Ferienkurs Quantenmechanik I

Lösungen Donnerstag

Aufgabe 1: Kommutatoren der Schwerpunkts- und Relativkoordinate

Verwendet man, dass die Operatoren zu verschiedenen Teilchen kommutieren, ergibt sich:

$$[R_i, P_j] = \left[\frac{m_1 r_{1,i} + m_2 r_{2,i}}{m_1 + m_2}, p_{1,j} + p_{2,j}\right] = \frac{m_1}{m_1 + m_2}[r_{1,i}, p_{1,j}] + \frac{m_2}{m_1 + m_2}[r_{2,i}, p_{2,j}] =$$

$$= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2}\delta_{ij} i\hbar = \delta_{ij} i\hbar$$

$$[r_i, p_j] = \left[r_{1,i} - r_{2,i}, \frac{m_2 p_{1,j} - m_1 p_{2,j}}{m_1 + m_2}\right] = \frac{m_2}{m_1 + m_2}[r_{1,i}, p_{1,j}] + \frac{m_1}{m_1 + m_2}[r_{2,i}, p_{2,j}] =$$

$$= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2}\delta_{ij} i\hbar = \delta_{ij} i\hbar$$

Aufgabe 2: Zeeman-Effekt

a) Da die Kernmesse als unendlich angenommen wird, gilt $\mu = m_e$. Somit gilt:

$$H = \frac{1}{2m_e}(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{1}{2m_e}\left[\vec{p}^2 + \frac{e}{c}(2\vec{A}\cdot\vec{p}) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2\right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} =$$

$$= \frac{1}{2m_e}\left[\vec{p}^2 + \frac{e}{c}(\vec{B}\times\vec{r})\cdot\vec{p} + \frac{e^2 B^2}{4c^2}(x^2 + y^2)\right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} =$$

$$= \frac{1}{2m_e}\left[\vec{p}^2 + \frac{e}{c}B(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\vec{e_z} + \frac{e^2 B^2}{4c^2}r^2\sin^2\theta\right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} =$$

$$= \frac{1}{2m_e}\left[\vec{p}^2 + \frac{eB}{c}L_z + \frac{e^2 B^2}{4c^2}r^2\sin^2\theta\right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} =$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + \frac{eB}{2m_e c}L_z + \frac{e^2 B^2}{8m_e c^2}r^2\sin^2\theta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} =$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\omega}{2}L_z + \frac{m_e\omega^2}{8}r^2\sin^2\theta = H_0 + H'$$

wobei H_0 aus den ersten beiden, H' aus den letzten beiden Termen besteht.

b) Es ergibt sich das vertraute Ergebnis

$$\Delta E = \frac{\omega}{2}\langle nlm \,|\, L_z \,|\, nlm\rangle = \frac{\omega}{2}\hbar m = \mu_B B m$$

Die $(2l+1)$-fache Entartung bzgl. m wird also aufgehoben, bestehen bleibt allerdings die $(n-1)$-fache Entartung bzgl. l.

Aufgabe 3: Der Grundzustand des Wasserstoffatoms

a) Der Grundzustand lautet

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron in einer Kugelschale mit Radius r und Dicke dr befindet ist $P = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$.

$$\Rightarrow P = \frac{4}{a_B^3} e^{-2r/a_B} r^2 dr = p(r)dr \qquad \text{mit } p(r) = \frac{4}{a_B^3} e^{-2r/a_B} r^2$$

$$p'(r) = \frac{4}{a_B^3}\left[2re^{-2r/a_B} + r^2\left(-\frac{2}{a_B}e^{-2r/a_B}\right)\right] = \frac{8r}{a_B^3}e^{-2r/a_B}\left(1-\frac{r}{a_B}\right) = 0$$

$$\Rightarrow r = a_B$$

b)

$$\langle r\rangle = \int |\psi|^2 r(r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi) = \frac{4\pi}{\pi a_B^3}\int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_B} dr \underset{\rho=2r/a_B}{=}$$

$$= \frac{4}{a_B^3}\left(\frac{a_B}{2}\right)^4 \int_0^\infty \rho^3 e^{-\rho} d\rho = \frac{a_B}{4} 3! = \frac{3}{2} a_B$$

Aufgabe 4:
Definition der Spur, Dichtematrix eines reinen Zustandes

a)

$$\sum_n \langle n \,|\, X \,|\, n\rangle = \sum_n \sum_m \langle n \,|\, m\rangle \langle m \,|\, X \,|\, n\rangle = \sum_m \sum_n \langle m \,|\, X \,|\, n\rangle \langle n \,|\, m\rangle =$$

$$= \sum_m \langle m \,|\, X \,|\, m\rangle$$

b) Zunächst berechnen wir $\rho_{tot} = |\psi_{tot}\rangle \langle \psi_{tot}|$:

$$\rho_{tot} = \sum_{n,m} \sum_{n',m'} a_n b_m a^*_{n'} b^*_{m'} |n\rangle |m\rangle \langle n'| \langle m'|$$

Als nächstes berechnen wir $\hat{\rho} = \mathrm{Sp}_b(\rho_{tot})$ durch Summation über die Basis $|\tilde{m}\rangle$ und verwenden die Orthogonalität dieser Basis:

$$\hat{\rho} = \sum_{\tilde{m}} \sum_{n,m} \sum_{n',m'} a_n b_m a^*_{n'} b^*_{m'} |n\rangle \langle \tilde{m} \,|\, m\rangle \langle n'| \langle m' \,|\, \tilde{m}\rangle = \sum_{n,m} \sum_{n'} a_n b_m a^*_{n'} b^*_m |n\rangle \langle n'|$$

Bei der Berechnung des Quadrats dieses Operators kommt man nicht um die vielen Indizes herum...

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{n_1,m_1,n'_1} \sum_{n_2,m_2,n'_2} \left(a_{n_1} b_{m_1} a^*_{n'_1} b^*_{m_1}\right)\left(a_{n_2} b_{m_2} a^*_{n'_2} b^*_{m_2}\right) |n_1\rangle \langle n'_1 \,|\, n_2\rangle \langle n'_2| =$$

$$= \sum_{n_1,n_2,n'_2} \left(\sum_{m_1} a_{n_1} b_{m_1} a^*_{n_2} b^*_{m_1}\right)\left(\sum_{m_2} a_{n_2} b_{m_2} a^*_{n'_2} b^*_{m_2}\right) |n_1\rangle \langle n'_2|$$

wobei im letzten Schritt die Orthogonalität von $|n\rangle$ verwendet wurde. Nun können wir die Spur dieses Operators bzgl. des Systems a berechnen, d.h. wir summieren über die Basis $|n\rangle$ und verwenden gleich $\langle n \,|\, n_1 \rangle = \delta_{n,n_1}$ und $\langle n_2' \,|\, n \rangle = \delta_{n_2',n}$:

$$\mathrm{Sp}_a\left(\hat{\rho}^2\right) = \sum_n \left\langle n \,\middle|\, \hat{\rho}^2 \,\middle|\, n \right\rangle = \sum_{n,n_2} \left(\sum_{m_1} a_n b_{m_1} a^*_{n_2} b^*_{m_1} \right) \left(\sum_{m_2} a_{n_2} b_{m_2} a^*_n b^*_{m_2} \right) =$$

$$= \sum_{n,n_2} \left| \sum_m a_n b_m a^*_{n_2} b^*_m \right|^2 = \sum_{n,n_2} |a_n|^2 |a_{n_2}|^2 \sum_m |b_m|^2 = 1 \cdot 1 \cdot 1 = 1$$

Aufgabe 5: Dichtematrix von Zwei-Niveau-Systemen

a) Mit der Einsteinschen Summenkonvention ergibt sich für das Quadrat der Dichtematrix:

$$\rho^2 = \frac{1}{4}(1 + (\mathbf{P}\cdot\sigma)^2 + 2\mathbf{P}\cdot\sigma) = \frac{1}{4}(1 + P_i P_j \sigma_i \sigma_j + 2P_i\sigma_i) =$$

$$= \frac{1}{4}(1 + P_i P_j(\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k) + 2P_i\sigma_i) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{P}^2 + 2\mathbf{P}\cdot\sigma)$$

Mit der kleinen Nebenrechnung $\mathrm{Sp}\ (\mathbf{P}\cdot\sigma) = \mathrm{Sp}\ (P_x\sigma_x + P_y\sigma_y + P_z\sigma_z) = 0$ wegen der Spurfreiheit der Paulimatrizen folgt:

$$\mathrm{Sp}\ \rho^2 = \frac{1}{4}(2 + 2\mathbf{P}^2 + 0) = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}^2)$$

Aus der Vorlesung entnehmen wir, dass stets $\mathrm{Sp}\ \rho^2 \leq 1$ gilt, daraus folgt unmittelbar $\mathbf{P}^2 \leq 1$. Außerdem ist $\mathrm{Sp}\ \rho^2$ genau dann gleich 1, wenn ρ einen reinen Zustand beschreibt. Wegen $\mathrm{Sp}\ \rho^2 = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}^2)$ tritt dies genau im Fall $\mathbf{P}^2 = 1$ ein.

b) Unter der Verwendung der Spurfreiheit der Paulimatrizen ergibt sich:

$$\langle \sigma \cdot \mathbf{n} \rangle = \mathrm{Sp}\left[\rho(\sigma\cdot\mathbf{n})\right] = \mathrm{Sp}\left[\frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}\cdot\sigma)(\sigma\cdot\mathbf{n})\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\mathrm{Sp}(\sigma\cdot\mathbf{n}) + \mathrm{Sp}\left[(\mathbf{P}\cdot\sigma)(\sigma\cdot\mathbf{n})\right]\right] = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}(P_i\sigma_i\sigma_j n_j) = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}(n_j P_i \sigma_i \sigma_j) =$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\left[n_j P_i(\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k)\right] = \frac{1}{2}\left[n_i P_i \cdot 2 + i n_j P_i \mathrm{Sp}(\epsilon_{ijk}\sigma_k)\right] = n_i P_i = \mathbf{P}\cdot\mathbf{n}$$

c) Es gilt die Schrödingergleichung

$$H\,|\chi\rangle = i\hbar\partial_t\,|\chi\rangle$$

Die adjungierte Gleichung ergibt wegen $H^\dagger = H$

$$\langle\chi|\,H = -i\hbar\partial_t\,\langle\chi|$$

Damit ergibt sich:

$$i\hbar\partial_t\rho = i\hbar\partial_t(|\chi\rangle\,\langle\chi|) = i\hbar\left[(\partial_t\,|\chi\rangle)\,\langle\chi| + |\chi\rangle\,\partial_t\,\langle\chi|\right] = H\,|\chi\rangle\,\langle\chi| - |\chi\rangle\,\langle\chi|\,H = [H,\rho]$$