

T2 - Quantenmechanik I

WS 15/16 - Prof. Scrinzi

Übungsblatt 6

6.1: (Z) Ehrenfest Theorem

Motivation: In der klassischen Mechanik entwickelt sich eine allgemeine Funktion f auf dem Phasenraum mit der Zeit gemäß

$$\frac{d}{dt}f(x, p, t) = -\{H, f\}(x, p, t) + \partial_t f(x, p, t).$$

In der Quantenmechanik ergibt sich eine fast identische Gleichung für die Erwartungswerte. Der Erwartungswert einer beliebigen Observable $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}, t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ (hermitescher Operator) auf dem Hilbertraum \mathcal{H} (hier soll $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ betrachtet werden) bezüglich der Wellenfunktion $\psi \in \mathcal{H}$ entwickelt sich mit der Zeit gemäß

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_\psi = -\frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_\psi + \langle \partial_t \hat{A} \rangle_\psi. \quad (1)$$

Unter bestimmten Bedingungen ergeben sich für die quantenmechanischen Mittelwerte die selben Bewegungsgleichungen wie für die klassische Bewegung.

(a) Leite Gleichung (1) her. (Verwende die Schrödingergleichung.)

Es gilt

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \left(\partial_t \langle \Psi | \right) \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \partial_t \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{A} \left(\partial_t | \Psi \rangle \right)$$

Einsetzen der Schrödingergleichung $i\hbar \partial_t | \Psi \rangle = \hat{H} | \Psi \rangle$, bzw. $-i\hbar \partial_t \langle \Psi | = \langle \Psi | \hat{H}$, liefert:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \partial_t \hat{A} | \Psi \rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle + \langle \Psi | \partial_t \hat{A} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

Die Spezialfälle $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{A} = \hat{p}$ sind von spezieller Bedeutung:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_\psi = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \right\rangle_\psi \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle_\psi = - \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \right\rangle_\psi \quad (2)$$

(b) Leite Gleichung (2) her. (Verwende Resultate aus Aufgabe 3.1.)

Für die Aufgabe müssen offenbar die Kommutatoren $[\hat{H}, \hat{x}]$ und $[\hat{H}, \hat{p}]$ ausgewertet werden:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] + [V(\hat{x}), \hat{x}] = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}.$$

Hierbei wurde $[V(\hat{x}), \hat{x}] = 0$ verwendet. In der Ortsdarstellung (d.h. Spektraldarstellung bezüglich des Ortsoperators) ist dies trivial.

Es gilt natürlich allgemein, dass alle Funktionen eines einzelnen Operators \hat{A} miteinander kommutieren, wieder offensichtlich in der Spektraldarstellung von \hat{A} .¹

Nun zum Impuls:

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

Dies gilt natürlich nur für differenzierbare V , siehe Aufgabe 3.1.

Einsetzen in die Formel aus (a) unter Berücksichtigung, dass \hat{x} und \hat{p} nicht explizit zeitabhängig sind ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \right\rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \langle -V'(\hat{x}) \rangle = - \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \right\rangle \end{aligned}$$

- (c) Erfüllt der Erwartungswert des Ortsoperators die klassischen Bewegungsgleichungen im allgemeinen Fall?

Betrachte zunächst Potentiale der Form $V(x) = \lambda x^n$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{Z}$. Zeige, dass für $n = 0$ (freies Teilchen), $n = 1$ (uniformes Kraftfeld) und $n = 2$ (harmonischer Oszillator) der Erwartungswert die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllt.

Die klassische Bewegungsgleichung ist $m\ddot{x} = -V'(x)$. Wenn wir x mit $\langle \hat{x} \rangle$ identifizieren hätten wir

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

Mit den Gleichungen aus (b) ergibt sich aber:

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

Betrachten wir $V(x) = \lambda x^n$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{R}$ gilt:

$$\begin{aligned} -V'(\langle \hat{x} \rangle) &= -n\lambda \langle \hat{x} \rangle^{n-1} \\ \langle -V'(\hat{x}) \rangle &= -n\lambda \langle \hat{x}^{n-1} \rangle \end{aligned}$$

Für $n = 0, 1, 2$ sind die Ausdrücke gleich, wie man nachrechnen kann:

$n = 0$: Trivial

$n = 1$: $\langle \hat{x} \rangle^0 = 1 = \langle \hat{x}^0 \rangle$

$n = 2$: $\langle \hat{x} \rangle^1 = \langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x}^1 \rangle$

¹Hier wird in sämtlicher Literatur stillschweigend vorausgesetzt, dass $V(x)$ analytisch ist. Bei nicht-analytischen Potentialen ist der Kommutator $[V(\hat{x}), \hat{x}]$ nicht trivial zu bestimmen. Abgesehen davon gäbe es auch Probleme bei der Wirkung des Impulsoperators.

Für $n=3$ ist die Differenz proportional zur Varianz des Ortsoperators. Hier haben wir schon Beispiele für die Ungleichheit beider Ausdrücke gesehen.

Für alle anderen Werte ist es auch ungleich.

6.2: (Z) Freies teilchen: Unschärfe

Motivation: Das freie Teilchen "zerfließt" mit der Zeit - ein zunächst gut lokalisiertes Teilchen hat aufgrund der Unschärferelation einen nicht exakt bestimmbar Impuls und mit der Zeit führt diese Unschärfe im Impuls zu immer größerer Varianz im Ort.

Teilchen mit Energien im Bereich des kontinuierlichen Spektrums teilen viele Charakteristika mit dem freien Teilchen.

- (a) Konstruiere die Wellenfunktion mit minimaler Unschärfe. (Wann ist bei der zur Herleitung der Unschärferelation verwendeten Ungleichung in Aufgabe 4.2 die Gleichheit gegeben?) Vergleiche das Ergebnis mit $\psi_0(x) = N \exp(-a(x-x_0)^2 + ikx)$ aus Aufgabe 4.5.

In Aufgabe 4.2 ist die Startungleichung $\langle \hat{C} \hat{C}^\dagger \rangle \geq 0$. Die Gleichheit ist hier erfüllt, wenn $\hat{C}|\psi\rangle = 0$. Für die in der Aufgabe 4.2 geeignete Form ($\hat{C} = \lambda(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) + \frac{i}{\lambda}(\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)$) gibt das:

$$\begin{aligned} \left(\lambda(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) + \frac{i}{\lambda}(\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle) \right) |\psi\rangle &= 0 \\ \lambda(x - x_0)\psi(x) &= \frac{-i}{\lambda}(-i\hbar\partial_x - p_0)\psi(x) \\ \psi'(x) &= - \left(\frac{\lambda^2}{\hbar}(x - x_0) - i\frac{p_0}{\hbar} \right) \psi(x) \\ \psi(x) &\sim \exp \left(-\frac{\lambda^2}{2\hbar}(x - x_0)^2 + i\frac{p_0 x}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Unter Einführung der Definitionen

$$a \hat{=} \frac{\lambda^2}{2\hbar} \quad k \hat{=} \frac{p_0}{\hbar},$$

erhält man letztlich

$$\psi(x) \sim \exp \left(-a(x - x_0)^2 + ikx \right).$$

- (b) Berechne die Ortsunschärfe von ψ_0 für den Spezialfall $x_0 = 0$ und $k = 0$ als Funktion der Zeit.

Aus Aufgabe 4.2 haben wir

$$\psi_t(x) = \frac{(2a/\pi)^{1/4}}{\sqrt{1+i\tau}} \exp \left(-(1+i\tau)^{-1}ax^2 \right)$$

mit $\tau = 2a\hbar t/m$. Diese Funktion ist symmetrisch, sodass $\langle \hat{x} \rangle_{\psi_t} = 0$. Somit ist $(\Delta \hat{x})^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_t}$ und das integriert sich zu

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_t} = \frac{(2a/\pi)^{1/2}}{\sqrt{1+\tau^2}} \int_{\mathbb{R}} dx x^2 \exp \left(-\frac{ax^2}{1+\tau^2} \right) = \frac{(2a/\pi)^{1/2}}{\sqrt{1+\tau^2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{a}{1+\tau^2} \right)^{-3/2} = \frac{1+\tau^2}{a\sqrt{2}}$$

Die Varianz verhält sich parabolisch in der Zeit.

- (c) Zeige, dass die Impulsunschärfe eines freien Teilchens zeitlich konstant ist. (Nutze das Ehrenfest Theorem.)

Der Hamiltonian des freien Teilchens kommutiert mit \hat{p} , sowie mit \hat{p}^2 . Daraus folgt, dass die Erwartungswerte beider zeitlich konstant sind und somit auch die Unschärfe.

- (d) Zeige, dass für freie Teilchen gilt:

$$(\Delta \hat{x})^2(t) = \frac{(\Delta \hat{p})^2}{m^2}(t - t_0)^2 + (\Delta \hat{x})^2(t_0).$$

(Nutze das Ehrenfest Theorem.)

Beim Freien Teilchen ist $V = 0$, daraus folgt für die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}(t) \rangle &= 0 \Rightarrow \langle \hat{p}(t) \rangle = \text{const} \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{x}(t) \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p}(t) \rangle \Rightarrow \langle \hat{x}(t) \rangle = \frac{t - t_0}{m} \langle \hat{p}_0 \rangle + \langle \hat{x}(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Jetzt benötigen wir noch die zeitliche Entwicklung des Erwartungswerts von \hat{x}^2 :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{-1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}^2] \rangle = \frac{-1}{i\hbar} \left\langle \frac{-i\hbar}{m} (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \right\rangle = \frac{\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle}{m} \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle &= \frac{2}{m} \langle \hat{p}^2 \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p}^2 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

(hier haben wir die Kommutatorrelation $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ benutzt)

$$\Rightarrow \langle \hat{x}^2(t) \rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{m^2}(t - t_0)^2 + \frac{\langle (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})(t_0) \rangle}{m}(t - t_0) + \langle \hat{x}^2(t_0) \rangle.$$

Für die Unschärfe haben wir dann:

$$(\Delta \hat{x})^2(t) = \frac{(\Delta \hat{p})^2}{m^2}(t - t_0)^2 + (\Delta \hat{x})^2(t_0) + \frac{\langle (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})(t_0) \rangle - 2 \langle \hat{p} \rangle \langle \hat{x}(t_0) \rangle}{m}(t - t_0),$$

wobei t_0 gewählt werden kann, damit der letzte Term verschwindet.

6.3: (T) Teilchen im Kreis

Motivation: Eine Variation des unendlich tiefen Potentialtopfs.

Ein Teilchen der Masse m sei auf die Kreislinie mit Radius $R > 0$ beschränkt.

- (a) Wie sieht der Hamiltonoperator \hat{H} aus, der dieses System beschreibt?
Was ist der korrekte Hilbertraum \mathcal{H} ?

Bestimme die korrekten Randbedingungen für die Wellenfunktion ψ . (Wie verhalten sich $\psi(0)$ und $\psi(2\pi R)$? Wie die Ableitungen?)

Der Hilbertraum ist $\mathcal{L}^2([0, 2\pi R])$. Der Hamiltonoperator ist $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, wobei sich der Impuls auf die Bewegung entlang des Kreises bezieht. Der Kreis ist eindimensional, weshalb wir ihn mit einer Ortskoordinate x parametrisieren können. Dieses x ist aber im Intervall $[0, 2\pi R]$. Da der Kreis bei $x = 2\pi R$ wieder von vorne anfängt und die Wellenfunktion sowie deren Ableitung stetig sind gilt:

$$(I) : \Psi(0) = \Psi(2\pi R)$$

$$(II) : \Psi'(0) = \Psi'(2\pi R)$$

Die Randbedingungen (I) und (II) werden als periodische Randbedingungen bezeichnet, und müssen für alle Ableitungen stimmen.

- (b) Bestimme die Eigenenergien und Eigenzustände des Systems.
Vergleiche das Ergebnis mit dem unendlich tiefen Potentialtopf (Aufgabe 5.6).

Wie schon beim unendlich tiefen Potentialtopf, können wir einen Ansatz für die Wellenfunktion machen, der aus oszillatorischen Termen besteht:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \text{ mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

und kriegt die Randbedingungen:

$$A + B = Ae^{ik2\pi R} + Be^{-ik2\pi R}$$

$$A - B = Ae^{ik2\pi R} - Be^{-ik2\pi R}$$

Aus beiden Bedingungen zusammen folgt

$$1 = e^{ik2\pi R},$$

wenn wir annehmen, dass A und B nicht gleichzeitig Null sind.

$$\Rightarrow k = k_n = \frac{n}{R} \quad n \in \mathbb{N} \Rightarrow E = E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{2mR^2} \quad n \in \mathbb{N}.$$

Beim unendlich tiefen Potentialtopf der Länge $2\pi R$ wären die Energieniveaus $E_n^{Topf} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mR^2}$. Die Unterschiede (Faktor 2 statt 8 im Nenner und Entartung hier auf dem Kreis: für gegebene Energie E_n sind die beiden Ortswellenfunktionen $\exp(\pm ik_n x)$ beides Eigenzustände) kommen von den leicht unterschiedlichen Randbedingungen: Der normale unendlich tiefe Potentialtopf ist ein Spezialfall des hier betrachteten Systems, bei dem die Ortswellenfunktionen bei $x = 0 = 2\pi R$ auf 0 festgesetzt werden und die Stetigkeit der Ableitung an dieser Stelle nicht mehr gilt.

Die Funktionen $e^{\pm ik_n x}$ sind auf dem Intervall $[0, 2\pi R]$ orthogonal, d.h. die Energieniveaus sind entartet. Jede Linearkombination der beiden entarteten Eigenzustände ist natürlich wieder ein Eigenzustand. Diese Freiheit bei der Wahl der Eigenzustände ist eine Freiheit bei der Diagonalisierung.

6.4: (T) Endlich tiefer Potentialtopf: Gebundene Zustände

Motivation: Diese realistischere Version des Potentialtopfs hat nicht nur gebundene Zustände (diskretes Spektrum), sondern auch ungebundene (kontinuierliches Spektrum). Damit sieht man schon erste Charakteristika von Atomen und Molekülen.

Im Folgenden betrachten wir die gebundenen Zustände, d.h. die stationären Zustände mit Eigenenergie $E < 0$.

Gegeben sei das Potential $V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } -a < x < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

mit $a > 0$ und $V_0 > 0$.

- (a) In der Vorlesung wurden die Anschlussbedingungen für die symmetrischen Wellenfunktionen diskutiert. Zeige, dass sich damit die folgende Bedingung für die Eigenenergie E ergibt:

$$\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \quad (3)$$

mit $z = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}$ und $z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$.

Zur Übersichtlichkeit definieren wir die Größen

$$\kappa := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

$$k := \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

Außerhalb des Topfes lautet die Lösung der SGL dann:

$$\Psi_{out}(x) = Ae^{-\kappa|x|}$$

Innerhalb:

$$\Psi_{in} = B \sin(kx) + C \cos(kx)$$

Terme mit $B = 0$ sind symmetrische Lösungen. Die Anschlussbedingungen verlangen (I) die Stetigkeit der Wellenfunktion und (II) die Stetigkeit derer Ableitung an den Anschlusspunkten $-a/a$ (es genügt hier nur a zu betrachten):

$$\begin{aligned} \text{(I):} \quad C \cos(ka) &= Ae^{-\kappa a} \\ \text{(II):} \quad -kC \sin(ka) &= -\kappa Ae^{-\kappa a} \end{aligned}$$

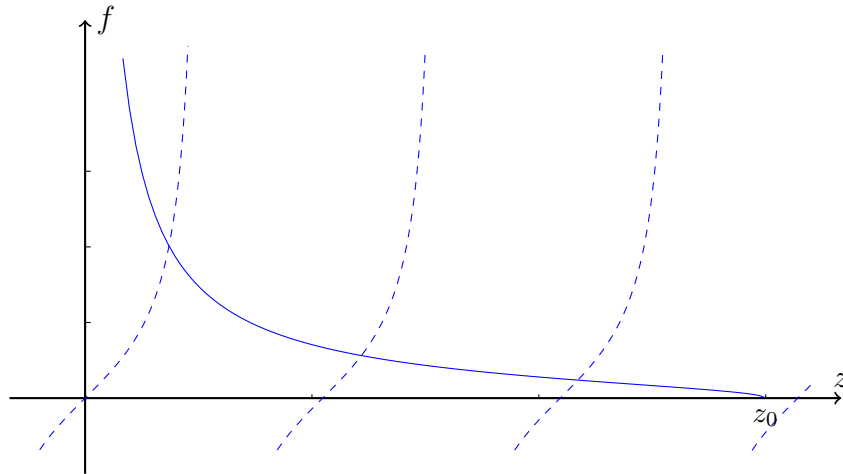
$\Rightarrow k \tan(ka) = \kappa$, bzw. mit den Definitionen $z = ka$ und $z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$

$$\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}.$$

Hier sieht man bereits, dass es nur endlich viele gebundene Zustände gibt, weil $z < z_0$ sein muss.

- (b) Zeige, wie man Gleichung (3) durch eine graphische Konstruktion lösen kann, wenn man die linke und rechte Seite der Gleichung als Funktion von z aufträgt.
(Diese Art der graphischen Lösung von transzendenten Gleichungen ist sehr instruktiv, sie vermittelt "Gefühl" für das System.)

Die Gleichung $\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ löst man graphisch durch die Bestimmung der Schnittpunkte beider Graphen.



Hier ist die durchgezogene Linie die Wurzelfunktion und die gestrichene der Tangens.

- (c) Betrachte den Limes eines sehr tiefen Potentialtopfs, $V_0 \rightarrow \infty$. Diskutiere, wie das Energiespektrum aus der graphischen Lösung mit dem Energiespektrum des unendlich tiefen Potentialtopfs übereinstimmt (Aufgabe 5.6).

Der unendliche Potentialtopf ergibt sich mit $V_0 \rightarrow \infty$. Dann gilt $z_0 \rightarrow \infty$. Der Wurzelausdruck wird dann groß (wir betrachten z als freie Variable) und die Schnittpunkte sind entsprechend bei Werten von z , die große Werte für den Tangens ergeben. Diese sind $z \approx n\frac{\pi}{2}$ mit n ungerade. Die Energien sind durch $E_n + V_0$ (Differenz zum Boden des Topfes) gegeben:

$$E_n + V_0 \approx \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

- (d) Betrachte nun einen sehr flachen Potentialtopf. Gibt es immer einen gebundenen symmetrischen Zustand?

Der erste Zweig des Tangens (die Zweige ergeben sich aus der Periodizität) hat bei $z=0$ den Wert Null und divergiert bei $z = \frac{\pi}{2}$, wobei der Tangens auf diesem Intervall streng monoton wachsend ist. Der Wurzelausdruck divergiert bei $z = 0$ und ist streng monoton fallend. Folglich wird es immer mindestens eine symmetrische Lösung geben, unabhängig davon wie flach der Topf ist.

- (e) Leite eine analoge Gleichung zu (3) für die anti-symmetrischen Wellenfunktionen her.

Analog zum symmetrischen Ausdruck leiten wir her

$$-\cot(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

- (f) Diskutiere anhand der graphischen Lösung dieser Gleichung, ob es immer einen gebundenen anti-symmetrischen Zustand gibt.

Der negative Cotangens ist, ebenso wie der Tangens, auf dem Intervall $[0, \frac{\pi}{2}]$ streng monoton wachsend. Allerdings divergiert er bei $z=0$ nach $-\infty$ und schneidet bei $z = \frac{\pi}{2}$ die x-Achse. Der Wurzelausdruck ergibt Null, wenn $z = z_0$ ist, danach wird er imaginär. Folglich wird es keine anti-symmetrische Lösung geben, falls $z_0 \leq \frac{\pi}{2}$ ist.

Eine schöne veranschaulichung von diesen ganzen Rechnungen findet man im Wolfram Demonstration Project "Finite Potential Well":
<http://demonstrations.wolfram.com/FinitePotentialWell/>

6.5: (T) Virialsatz

Motivation: In der klassischen Mechanik gibt der Virialsatz eine Relation zwischen den zeitlichen Mittelwerten von kinetischer und potentieller Energie:

$$2\langle E_{\text{kin}} \rangle_t = \langle x E'_{\text{pot}} \rangle_t$$

Der Zusammenhang gilt auch in der Quantenmechanik (wobei die zeitlichen Mittelwerte durch die Erwartungswerte der Operatoren ersetzt sind), was hier gezeigt werden soll.

- (a) Sei \mathcal{H} ein beliebiger Hilbertraum, $\hat{H} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ der Hamiltonoperator des betrachteten Systems und $|\phi_n\rangle \in \mathcal{H}$ ein Eigenvektor von H zum Eigenwert E_n . Zeige, dass für einen beliebigen Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ gilt:

$$\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_n = \langle \phi_n | [\hat{A}, \hat{H}] | \phi_n \rangle = 0 \quad (4)$$

Es ist $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, wobei \hat{H} der Hamiltonoperator ist.

$$\langle \phi_n | [\hat{A}, \hat{H}] | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | \hat{A}\hat{H} | \phi_n \rangle - \langle \phi_n | \hat{H}\hat{A} | \phi_n \rangle = (E_n - E_n^*) \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle = 0,$$

wobei wir hier die Wirkung des adjungierten Operators auf einen Bra-Vektor, sowie die reellwertigkeit der Eigenenergien ausnutzen.

Sei nun \hat{H} gegeben durch

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

- (b) Berechne die Kommutatoren $[\hat{H}, \hat{p}]$, $[\hat{H}, \hat{x}]$ und $[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}]$.

Die ersten beiden Kommutatoren wurden schon in Aufgabe 6.1 (b) berechnet:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] &= -\frac{i\hbar}{m}\hat{p} \\ [\hat{H}, \hat{p}] &= i\hbar V'(\hat{x}) \end{aligned}$$

Beim Kommutator $[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}]$ können wir die Kommutatorrelation $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ benutzen:

$$[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] = [\hat{H}, \hat{x}]\hat{p} + \hat{x}[\hat{H}, \hat{p}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}^2 + i\hbar\hat{x}V'(\hat{x})$$

- (c) Zeige, dass der Impulserwartungswert in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators verschwindet.

Der Impulsoperator ist proportional zu $[\hat{H}, \hat{x}]$, somit wird nach (a) dessen Erwartungswert in einem Energieeigenzustand verschwinden.

Anschaulich: Ein Energieeigenzustand verändert sich mit der Zeit (Zeitentwicklung ist ja gerade durch den Hamiltonian gegeben) nicht (bzw bekommt nur eine globale phase die bei der Berechnung beliebiger Erwartungswerte verschwindet). Das impliziert, dass der Zustand nicht "davonläuft", d.h. der Zustand verändert seinen Ort nicht. Wenn er nun einen endlichen Impulserwartungswert hätte, dann würde das ja nun gerade bedeuten, dass der Zustand sich mit endlicher Geschwindigkeit irgendwo hinbewegt. Verschwinden der Impulserwartungswert bedeutet also schlicht, dass der Zustand an Ort und Stelle bleibt, eine recht anschauliche Eigenschaft eines "stationären" Zustands.

- (d) Stelle eine Beziehung zwischen dem Erwartungswert der kinetischen Energie und dem Erwartungswert von $\hat{x}V'(\hat{x})$ in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators her.

Aus (b) wissen wir

$$[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}^2 + i\hbar\hat{x}V'(\hat{x}) \Rightarrow \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{-i\hbar}[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] + \hat{x}V'(\hat{x}) \right) \Rightarrow \langle \hat{T} \rangle_n = \frac{\langle \hat{x}V'(\hat{x}) \rangle_n}{2}$$

- (e) Wie sieht der Spezialfall $V(x) = \lambda x^n$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{Z}$ aus?

Sei $V(x) = \lambda x^n$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{Z}$. Damit ist

für $n=0$:

$$V'(x) = 0 \Rightarrow \langle \hat{T} \rangle_m = 0 \quad \forall m$$

für $n \neq 0$:

$$V'(x) = \lambda n x^{n-1} = n \frac{V(x)}{x} \Rightarrow \langle \hat{T} \rangle_m = \frac{n}{2} \langle V(\hat{x}) \rangle_m \quad \forall m$$