Quantenmechanik II. Musterlösung 3.

Übung 1. Eichtransformation und ED

In dieser Übung sollen Grundlagen der ED wiederholt werden, sowie auf deren Anwendung auf die QM eingegangen werden.

Wir können die Maxwell-Gleichungen klassisch zunächst wie folgt schreiben:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 4\pi \rho(\vec{r}, t) \tag{1}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \tag{2}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) \tag{3}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, t)$$
 (4)

(a) Schreibe diese Gleichungen mit Hilfe einer Fourier-Transformation um für $\vec{E}(\vec{k},t)$ und $\vec{B}(\vec{k},t)$. Dann betrachte separat die Komponenten der \vec{E} und \vec{B} Felder parallel und orthogonal zu \vec{k} .

Lösung: Nach einer Fourier-Transformation erhalten wir

$$i\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, t) = 4\pi\rho(\vec{k}, t) \tag{L.1}$$

$$i\vec{k} \cdot \vec{B}(\vec{k}, t) = 0 \tag{L.2}$$

$$i\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, t) = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{B}(\vec{k}, t) \tag{L.3}$$

$$i\vec{k} \times \vec{B}(\vec{k},t) = \frac{1}{c}\partial_t \vec{E}(\vec{k},t) + \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{k},t)$$
 (L.4)

Die ersten 2 Gleichungen beschreiben also die Komponenten parallel zu \vec{k} , die letzten 2 die Transversalkomponenten.

(b) Als nächstes führen wir nun die Potentiale \vec{A} und ϕ ein. Diese hängen mit den beobachtbaren Feldern wie folgt zusammen:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}\phi(\vec{r},t) - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A}(\vec{r},t)$$
 (5)

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t) \tag{6}$$

Leite von den obigen Gleichungen ausgehend die im Skript angegebene Form der inhomogenen Maxwell-Gleichungen her.

Lösung: Durch direktes Einsetzen ergibt sich:

$$-\nabla^2 \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \partial_t \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 4\pi \rho(\vec{r}, t)$$
 (L.5)

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t)) = \frac{1}{c} \partial_t (-\vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t)) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, t)$$
(L.6)

Die zweite Gleichung lässt sich umschreiben als

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}(\vec{r},t)) - \nabla^2\vec{A}(\vec{r},t) + \frac{1}{c}\partial_t\vec{\nabla}\phi(\vec{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{r},t)$$
(L.7)

Dies entspricht den Gleichungen im Skript.

(c) Indem du die Gleichungen für den reziproken Raum umschreibst, zeige explizit die Wirkung von Eichtransformationen auf die einzelnen Komponenten von $\vec{A}(\vec{k},t)$, $\vec{E}(\vec{k},t)$ und $\vec{B}(\vec{k},t)$:

$$\vec{A}(\vec{r},t) \to \vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) \tag{7}$$

$$\phi(\vec{r},t) \to \phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t) - \frac{1}{c}\partial_t \chi(\vec{r},t)$$
(8)

Lösung: Im reziproken Raum haben wir:

$$\vec{A}(\vec{k},t) \to \vec{A}'(\vec{k},t) = \vec{A}(\vec{k},t) + i\vec{k}\chi(\vec{k},t) \tag{L.8}$$

$$\phi(\vec{k},t) \to \phi'(\vec{k},t) = \phi(\vec{k},t) - \frac{1}{c} \partial_t \chi(\vec{k},t)$$
 (L.9)

Es verändern sich also nur ϕ und die longitudinalen Komponenten von \vec{A} unter den Eichtransformationen; \vec{A}_{\perp} bleibt invariant.

Für die Felder ergibt sich:

$$\vec{E}(\vec{k},t) = -i\vec{k}\phi(\vec{k},t) - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A}(\vec{k},t)$$
(L.10)

$$\vec{B}(\vec{k},t) = i\vec{k} \times \vec{A}(\vec{k},t) \tag{L.11}$$

Man sieht also sofort, dass die transversalen Felder \vec{E}_{\perp} und \vec{B} nur von den invarianten Komponenten \vec{A}_{\perp} abhängen. Für \vec{E}_{\parallel} löschen sich die jeweiligen Änderungen durch ϕ und \vec{A}_{\parallel} gegenseitig aus.

(d) Inwiefern lassen sich durch geeignete Wahl der Eichung Probleme vereinfachen? Oftmals nützlich ist die Coulomb-Eichung, in der $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$. Warum wird diese auch 'transversale Eichung' genannt?

Lösung: In der Coulomb-Eichung gilt:

$$i\vec{k}\cdot\vec{A} = 0 \tag{L.12}$$

und somit wird die Longitudinalkomponente \vec{A}_{\parallel} gleich 0 gesetzt. Damit besteht \vec{A} also nur noch aus einer Transversalkomponente - deshalb wird die Eichung auch transversale Eichung genannt. Durch eine solche Eichung vereinfachen sich die Gleichungen für \vec{E}_{\parallel} und ϕ :

$$\vec{E}_{\parallel}(\vec{k},t) = -i\vec{k}\phi(\vec{k},t) \tag{L.13}$$

Zusammen mit der ersten Maxwell Gleichung ergibt sich in dieser Eichung also:

$$\vec{E}_{\parallel}(\vec{k},t) = -4\pi \frac{i\vec{k}}{k^2} \rho(\vec{k},t) \tag{L.14} \label{eq:L.14}$$

$$\phi(\vec{k},t) = \frac{4\pi}{k^2}\rho(\vec{k},t) \tag{L.15}$$

Damit enspricht insbesondere das Potential ϕ mit dem Ausdruck aus der Elektrostatik überein für die gleichzeitige Ladungsverteilung ρ .

Neben der Coulomb-Eichung findet auch z.B. die so genannte Lorenz-Eichung häufig Anwendung - in dieser verschwindet die Länge des Vierervektors $\mathbf{A}=(\phi,\vec{A})$. Sie hat den Vorteil der Invarianz unter Lorentz-Transformationen.

Übung 2. Elektromagnetische Strahlung

In dieser Übung betrachten wir nun die Wechselwirkung zwischen Materie und einem elektromagnetischen Strahlungsfeld. Dazu benötigen wir als erstes den Hamilton-Operator für unser System:

 $H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})$ (9)

(a) Zeige explizit, dass sich unter Eichtransformationen (siehe oben) die Lösung ψ der zeitabhängigen Schrödingergleichung transformiert wie $e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi$.

Lösung: Nach einer Eichtransformation erhalten wir den neuen Hamilton-Operator:

$$H' = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi'(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})$$
 (L.16)

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla \chi \right)^2 + e\phi - \frac{e}{c} \partial_t \chi + U(\mathbf{r})$$
 (L.17)

Damit erhalten wir die neue Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi' = H' \psi' \tag{L.18}$$

Wenn wir für ψ' den Ausdruck $e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi$ einsetzen, erhalten wir also

$$i\hbar\partial_{t}(e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}(\nabla\chi)\right)^{2} + e\phi - \frac{e}{c}(\partial_{t}\chi) + U(\mathbf{r})\right]e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi$$

$$= \left[\frac{1}{2m}\left((\frac{\hbar}{i}\nabla)^{2} + (\frac{e}{c}\mathbf{A})^{2} + (\frac{e}{c}(\nabla\chi))^{2} - (\frac{\hbar}{i}\nabla)(\frac{e}{c}\mathbf{A}) - (\frac{e}{c}\mathbf{A})(\frac{\hbar}{i}\nabla) - 2(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})\frac{e}{c}(\nabla\chi)\right)\right]$$

$$+ e\phi - \frac{e}{c}(\partial_{t}\chi) + U(\mathbf{r})\left[e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi\right]$$

Insbesondere sehen wir nun, dass der Teil der Ableitung nach der Zeit auf der linken Seite, der auf $e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}$ wirkt, mit dem Term $-\frac{e}{c}(\partial_t \chi)e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi$ auf der rechten Seite übereinstimmt. Ausserdem sehen wir, dass auf der rechten Seite alle Terme, die durch die Eichtransformation entstanden sind, mit den jeweiligen Ableitungen von $e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}$ durch ∇ oder ∇^2 ausgeglichen werden. Unter der Annahme, dass ψ die Schrödingergleichung für H löst, können wir also verifizieren, dass $e^{ie\chi(\vec{r},t)/\hbar c}\psi$ die neue Schrödingergleichung löst.

(b) Für Observablen fordern wir nun, dass ihr Erwartungswert eichinvariant sein soll. Formell bedeutet das also, dass

$$\langle O \rangle = \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) O \psi(\mathbf{r}) = \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) e^{-ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} O' e^{ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} \psi(\mathbf{r}), \tag{10}$$

wobei O' den eichtransformierten Operator bezeichnet.

Analysiere nun die Wirkung der Eichtransformationen auf den Erwartungswert des quantenmechanischen Impulses \mathbf{p} .

Lösung: Der Erwartungswert des Impulses ist

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r})$$
 (L.19)

Nach der Eichtransformation für ψ erhalten wir also (wobei wir benutzen, dass $p'=p=\frac{\hbar}{i}\nabla$):

$$\langle p \rangle' = \int d^3 \mathbf{r} \psi'^*(\mathbf{r}) p' \psi'(\mathbf{r})$$
 (L.20)

$$= \frac{\hbar}{i} \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) e^{-ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} \nabla (e^{ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} \psi(\mathbf{r}))$$
 (L.21)

$$= \langle p \rangle + \frac{e}{c} \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) e^{-ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} (\nabla \chi) (e^{ie\chi(\mathbf{r},t)/\hbar c} \psi(\mathbf{r}))$$
 (L.22)

Diese Grösse ist also offensichtlich nicht eichinvariant.

(c) Welche linear von \mathbf{p} abhängige Grösse hat einen eichinvarianten Erwartungswert? Was bedeutet das also für Observablen, die von \mathbf{p} abhängen?

Lösung: Wenn wir anstelle von **p** den Erwartungswert des Operators $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ betrachten, so finden wir, dass durch die Eichtransformation von **A** genau der durch $\langle p \rangle'$ entstandene Term ausgeglichen wird. Damit haben wir also $\langle (p - \frac{e}{c}A) \rangle = \langle (p - \frac{e}{c}A)' \rangle'$.

Wir haben also gefunden, dass der Erwartungswert des Impulsoperators unter Eichtransformationen nicht invariant ist. Das bedeutet, dass tatsächliche physikalische Observablen nur Funktionen von $(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})$, also von Kombinationen von Impuls und Vektorpotential A sein können (insbesondere ist der Impuls selbst keine observable Grösse). Dieses Prinzip wird auch "Prinzip der minimalen Kopplung" genannt.

(d) Berechne das klassische Limit der Bewegungsgleichungen für die Bewegung im homogenen Magnetfeld ${\bf B}$ (wobei $\phi=0,\,U(r)=0$), indem du die Hamiltongleichungen für Erwartungswerte aufstellst. Vergleiche dabei $m\frac{d\langle {\bf r}\rangle}{dt}$ mit $\langle {\bf p}\rangle$. Was fällt auf?

Lösung: Die Hamiltongleichungen für die Erwartungswerte lauten:

$$i\hbar \frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = \langle [p_i, H] \rangle$$
 (L.23)

$$= \frac{1}{2m} \left\langle \left[p_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 \right] \right\rangle \tag{L.24}$$

$$= \frac{1}{2m} \left\langle \left[p_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \cdot (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) + (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \cdot \left[p_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \right\rangle$$
 (L.25)

und

$$i\hbar \frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \langle [x_i, H] \rangle$$
 (L.26)

$$= \frac{1}{2m} \left\langle \left[x_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 \right] \right\rangle \tag{L.27}$$

$$= \frac{1}{2m} \left\langle \left[x_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \cdot (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) + (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \cdot \left[x_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \right\rangle$$
 (L.28)

$$=\frac{i\hbar}{m}\left\langle p_{i}-\frac{e}{c}A_{i}\right\rangle ,\tag{L.29}$$

da $[x_i, A_j] = 0$ und $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$.

Es fällt nun auf, dass der Erwartungswert der Ortsänderung nicht durch den Erwartungswert des Impulsoperators gegeben ist. Statt dessen, in Übereinstimmung mit dem Ergebnis der letzten Teilaufgabe, ist das analog zum klassischen Impuls hier gegeben durch ($\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$).

(e) Da wir klassisch Operatoren mit ihren Erwartungswerten gleichsetzen können, führen die Bewegungsgleichungen für ein statisches **B**-Feld zum klassischen Ausdruck für die Lorentzkraft. Zeige dies.

Hinweise: Nutze

$$\left\langle \frac{dA_i}{dt} \right\rangle = \langle \dot{\mathbf{x}} \rangle \cdot \langle \nabla A_i \rangle \tag{11}$$

Lösung: Nehmen wir die Hamiltongleichung für p_i aus der letzten Teilaufgabe:

$$i\hbar \frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = \langle [p_i, H] \rangle$$
 (L.30)

$$= \frac{1}{2m} \left\langle [p_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})] \cdot (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) + (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) \cdot [p_i, (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})] \right\rangle$$
(L.31)

$$= \frac{i\hbar e}{2m} \left(\left\langle \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} \cdot (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right\rangle + \left\langle (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} \right\rangle \right)$$
(L.32)

Wenn wir nun klassisch Operatoren durch ihre Erwartungswerte ersetzen (und insbesondere $(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A})$ durch $m\langle \dot{\mathbf{x}} \rangle$), so erhalten wir

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} + \frac{e}{c}\frac{dA_i}{dt} = \frac{e}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} \cdot \dot{\mathbf{x}}$$
 (L.33)

Mit dem Ausdruck aus dem Hinweis können wir nun schreiben:

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{e}{c}(\dot{\mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} - \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla A_i) = \frac{e}{c}(\dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A}))_i$$
 (L.34)

Dies ist der klassische Ausdruck für die Lorentz-Kraft. Das klassische Analogon zum Hamilton-Operator wird, da $m\frac{d\langle x_i\rangle}{dt}=\left\langle (\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A})\right\rangle$, zu

$$H = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2\tag{L.35}$$

Dieser enthält wie erwartet nur die kinetische Energie des Teilchens (die Lorentz-Kraft verrichtet keine Arbeit auf ein klassisches Teilchen).