Arbeitsblatt 10 07.01.2019

Kanonische Transformationen und Symmetrien

In diesem Blatt werden kanonische Transformationen und Symmetrien benutzt um Quantenprobleme einfach zu lösen: ein Zwei-Niveau-System in einem rotierenden Magnetfeld, Galilei-Invarianz der Schrödinger-Gleichung und Rotationssymmetrie eines Ringmoleküls.

Aufgabe 1: Zwei-Niveau-System mit periodischer Störung (10 Punkte)

Betrachten Sie ein magnetisches Moment das sich sowohl in einem stationären Magnetfeld und einem orthogonal dazu rotierenden Magnetfeld befindet. Unter bestimmten Voraussetzungen kann das System vereinfacht durch ein Zweiniveausystem beschrieben werden mit dem Hamiltonian

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}E_0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}E_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & ae^{-i\omega_0 t} \\ ae^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Da der Hamiltonian zeitabhängig ist, gilt im Allgemeinen $H(t_1) \neq H(t_2)$. Dadurch kann der Zeitentwicklungsoperator nicht länger durch die Formel $U(t) \neq \exp\left(-i \int_0^t H(t)dt'\right)$ berechnet werden. Ziel dieser Aufgabe ist die Bestimmung des Zeitentwicklungsoperators mit Hilfe eines Koordinatenwechsels.

Für eine Lösung der Schrödingergleichung $i\hbar d/dt \left|A,t\right\rangle = H(t)\left|A,t\right\rangle$ definieren wir den rotierten Zustand $\left|\widetilde{A},t\right\rangle = V^\dagger(t)\left|A,t\right\rangle$, mit

$$V(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0\lambda/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0\lambda/2} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

(a) Bestimmen Sie den Operator $\widetilde{H}$, für den $i\hbar d/dt \left|\widetilde{A},t\right\rangle = \widetilde{H}(t)\left|\widetilde{A},t\right\rangle$ gilt.

(b) Zeigen Sie, dass für einen allgemeinen Operator $M = \alpha\Sigma$, mit $\Sigma^2 = 1$, gilt

$$e^{iM} = \sum_n \frac{(i\alpha\Sigma)^n}{n!} = 1 \cdot \cos\alpha + i\Sigma \cdot \sin\alpha. \tag{3}$$

Nutzen Sie dieses Ergebnis um den Zeitentwicklungsoperator U(t) zu bestimmen, der den rotierenden Zustand zeitlich entwickelt $\left|A,t\right\rangle = U^\dagger(t)\left|A,0\right\rangle$.

Seien $\left|-\right\rangle, \left|+\right\rangle$ die Eigenzustände von H_0 zu den Eigenwerten $-E_0/2, E_0/2$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei das System im Zustand $\left|-\right\rangle$.

(c) Bestimmen Sie die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{+-}(t)$, dass sich das System nach der Zeit t im Zustand $|+\rangle$ befindet. Wann ist die Wahrscheinlichkeit maximal? In welchem Fall und zu welcher Zeit ist das System garantiert im Zustand $|+\rangle$?

Aufgabe 2: Galilei-Transformationen in der Quantenmechanik (10 Punkte)

In dieser Aufgabe wollen wir den Operator finden, welcher einer Galilei Transformation in klassischen Systemen entspricht. Wir suchen also eine Transformation, welche zwischen zwei Inertialsystemen transformiert. Wir beschränken uns hier auf den eindimensionalen Fall. Ein Inertialsystem K' bewege sich mit einer konstanten Geschwindigkeit v entlang der x-Achse relativ zu einem ruhenden Iniertialsystem K. Es gilt also für die Koordinaten

$$x = x' + vt \qquad t = t' \tag{4}$$

und daher auch für beliebige Potentiale

$$U'(x', t') = U'(x - vt, t) = U(x, t). \tag{5}$$

(a) Die Wellenfunktion $\psi'(x', t)$ in $'$ muss ebenfalls die Schrödingergleichung in K' erfüllen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(x', t) = H'\psi'(x', t) = \left[\frac{1}{2m}(\hat{p}'^2) + U'(x', t)\right]\psi'(x', t) \tag{6}$$

Sie ergibt sich im neuen Bezugssystem K' dabei mittels eines Transformationsoperators $\hat{T}$ aus der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im alten Bezugssystem K, also $\psi'(x', t) = \hat{T}\psi(x, t)$. Zeigen Sie unter zuhilfenahme der Unabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte in verschiedenen Referenzrahmen, dass sich der Transformationsoperator schreiben lässt als $\hat{T} = e^{iS(x,t)}$. Vergewissern Sie sich, dass die Funktion $S(x, t)$ explizit schreiben lässt als

$$S(x, t) = -\frac{mvx}{\hbar} + \frac{mv^2 t}{2\hbar} + C \tag{7}$$

indem Sie fordern, dass Gl. (6) in K-Koordinaten ebenfalls wieder der bekannten Form der Schrödingergleichung entsprechen muss. Beachten Sie, dass die Konstante C nur zu einer globalen Änderung der Phase führt und daher auch ignoriert werden kann.

(b) Wir betrachten nun freie Teilchen, deren Wellenfunktionen ebenen Wellen

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{i2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)}. \tag{8}$$

mit der Wellenlänge λ und der Frequenz ν entsprechen. Diese sind im ruhenden Inertialsystem K über die Planck-Einstein-de Broglie Beziehungen mit dem Impuls p und der Energie E verbunden

$$p = \frac{h}{\lambda}, \qquad E = h\nu. \tag{9}$$

Nutzen Sie das Ergebnis aus Teilaufgabe (a) um zu bestimmen wie sich der Impuls und die Energie unter einer Galilei-Transformation $\hat{T}$ verändern. Betrachten Sie außerdem wie sich die Wellenlänge und Frequenz im neuen System K' ergeben.

(c) Wie verhalten sich die de Broglie und die Planck Beziehung im neuen Inertialsystem K' also unter Galilei-Transformationen?

Aufgabe 3: Atomring

Betrachten Sie einen kreisförmigen Ring von N Atomen, die um ein zentrales Atom angeordnet sind. Der Winkel zwischen zwei benachbarten Atome auf dem Ring sei gegeben durch $\theta = 2\pi/N$. Ein Elektron, dass sich nahe dem zentralen Atom befindet sei im Zustand $|0\rangle$, befindet es sich in der Nähe des n-ten Ringatom, so sei es im Zustand $|n\rangle$, wobei $n \in \{1, \dots, N\}$. Diese Zustände bilden eine Orthonormalbasis, d.h. $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$, mit $n, n' \in \{0, \dots, N\}$. Wir betrachten nun ausschließlich die Prozesse, bei denen ein Elektron vom zentralen Atom auf ein Ringatom oder von einem Ringatom auf das zentrale Atom „springen“ kann, wobei die Wahrscheinlichkeitsamplitude hierfür durch $\hbar\omega$ gegeben sei. Der Hamilton-Operator, der diese Dynamik beschreibt, hat die Form

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_{n=1}^{N} \left(|0\rangle\langle n| + |n\rangle\langle 0|\right). \tag{10}$$

Das System befinde sich in einem allgemeinen Anfangszustand $|\Psi(t=0)\rangle$.

(a) Betrachten Sie den Operator $\mathcal{R}$, der das System um den Winkel $\theta = 2\pi/N$ um eine Achse durch das zentrale Atom senkrecht zum Ring rotiert. Überlegen Sie sich, wie $\mathcal{R}$ auf die Elemente der Basis $\{|n\rangle\}_{n\in\{0,\dots,N\}}$ wirkt und geben Sie die zugehörige Matrix $M_{\mathcal{R}}$ an.

(b) Begründen Sie in Worten, warum $\mathcal{R}$ mit dem Hamilton-Operator $\hat{H}$ vertauschen muss und zeigen Sie dies anschließend durch explizite Rechnung.

(c) Zeigen Sie, dass die Zustände

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle\,, \qquad |\psi_k\rangle = C\sum_{n=1}^{N} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kn\theta}\,|n\rangle\,, \qquad k \in \{1, \dots, N\} \tag{11}$$

Eigenzustände von $\mathcal{R}$ sind und bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte r_k, $k \in \{0, \dots, N\}$ und deren Vielfachheiten. Bestimmen Sie außerdem die Normierungskonstante C.

(d) Zeigen Sie, dass $\hat{H}\,|\psi_k\rangle$ ein Eigenzustand von $\mathcal{R}$ ist. Leiten Sie daraus ab, dass $|\psi_k\rangle$ für $k \in \{1, \dots, N-1\}$ ein Eigenzustand von $\hat{H}$ ist und bestimmen Sie die zugehörigen Energieeigenwerte.
Hinweis: Benutzen Sie $\sum_{n=1}^{N} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kn2\pi/N} = 0$.

(e) Die fehlenden beiden Eigenzustände von $\hat{H}$, hier mit $|\psi_\pm\rangle$ bezeichnet, sind Linearkombinationen aus $|\psi_0\rangle$ und $|\psi_N\rangle$. Finden Sie diese Linearkombinationen.

(f) Bestimmen Sie mit Hilfe Ihrer Ergebnisse aus den vorherigen Aufgabenteilen den Zeitentwicklungsoperator des Systems.

(g) Das Elektron befinde sich nun anfangs beim zentralen Atom, das System hat also den Anfangszustand $|\Psi(t=0)\rangle = |0\rangle$. Bestimmen Sie den Zustand $|\Psi(t)\rangle$ zur Zeit t. Bestimmen Sie daraus die Wahrscheinlichkeit $P(t)$ dafür, dass das Elektron zur Zeit t wieder beim zentralen Atom ist.