Universität zu Köln
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. Claus Kiefer
Manuel Krämer

25. April 2012

www.thp.uni-koeln.de/gravitation/courses/qm12.html

3. Übungsblatt zur Quantenphysik

Sommersemester 2012

Abgabe: bis Mittwoch, 2. Mai 2012, 12:00 Uhr in der Holzbox vor dem Institut für Theoretische Physik

Übung 6 (4 Punkte): *Ehrenfest-Theorem*

6.1 Wiederholen Sie kurz die in der Vorlesung behandelte Herleitung der Ehrenfest-Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{x}\rangle = \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}\,, \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{p}\rangle = -\left\langle\vec{\nabla}V(\vec{x})\right\rangle. \tag{2}$$

6.2 Entwickeln Sie in (2) das Potential in $\vec{x} - \langle\vec{x}\rangle$ bis zu Termen mit dritter Ableitung.
Für welche Potentiale kann $\left\langle\vec{\nabla}V(\vec{x})\right\rangle$ durch $\vec{\nabla}V(\langle\vec{x}\rangle)$ ersetzt werden?

Übung 7 (9 Punkte): *Virialsatz*

7.1 Betrachten Sie den Operator $\vec{x}\cdot\vec{p}$ und zeigen Sie, dass

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{x}\cdot\vec{p}\rangle = \Big\langle[\vec{x}\cdot\vec{p}\,,\,H]\Big\rangle\,, \tag{3}$$

wobei H der Hamilton-Operator ist.

7.2 Zeigen Sie, dass sich (3) mit $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$ schreiben lässt als

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{x}\cdot\vec{p}\rangle = \left\langle\frac{\vec{p}^2}{m}\right\rangle - \int \mathrm{d}^3x\;\psi^*\left(\vec{x}\cdot\vec{\nabla}V\right)\psi\,. \tag{4}$$

7.3 Zeigen Sie, dass trotz der Nichtkommutativität von $\vec{x}$ und $\vec{p}$ dieselbe Gleichung (4) für $\langle\vec{p}\cdot\vec{x}\rangle$ gilt.

7.4 Bilden Sie analog zur klassischen Mechanik das folgende zeitliche Mittel über eine Zeit τ:

$$\frac{1}{\tau}\Big(\langle\vec{x}\cdot\vec{p}\rangle_{t=\tau} - \langle\vec{x}\cdot\vec{p}\rangle_{t=0}\Big)\,.$$

Wir nehmen an, dass der Ausdruck in Klammern für $\tau\to\infty$ endlich bleibe.
Zeigen Sie, dass dann aus (4)

$$2\,\overline{\langle T\rangle} = \overline{\left\langle\vec{x}\cdot\vec{\nabla}V\right\rangle} = -\,\overline{\left\langle\vec{x}\cdot\vec{K}\right\rangle} \tag{5}$$

folgt, wobei der Querstrich das zeitliche Mittel für $\tau\to\infty$, T die kinetische Energie und $\vec{K}$ die Kraft bezeichnen. Gleichung (5) ist die quantenmechanische Fassung des aus der klassischen Mechanik bekannten Virialsatzes.
Was folgt aus (5) für stationäre Zustände?

Bitte wenden.

Übung 8 (5 Punkte): *Eigenwertprobleme von Differentialoperatoren*

Betrachten Sie die Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dx^2}\,u + \lambda u = 0\,, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

für eine reelle Funktion $u(x)$ (im Folgenden ist $u'(x) := \frac{du}{dx}$).

8.1 Beweisen Sie die Positivität des Operators $\mathcal{D} := -\frac{d^2}{dx^2}$ für die Randbedingungen $u(0) = u(\pi) = 0$, d. h., dass für alle derartigen Funktionen $u(x)$ gilt: $\int_0^\pi dx\; u\,\mathcal{D}\,u \geq 0$.
Berechnen Sie explizit Eigenwerte und Eigenfunktionen für diese Randbedingungen.
Lässt sich jede in $(0, \pi)$ stetig differenzierbare Funktion $\phi(x)$ mit $\phi(0) = \phi(\pi) = 0$ in eine Reihe nach diesen Eigenfunktionen entwickeln?

8.2 Für die Randbedingung $u(0) = u'(0)$, $u(1) = 0$ bestimme man Eigenwerte und Eigenfunktionen und zeige, dass für die Eigenwerte λ_n gilt:

$$\sqrt{\lambda_n} = \frac{\pi}{2} + n\,\pi + \beta_n\,, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

mit $\beta_n \to 0$ für $n \to \infty$.

Historische Briefwechsel zur Quantenmechanik

Lieber Ehrenfest!

Soeben kommt mir das Heft der Zeitschrift für Physik in die Hand, das Ihre „Erkundigungsfragen“ enthält. Die Lektüre dieses Aufsatzes wird mir eine Quelle ungetrübten Vergnügens! [...]

Nun komme ich zur anfangs gestellten Frage über die Notwendigkeit von mindestens *zwei* reellen Skalaren bei den de Broglie-Schrödinger-Wellen. Ich behaupte, diese Notwendigkeit und damit auch die imaginäre Einheit kommt hinein *beim Suchen nach einem Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichte W, der die Forderungen* $W(\vec{x}, t) \geq 0$ *und* $\int W(\vec{x}, t)\, d^3x = 1$ *befriedigt und der die zeitlichen Ableitungen der* ψ *nicht enthält.* Die letztere Forderung ist nötig, um den Begriff „Anzahl der benützten Skalare“ eindeutig zu machen. Ein *einziger* reeller Skalar, der einer Differentialgleichung 2. Ordnung in t genügt, ist ja äquivalent der Benutzung von *zwei* reellen Skalaren, die Differentialgleichungen erster Ordnung in t genügen (man setze dann $\frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \psi_2$).

aus: Wolfgang Pauli, *Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u.a.*, Band II, hrsg. von Karl von Meyenn, Springer 1985. (Brief an Paul Ehrenfest vom 28. Oktober 1932)

Die Mathematik ist bei mir wesentlich einfacher oder doch wohlvertrauter als bei Born. Das Atom ist ein Randwertproblem einer partiellen Differentialgleichung, die sich von $\Delta u + k^2 u = 0$ wesentlich nur dadurch unterscheidet, daß k^2 eine Ortsfunktion ist. Im relativistischen Fall wird es etwas komplizierter sein, das ist noch nicht ganz geklärt. Die Differentialgleichung entspringt aus einem Hamiltonschen Prinzip (genau wie andere Wellengleichungen), welches Hamiltonsche Prinzip nun aber den Bewegungsgleichungen *und* den Quantenbedingungen zusammen äquivalent ist.

Die Sachen erscheinen in den Annalen, morgen geht die dritte Note ab, und es werden – leider – noch einige folgen müssen; ich sage leider, obwohl mir die Sache ja einen Mordsspaß macht, aber ich bin ein Bissel abgespannt und die Geschichte läßt mich doch nicht aus.

aus: Erwin Schrödinger, *Eine Entdeckung von ganz außerordentlicher Tragweite*, Band 1, hrsg. von Karl von Meyenn, Springer 2011. (Brief an Hans Thirring vom 17. März 1926)