \cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\hat{E}\,(c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle) + i\hat{\sigma}_3\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)(c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle) \\
&= \cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)(c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle) + i\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)(c_\uparrow|\uparrow\rangle - c_\downarrow|\downarrow\rangle)\,.
\end{aligned}$$

b)

Es sind die Erwartungswerte von $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ und $\hat{S}_z$ zu bestimmen für die Spezialfälle $c_\uparrow = 1$ und $c_\downarrow = 0$ sowie für $c_\uparrow = c_\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2}}$ zu bestimmen.

Wir beginnen mit $c_\uparrow = 1$, $c_\downarrow = 0$ mit dem zeitlichen Verlauf des Erwartungswerts von $\hat{S}_x$:

$$\langle\alpha, t_0; t|\hat{S}_x|\alpha, t_0; t\rangle = \langle\uparrow|\left[\cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right) - i\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x\left[\cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right) + i\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)\right]|\uparrow\rangle,$$

wobei mit der Eulerschen Identität $\cos\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right) \pm i\sin\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right) = \exp\left(\pm\frac{qB_0 t}{2m}\right)$ vereinfacht:

$$\langle\alpha, t_0; t|\hat{S}_x|\alpha, t_0; t\rangle = \langle\uparrow|\exp\left(-\frac{qB_0 t}{2m}\right)\hat{S}_x\exp\left(\frac{qB_0 t}{2m}\right)|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle,$$

geschrieben werden kann. Für $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, da für $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ die Eigenwerte $\hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$ folgten, folgt für $\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$. Somit gilt also:

$$\langle \alpha, t_0; t|\hat{S}_x|\alpha, t_0; t\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle \uparrow | \downarrow\rangle = 0,$$

da die Eigenkets orthogonal sind.
Für $\hat{S}_y$ folgt, wobei $\hat{S}_y|\uparrow\rangle = \frac{i\hbar}{2}|\downarrow\rangle$:

$$\langle \alpha, t_0; t|\hat{S}_y|\alpha, t_0; t\rangle = \langle \uparrow |\hat{S}_y|\uparrow\rangle = i\frac{\hbar}{2}\langle \uparrow | \downarrow\rangle = 0.$$

Und für $\hat{S}_z$ folgt:

$$\langle \alpha, t_0; t|\hat{S}_y|\alpha, t_0; t\rangle = \langle \uparrow |\hat{S}_y|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle \uparrow | \uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}.$$

Betrachten wir nun $c_\uparrow = c_\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2}}$, für $\hat{S}_x$, wobei für die zeitliche Entwicklung des Zustandes:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + i\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\right],$$

folgt, setzen wir dies in:

$$\langle \alpha, t_0; t|\hat{S}_x|\alpha, t_0; t\rangle,$$

ein, so folgt:

$$\begin{aligned}
\langle \alpha; t|\hat{S}_x|\alpha; t\rangle \quad = \quad & \langle \uparrow |\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle + \langle \uparrow |\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \downarrow |\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle + \langle \downarrow |\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \uparrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle - \langle \uparrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \downarrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle - \langle \downarrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \uparrow |\frac{(-i)}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle + \langle \uparrow |\frac{(-i)}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \downarrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle + \langle \downarrow |\frac{i}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \uparrow |\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle - \langle \uparrow |\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
+ \quad & \langle \downarrow |\frac{(-1)}{2}\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle - \langle \downarrow |\frac{(-1)}{2}\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

Nun können wir dies noch vereinfachen, da einige Mischterme rausfallen:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha;t|\hat{S}_x|\alpha;t\rangle &= \langle\uparrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)+\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\uparrow\rangle \\
&+ \langle\uparrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
&+ \langle\downarrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\uparrow\rangle \\
&+ \langle\downarrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)+\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
&+ \langle\uparrow|-i\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle+\langle\downarrow|i\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle \\
&= \langle\uparrow|\frac{1}{2}\hat{S}_x|\uparrow\rangle+\langle\uparrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
&+ \langle\downarrow|\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]\hat{S}_x|\uparrow\rangle+\langle\downarrow|\frac{1}{2}\hat{S}_x|\downarrow\rangle \\
&+ \langle\uparrow|-i\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\downarrow\rangle+\langle\downarrow|i\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\hat{S}_x|\uparrow\rangle.
\end{aligned}$$

Das Anwenden des Operators $\hat{S}_x|\uparrow\rangle=\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle, \hat{S}_x|\downarrow\rangle=\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$, Wegwerfen der $\langle\uparrow|\downarrow\rangle$ und $\langle\downarrow|\uparrow\rangle$ Terme und $\langle\uparrow|\uparrow\rangle=\langle\downarrow|\downarrow\rangle=1$ setzen, liefert:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha;t|\hat{S}_x|\alpha;t\rangle &= \frac{\hbar}{2}2\cdot\frac{1}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]-\frac{i\hbar}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right) \\
&+ \frac{i\hbar}{2}\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right).
\end{aligned}$$

Dies ergibt:

$$\langle\alpha;t|\hat{S}_x|\alpha;t\rangle=\frac{\hbar}{2}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]=\frac{\hbar}{2}\left[2\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-1\right].$$

Nun können wir leichter $\hat{S}_y$ bestimmen, wobei wir in der länglichen Gleichung oben $\hat{S}_x$ durch $\hat{S}_y$ ersetzen können, somit folgt wobei $\hat{S}_y|\uparrow\rangle=\frac{i\hbar}{2}|\downarrow\rangle$ und $\hat{S}_y|\downarrow\rangle=-\frac{i\hbar}{2}|\uparrow\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha;t|\hat{S}_y|\alpha;t\rangle &= -\frac{i\hbar}{4}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right]+\frac{i\hbar}{4}\left[\cos^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)-\sin^2\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\right] \\
&+ 2\cdot\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)
\end{aligned}$$

Dies führt zu dem Ergebnis:

$$\langle\alpha;t|\hat{S}_y|\alpha;t\rangle = -\hbar\cos\left(\frac{qB_0t}{2m}\right)\sin\left(\frac{qB_0t}{2m}\right).$$

Zuletzt nun für $\hat{S}_z$:

$$\langle\alpha;t|\hat{S}_z|\alpha;t\rangle = \frac{\hbar}{4} - \frac{\hbar}{4} = 0.$$

6.3 (Virialsatz)

Es seien die Eigenzustände $|\psi\rangle$ der 1-D stationären Schrödingergleichung $E|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ mit dem Hamiltionoperator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ gegeben.

a)

Wir betrachten den Erwartungswert:

$$\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{A}\right]|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H}^\dagger\hat{A} - \hat{A}E|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{E\hat{A} - E\hat{A}}_{=0}|\psi\rangle = 0,$$

dieser verschwindet also, somit gilt:

$$\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{A}\right]|\psi\rangle = 0.$$

b)

Es ist zu zeigen, dass der Virialsatz für Potentiale der Form $V(\hat{x}) = V_0\hat{x}^k$ gilt:

$$\frac{1}{2m}\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle = \frac{k}{2}\langle\psi|V(\hat{x})|\psi\rangle.$$

Wir wissen aus Aufgabenteil a), dass für jeden Operator $\hat{A}$ der Erwartungswert:

$$\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{A}\right]|\psi\rangle,$$

verschwindet, nun setzen wir $\hat{A} = \hat{p}\hat{x}$ und berechnen den Kommutator $\left[\hat{H},\hat{p}\hat{x}\right]$, wobei also gilt:

$$\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{A}\right]|\psi\rangle = 0.$$

Für den Kommutator folgt:

$$\left[\hat{H},\hat{p}\hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),\hat{p}\hat{x}\right],$$

wir setzen das geforderte Potential ein und stellen um:

$$\left[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2, \hat{p}\hat{x}\right] + \left[V_0\hat{x}^k, \hat{p}\hat{x}\right],$$

Nun betrachten wir die beiden Kommutatoren getrennt:

$$\left[\hat{p}^2, \hat{p}\hat{x}\right] = \left[\hat{p}, \hat{p}\hat{x}\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{p}\hat{x}\right] = \left(\left[\hat{p}, \hat{p}\right]\hat{x} + \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{x}\right]\right)\hat{p} + \hat{p}\left(\left[\hat{p}, \hat{p}\right]\hat{x} + \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{x}\right]\right),$$

Diese Kommutatoren sind bekannt $[\hat{p}, \hat{x}] = -2i\hbar$ und wir können ausrechnen:

$$\left[\hat{p}^2, \hat{p}\hat{x}\right] = -2i\hbar\,\hat{p}^2.$$

Betrachten wir den zweiten Kommutator, für diesen gilt:

$$\left[V_0\hat{x}^k, \hat{p}\hat{x}\right] = V_0\left(\left[\hat{x}^k, \hat{p}\right]\hat{x} + \hat{p}\left[\hat{x}^k, \hat{x}\right]\right),$$

Der zweite Term fällt weg, da wir k-mal unsere in Aufgabenteil a) gezeigte Kommutatorrelation $\left[\hat{A}\hat{A}, \hat{B}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{A} + \hat{A}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$, anwenden können und somit diesen Term auf k-mal die $[\hat{x}, \hat{x}] = 0$ Relation zurückführen können. Der erste Term kann auch mit dieser Relation zurückgeführt werden, wobei wir:

$$\left[V_0\hat{x}^k, \hat{p}\hat{x}\right] = i\hbar k V_0\hat{x}^k$$

erhalten, da wir den Term auf $V_0\left[\hat{x}^k, \hat{p}\right]\hat{x} = k\left[\hat{x}, \hat{p}\right]\hat{x}^k$ zurückgehführt haben.
Setzen wir dies in den Erwartungswert ein, so folgt:

$$0 = \langle\psi| - \frac{2}{2m}i\hbar\,\hat{p}^2 + i\hbar k V_0\hat{x}^k|\psi\rangle$$

dann liefert uns umstellen:

$$\frac{1}{2m}\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle = \frac{k}{2}\langle\psi|V\left(\hat{x}\right)|\psi\rangle.$$