Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg Sommersemester 2021

Übungsblatt 4

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann

Obertutor: Dr. Carsten Littek

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 10. - 14. Mai 2021 Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor! Nutzen Sie dazu den Link https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291

1. Verständnisfragen

- a) Erläutern Sie die Unterschiede zwischen den Ihnen bekannten Bildern der Quantenmechanik.
- b) Erklären Sie die Form des Zeitentwicklungsoperators und dessen Herleitung.
- c) Wie könnten Störungen physikalisch zustandekommen, wie wir sie bei der Diskussion der Rabi-Oszillationen angenommen haben? Wie könnten Sie einen Hamilton-Operator dafür formulieren?

2. Hamilton-Jacobi-Gleichung und WKB-Näherung

a) Betrachten Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

und setzen Sie darin

$$\psi(t,x) = e^{iS(t,x)/\hbar}.$$

(Dieser Ansatz ist allgemeingültig, wenn S(t, x) komplexe Werte annehmen darf.) Leiten Sie die Differentialgleichung für S(t, x) her und zeigen Sie, dass sich diese im klassischen Limes $\hbar \to 0$ zur Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

der klassischen Mechanik vereinfacht.

b) Setzen Sie in der Differentialgleichung für S(t, x) (bevor der klassische Limes genommen wurde)

$$S(t, x) = W(x) - Et$$

und leiten Sie die Differentialgleichung für W(x) her. Um diese näherungsweise zu lösen, stellen wir eine Entwicklung in Potenzen von \hbar auf,

$$W(x) = W_0(x) + \hbar W_1(x) + \hbar^2 W_2(x) + \dots$$

Finden Sie die Gleichungen für $W_0(x)$ und $W_1(x)$ durch Einsetzen und Koeffizientenvergleich. Lösen Sie die Gleichung für $W_0(x)$ und geben Sie die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung $\psi(t,x)$ in dieser Näherung 'nullter Ordnung' an. (Die entsprechende Näherung erster Ordnung in \hbar bezeichnet man als WKB-Näherung nach ihren Begründern Wenzel, Kramers und Brillouin.)

3. Ehrenfest-Theorem

Sei $\psi_t(x) = \psi(\vec{x}, t)$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung im Ortsraum. Der Hamilton-Operator sei gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}),$$

und ψ sei normiert, $\langle \psi_t | \psi_t \rangle = 1$. Wir bezeichnen die Erwartungswerte von Orts- und Impulsoperator im Zustand $\psi(\vec{x}, t)$ mit

$$\vec{X}(t) = \langle \psi_t | \hat{Q} \psi_t \rangle = \langle \hat{Q} \rangle (t)$$

$$\vec{P}(t) = \langle \psi_t | \hat{P} \psi_t \rangle = \langle \hat{P} \rangle (t).$$

a) Zeigen Sie, dass diese Erwartungswerte die folgenden Bewegungsgleichungen (die Ehrenfest'schen Gleichungen) erfüllen:*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle (t) = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle (t)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle (t) = -\langle \psi_t | (\nabla V(\vec{x})) \psi_t \rangle = \langle \vec{F}(\vec{x}) \rangle.$$

Damit haben wir gezeigt, dass die klassischen Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte gelten. Im Folgenden beschränken wir uns auf eine Dimension und wollen untersuchen, unter welchen Bedingungen die Quantendynamik ihrem klassischen Grenzfall nahe kommt, nämlich

$$m \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle \simeq F(\langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle).$$

- b) Betrachten Sie zunächst das Potential $V(x) = x^2$ eines harmonischen Oszillators. Vergleichen Sie $\langle F(x) \rangle$ und $F(\langle \hat{Q} \rangle)$. Was können Sie aus Ihrem Ergebnis folgern?
- c) Das Potential sei nun leicht asymmetrisch, $V(x) = x^2 + \alpha x^3$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$. Drücken Sie die Abweichung $\langle F(x) \rangle F(\langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle)$ durch die Varianz $(\Delta \hat{\mathbb{Q}})^2$ des Wellenpakets aus, das sich in dem Potential bewegt.

Um einen allgemeineren Ausdruck zu erhalten, entwickeln Sie die Kraft F(x) in eine Taylor-Reihe um $x_0 = \langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle$. Unter welcher Bedingung an $F''(\langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle)/F(\langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle)$ bleibt die Abweichung $\langle F(x) \rangle/F(\langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle) - 1$ klein, so dass sich $\langle \hat{\mathbb{Q}} \rangle$ nahezu klassisch bewegt? Geben Sie einen Fall an, in dem diese Näherung für das kubische Potential V(x) auch bei kleinen Auslenkungen versagt.

4. Zeno-Effekt

Ein quantenmechanisches System werde zur Zeit t=0 in einem angeregten Zustand $|\psi_0\rangle$ präpariert, der kein Eigenzustand des Hamiltonoperators \hat{H} ist und auf einer Zeitskala τ in den Grundzustand übergeht. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System nach Zeit t noch im Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ befindet, $P(t) \sim \exp(-t/\tau)$. Für sehr kurze Zeiten verhält sich P(t) jedoch anders; das eröffnet die Möglichkeit, durch kontinuierliche Messung im angeregten Zustand zu bleiben ("Zeno-Paradoxon"). Die Benennung ist angelehnt an das Pfeil-Paradoxon des antiken griechischen Philosophen Zenon von Elea.

Der Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ sei ein Eigenzustand einer Observable mit diskretem Spektrum, die nicht mit \hat{H} vertauscht und damit im Allgemeinen nicht erhalten ist. Für kurze Zeiten kann man die Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators U(t) verwenden,

$$|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t - \frac{1}{2\hbar^2}\hat{H}^2t^2 + \dots\right)|\psi_0\rangle.$$

^{*}Hinweis: Betrachten Sie zunächst allgemein $\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle$ für einen selbstadjungierten und im Allgemeinen zeitabhängigen Operator \hat{A} . Nutzen Sie dann zum Beweis der Bewegungsgleichungen die Produktregel für Kommutatoren.

- a) Berechnen Sie mit der Entwicklung bis zur quadratischen Ordnung die Wahrscheinlichkeit P(t), dass die Messung von \hat{A} zur Zeit t wieder den Anfangszustand ergibt für kurze Zeiten (Kollaps der Wellenfunktion).
 - Welche physikalische Bedeutung hat der Koeffizient α in $P(t) = 1 \alpha t^2 + \dots$?
- b) Betrachten Sie den Fall, dass zu den Zeiten $t_k = k \cdot \Delta t$, k = 1, 2, ... wiederholt gemessen wird. Dazwischen entwickle sich das System gemäß der Schrödingergleichung. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass das System in jeder der N Messungen wieder im Anfangszustand vorgefunden wird?
- c) Betrachten Sie nun den Grenzfall einer großen Zahl von Messungen in einem festen Zeitintervall, d.h. $t_N = \tau$. Zeigen Sie, dass das System bei kontinuierlicher Beobachtung, also im Limes $N \to \infty$, im angeregten Anfangszustand bleibt.
 - *Anmerkung:* Dieses quantenmechanische Analogon des Zeno-Paradoxons wurde 1990 an Hyperfein-Übergängen von Beryllium-Ionen nachgewiesen [W. M. Itano et al., Phys. Rev. A 41, 2295 (1990)].