Übung 1. Harmonischer Oszillator

Lernziel: Zur (eleganten) Lösung des harmonischen Oszillators wurden Auf- und Absteige-Operatoren eingeführt. Das Ziel dieser Übung ist das Rechnen mit diesen zu üben und Eigenschaften des harmonischen Oszillators zu untersuchen.

Wir betrachten den eindimensionalen harmonischen Oszillator,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \,. \tag{1}$$

Auf- und Absteige-Operatoren sind definiert durch

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}p\right) , \tag{2}$$

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}p\right) , \tag{3}$$

unb erfüllen folgende Eigenschaften:

$$\left[a, a^\dagger\right] = 1 \,, \tag{4}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \,, \tag{5}$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \,, \tag{6}$$

wobei $|n\rangle$ ein Eigenzustand zu H ist.

(a) Berechne $\langle n'|q|n\rangle$, $\langle n'|p|n\rangle$, $\langle n'|\{q,p\}|n\rangle$, $\langle n'|q^2|n\rangle$ und $\langle n'|p^2|n\rangle$.

(b) Berechne die Standardabweichungen von q, Δq, und p, Δp, bezüglich des Eigenzustands $|n\rangle$ und überprüfe die Heisenbergsche Unschärferelation. Was fällt dir für den Grundzustand, $|0\rangle$, auf?

(c) Für stationäre Zustände (= Eigenzustände des Hamiltonoperators) kann gezeigt werden, dass

$$2\langle T\rangle = \langle q\frac{dV}{dq}\rangle \,. \tag{7}$$

Das Virialtheorem behält somit auch in der Quantenmechanik seine Gültigkeit [1]. Überprüfe dies für den harmonischen Oszillator.

Lösung

(a) Mit Hilfe von (2) und (3) finden wir

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a^\dagger + a\right) \,, \tag{L.1}$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a^\dagger - a\right) \,, \tag{L.2}$$

und natürlich gilt

$$[q,p] = i\hbar \,. \tag{L.3}$$

[1] Beachte, dass im klassischen Fall der Erwartungswert einem Zeitmittel entspricht.

- $\langle n'|q|n\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle n'|q|n\rangle &= \langle n'|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a^\dagger + a\right)|n\rangle && \text{(L.4)}\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n'|a^\dagger|n\rangle + \langle n'|a|n\rangle\right) && \text{(L.5)}\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\langle n'|n+1\rangle + \sqrt{n}\,\langle n'|n-1\rangle\right) && \text{(L.6)}\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)\ . && \text{(L.7)}
\end{aligned}$$

- $\langle n'|p|n\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle n'|p|n\rangle &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\langle n'|a^\dagger|n\rangle - \langle n'|a|n\rangle\right) && \text{(L.8)}\\
&= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)\ . && \text{(L.9)}
\end{aligned}$$

- $\langle n'|\left\{q,p\right\}|n\rangle$:

$$\begin{aligned}
\{q,p\} &= qp + pq && \text{(L.10)}\\
&= 2qp + [p,q] && \text{(L.11)}\\
&= 2qp - i\hbar && \text{(L.12)}\\
&= i\hbar\left({a^\dagger}^2 - a^2\right)\ . && \text{(L.13)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle n'|\left\{q,p\right\}|n\rangle &= i\hbar\left(\langle n'|{a^\dagger}^2|n\rangle - \langle n'|a^2|n\rangle\right) && \text{(L.14)}\\
&= i\hbar\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{n',n+2} - \sqrt{n(n-1)}\,\delta_{n',n-2}\right)\ . && \text{(L.15)}
\end{aligned}$$

- $\langle n'|q^2|n\rangle$:

$$\begin{aligned}
q^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^\dagger + a\right)\left(a^\dagger + a\right) && \text{(L.16)}\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left({a^\dagger}^2 + a^2 + 2a^\dagger a + 1\right)\ . && \text{(L.17)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle n'|q^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\langle n'|{a^\dagger}^2|n\rangle + \langle n'|a^2|n\rangle + 2\langle n'|a^\dagger a|n\rangle + \langle n'|n\rangle\right) && \text{(L.18)}\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{n',n+2} + \sqrt{n(n-1)}\,\delta_{n',n-2} + (2n+1)\,\delta_{n',n}\right)\ . && \text{(L.19)}
\end{aligned}$$

- $\langle n'|p^2|n\rangle$:

$$\begin{aligned}
p^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(a^\dagger - a\right)\left(a^\dagger - a\right) && \text{(L.20)}\\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left({a^\dagger}^2 + a^2 - 2a^\dagger a - 1\right)\ . && \text{(L.21)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle m|p^2|n\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(\langle n'|{a^\dagger}^2|n\rangle + \langle n'|a^2|n\rangle - 2\langle n'|a^\dagger a|n\rangle - \langle n'|n\rangle\right) && \text{(L.22)}\\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{n',n+2} + \sqrt{n(n-1)}\,\delta_{n',n-2} - (2n+1)\,\delta_{n',n}\right)\ . && \text{(L.23)}
\end{aligned}$$

(b) Aus (a) folgt, dass die Erwartungswerte von q und p verschwinden,

$$\langle n|q|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0\,. \tag{L.24}$$

Wiederum mit Hilfe von (a) finden wir damit

$$(\Delta q)^2 = \langle n|\left(q - \langle n|q|n\rangle\right)^2|n\rangle \tag{L.25}$$
$$= \langle n|q^2|n\rangle \tag{L.26}$$
$$= \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)\,, \tag{L.27}$$

und

$$(\Delta p)^2 = \langle n|p^2|n\rangle \tag{L.28}$$
$$= m\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\,. \tag{L.29}$$

Wir überpüfen noch die Heisenbergsche Unschärferelation,

$$\Delta q\,\Delta p = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \geq \frac{\hbar}{2}\,. \tag{L.30}$$

Die Unschärferelation ist somit immer erfüllt und nimmt für den Grundzustand, $n = 0$, den minimalen Wert an,

$$\Delta q\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{L.31}$$

(c) Für den harmonischen Oszillator ist

$$q\frac{dV}{dq} = m\omega^2 q^2 = 2V\,, \tag{L.32}$$

und das Virialtheorem nimmt somit die Form

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle\,, \tag{L.33}$$

an.

Der Erwartungswert der kinetischen Energie bzgl. des Eigenzustands $|n\rangle$ ist gegen durch

$$\langle n|T|n\rangle = \frac{1}{2m}\langle n|p^2|n\rangle \tag{L.34}$$
$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)\,. \tag{L.35}$$

Der Erwartungswert der potentiellen Energie ist

$$\langle n|V|n\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle n|q^2|n\rangle \tag{L.36}$$
$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)\,. \tag{L.37}$$

Das Virialtheorem ist also erfüllt.

Übung 2. Coherent states and the displacement operator

Lernziel: In this exercise we investigate the quantum states that behave 'most classically', they are called coherent states. We learn about the displacement operator which creates these states and then investigate what 'most classically' actually means. These states play a prominent role in quantum optics.

Consider a harmonic oscillator with the Hamiltonian

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2). \tag{8}$$

Here $a^\dagger$ and a are the creation and annhilation operators respectively and satisfy $[a, a^\dagger] = 1$ thus describing a bosonic degree of freedom. A coherent state $|\alpha\rangle$ is a normalised eigenvector of the annihilation operator, a, with eigenvalue $\alpha \in \mathbb{C}$, such that $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ and $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$. Throughout this problem we will use dimensionless position and momentum operators with the following properties:

$$\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) = \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar} \tag{9}$$

$$\tilde{p} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger) = \hat{p}/\sqrt{m\omega\hbar} \tag{10}$$

(a) The displacement operator is given by

$$D(\alpha) = exp\left(\alpha a^\dagger - \alpha^* a\right). \tag{11}$$

Show that it may also be given by:

$$D(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} \qquad and \qquad D(\alpha) = e^{\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\alpha^* a} e^{\alpha a^\dagger}. \tag{12}$$

(b) Show that $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ is a coherent state. Here $|0\rangle$ is the ground state of the system.

(c) Express $D(\alpha + \beta)$ in terms of $D(\alpha)$ and $D(\beta)$. Interpret your result.

(d) Evaluate $\langle\tilde{x}\rangle$, $\langle\tilde{p}\rangle$, $\langle\tilde{x}^2\rangle$, $\langle\tilde{p}^2\rangle$ and $\langle\hat{n}\rangle$ for a state $|\alpha\rangle$. Use your result to show that the coherent states minimise the Heisenberg uncertainty. Evaluate the expectation value of the energy of such a state.

(e) Calculate $|\alpha\rangle(t) = e^{-iHt/\hbar}|\alpha\rangle$ to show $|\alpha\rangle(t) = |\alpha(t)\rangle e^{-i\omega t/2}$, with $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$.

(f) We now define $|x_0, p_0\rangle = D(\frac{1}{2}(x_0 + ip_0))|0\rangle$, with x_0 and p_0 real. Show that

$$|x_0, p_0\rangle(t) = |x_0(t), p_0(t)\rangle e^{i\phi(t)}. \tag{13}$$

Here $x_0(t)$ and $p_0(t)$ describe the classical path of a harmonic oscillator with initial conditions $x_0(0) = x_0$ and $p_0(0) = p_0$. The parameter $\phi(t)$ is an overall phase. What is the significance of this result?

*(g) * Evaluate $\langle\hat{n}^m\rangle$, what probability distribution does this correspond to?*

Lösung

(a) Trivial if we use the Baker-Campbell-Hausdorf formula. Keep in mind that we have $[a, [a, a^\dagger]] = [a^\dagger, [a, a^\dagger]] = 0$ which is a requirement of the formula.

(b) We apply a to $|\alpha\rangle$ and check that it is an eigenstate:

$$
\begin{aligned}
a|\alpha\rangle = aD(\alpha)|0\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty} a\frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle && \text{(L.38)}\\
&= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty} a\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle && \text{(L.39)}\\
&= e^{-|\alpha|^2/2}\alpha\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}|n-1\rangle && \text{(L.40)}\\
&= \alpha e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle && \text{(L.41)}\\
&= \alpha D(\alpha)|0\rangle && \text{(L.42)}\\
&= \alpha|\alpha\rangle && \text{(L.43)}
\end{aligned}
$$

Additionally we must check that the state is in fact normalised:

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|D^\dagger(\alpha)D(\alpha)|0\rangle &= e^{-|\alpha|^2}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\langle m|\frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}}\frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle && \text{(L.44)}\\
&= e^{-|\alpha|^2}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}}\frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}}\delta_{nm} && \text{(L.45)}\\
&= e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha^2|^n}{n!} && \text{(L.46)}\\
&= e^{-|\alpha|^2}e^{|\alpha|^2} && \text{(L.47)}\\
&= 1 && \text{(L.48)}
\end{aligned}
$$

(c) We again use the Baker-Campbell-Hausdorf formula:

$$
\begin{aligned}
D(\alpha+\beta) &= exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a + \beta a^\dagger - \beta^* a) && \text{(L.49)}\\
&= D(\alpha)D(\beta)exp\left(-\frac{1}{2}[\alpha a^\dagger - \alpha^* a, \beta a^\dagger - \beta^* a]\right) && \text{(L.50)}\\
&= exp\left(-\frac{\alpha\beta^* - \alpha^*\beta}{2}\right)D(\alpha)D(\beta) && \text{(L.51)}\\
&= exp\left(-i\mathrm{Im}(\alpha\beta^*)\right)D(\alpha)D(\beta) && \text{(L.52)}
\end{aligned}
$$

We see that two displacement operators have the same effect as a single displacement operator with the combined displacement up to a phase factor.

(d) We use $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ and $[a, a^\dagger] = 1$. We use the commutator to apply all the creation operators to the left and all the annihilation operators to the right.

$$\langle\tilde{x}\rangle = \langle\alpha|(a+a^\dagger)|\alpha\rangle/\sqrt{2} \tag{L.53}$$
$$= \langle\alpha|(\alpha+\alpha^*)|\alpha\rangle/\sqrt{2} \tag{L.54}$$
$$= \sqrt{2}\mathrm{Re}(\alpha) \tag{L.55}$$
$$\langle\tilde{p}\rangle = \langle\alpha|(a-a^\dagger)|\alpha\rangle/i\sqrt{2} \tag{L.56}$$
$$= \langle\alpha|(\alpha-\alpha^*)|\alpha\rangle/i\sqrt{2} \tag{L.57}$$
$$= \sqrt{2}\mathrm{Im}(\alpha) \tag{L.58}$$
$$\langle\tilde{x}^2\rangle = \langle\alpha|(a+a^\dagger)^2|\alpha\rangle/2 \tag{L.59}$$
$$= \langle\alpha|(a^2+a^{\dagger 2}+2a^\dagger a+1)|\alpha\rangle/2 \tag{L.60}$$
$$= \langle\alpha|(\alpha^2+\alpha^{*2}+2\alpha^*\alpha+1)|\alpha\rangle/2 \tag{L.61}$$
$$= 2\mathrm{Re}(\alpha)^2+\frac{1}{2} \tag{L.62}$$
$$\langle\tilde{p}^2\rangle = -\langle\alpha|(a-a^\dagger)^2|\alpha\rangle/2 \tag{L.63}$$
$$= -\langle\alpha|(a^2+a^{\dagger 2}-2a^\dagger a-1)|\alpha\rangle/2 \tag{L.64}$$
$$= -\langle\alpha|(\alpha^2+\alpha^{*2}-2\alpha^*\alpha-1)|\alpha\rangle/2 \tag{L.65}$$
$$= 2\mathrm{Im}(\alpha)^2+\frac{1}{2} \tag{L.66}$$

$$\langle\hat{n}\rangle = \langle\alpha|a^\dagger a|\alpha\rangle \tag{L.67}$$
$$= \langle\alpha|\alpha^*\alpha|\alpha\rangle \tag{L.68}$$
$$= |\alpha|^2 \tag{L.69}$$

We can now use these results to show $\Delta x\Delta p = \hbar\sqrt{(\langle\tilde{x}^2\rangle-\langle\tilde{x}\rangle^2)(\langle\tilde{p}^2\rangle-\langle\tilde{p}\rangle^2)} = \hbar/2$, meaning the state minimises the uncertainty principle. The expectation value of the energy $E=\hbar\omega(|\alpha|^2+1/2)$ tells us states with equal mod squared α have equal energy. Note that the energy is not sharp as we are not in an eigenstate of the Hamiltonian.

(e) Here we use that the states $|n\rangle$ are eigenstates of the Hamiltonian.

$$|\alpha\rangle(t) = exp\left(-iHt/\hbar\right)|\alpha\rangle \tag{L.70}$$
$$= e^{-|\alpha|^2/2}exp\left(-iHt/\hbar\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle \tag{L.71}$$
$$= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}exp\left(-iE_nt/\hbar\right)\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{L.72}$$
$$= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}exp\left(-i\omega t(n+1/2)\right)\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{L.73}$$
$$= e^{-|\alpha|^2/2-i\omega t/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha exp\left(-i\omega t\right)a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle \tag{L.74}$$
$$= e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle \qquad \text{with} \qquad \alpha(t)=\alpha e^{-i\omega t} \tag{L.75}$$

What we see is that a coherent state will stay at the same energy as it evolves through time.

(f) We write $\alpha = (x_0 + ip_0)/\sqrt{2}$ and then we can use our previous result.

$$|x_0, p_0\rangle(t) = D(\alpha(t))|0\rangle e^{i\omega t/2} \tag{L.76}$$
$$= D\left(\frac{x_0 cos(\omega t) + p_0 sin(\omega t)}{\sqrt{2}} + i\frac{p_0 cos(\omega t) - x_0 sin(\omega t)}{\sqrt{2}}\right)|0\rangle e^{i\omega t/2} \tag{L.77}$$

We see that the coherent states actually evolve similarly to the classical harmonic oscillator. Such an oscillator would follow the path:

$$x(t) = x_0 cos(\omega t) + p_0 sin(\omega t) \tag{L.78}$$
$$p(t) = p_0 cos(\omega t) - x_0 sin(\omega t) \tag{L.79}$$

(g) By expanding $|\alpha\rangle$ in terms of eigenstates of $\hat{n}$ this problem simplifies considerably.

$$\langle 0|D^\dagger \hat{n}^m D|0\rangle = e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\langle k|\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}\hat{n}^m\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{L.80}$$
$$= e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n^m\alpha^n}{n!} \tag{L.81}$$

This corresponds to a Poisson distribution for the number of photons in the system.

Übung 3. Eichinvarianz der Stromdichte

Lernziel: In der Physik spielen Symmetrien eine zentrale Rolle. Neben der Klassifikation von Lösungen, können sie zur Vereinfachung von Problemen beitragen. In dieser Aufgabe lernen wir eine (nicht offensichtliche) Symmetrie des Teilchens im elektromagnetischen Feldes kennen, die Eichsymmetrie.

Die Stromdichte $\boldsymbol{j}(x)$ eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld ist definiert durch

$$\boldsymbol{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{q}{mc}\boldsymbol{A}|\psi|^2\,, \tag{14}$$

wobei $\psi(x)$ der Zustand des Teilchens und $\boldsymbol{A}(x,t)$ das Vektorpotential ist.
Zeige, dass sowohl die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\boldsymbol{j}$ als auch die zeitabhängige Schrödingergleichung invariant sind unter der Eichtransformation

$$\psi \to \tilde{\psi} = \psi e^{(iq/\hbar c)\chi}\,, \qquad \boldsymbol{A} \to \tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A} + \nabla\chi\,, \qquad \varphi \to \tilde{\varphi} = \varphi - \frac{1}{c}\partial_t\chi\,, \tag{15}$$

für eine beliebige (differenzierbare) Funktion $\chi(x,t)$.

Lösung Setzt man die Eichtransformation (15) in die Definition der Stromdichte ein, findet man sofort

$$\tilde{\boldsymbol{j}} = -\frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi^*\nabla\psi + |\psi|^2\frac{iq}{\hbar c}\nabla\chi - \psi\nabla\psi^* - |\psi|^2\frac{(-iq)}{\hbar c}\nabla\chi\Big) - \frac{q}{mc}(\boldsymbol{A} + \nabla\chi)|\psi|^2 \tag{L.82}$$
$$= -\frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\Big) - \frac{q}{mc}\boldsymbol{A}|\psi|^2 + \frac{q}{mc}\nabla\chi|\psi|^2 - \frac{q}{mc}\nabla\chi|\psi|^2 \tag{L.83}$$
$$= \boldsymbol{j}. \tag{L.84}$$

Die zeitabängige Schrödingergleichung für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld lautet

$$i\hbar\partial_t\psi = \Big[\frac{1}{2m}(p - \frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2 + q\varphi\Big]\psi\,. \tag{L.85}$$

Die linke Seite von (L.85) transformiert unter der Eichtransformation (15) zu

$$i\hbar\partial_t\tilde{\psi} = \Big[i\hbar(\partial_t\psi) - \frac{q}{c}(\partial_t\chi)\psi\Big]e^{(iq/\hbar c)\chi}\,. \tag{L.86}$$

Unter Verwendung von

$$\begin{aligned}
\big[p - \frac{q}{c}(\nabla\chi)\big]e^{(iq/\hbar c)\chi} &= \big[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}(\nabla\chi)\big]e^{(iq/\hbar c)\chi} && \text{(L.87)}\\
&= e^{(iq/\hbar c)\chi}\big[\frac{q}{c}(\nabla\chi) - \frac{q}{c}(\nabla\chi)\big] && \text{(L.88)}\\
&= 0 && \text{(L.89)}
\end{aligned}$$

und somit

$$\big[p - \frac{q}{c}(\nabla\chi)\big]fe^{(iq/\hbar c)\chi} = e^{(iq/\hbar c)\chi}(pf)\,, \tag{L.90}$$

finden wir für die rechte Seite der zeitabhängigen Schrödingergleichung (L.85)

$$\Big[\frac{1}{2m}(p - \frac{q}{c}\tilde{\boldsymbol{A}})^2 + q\tilde{\varphi}\Big]\tilde{\psi} = \Big\{\Big[\frac{1}{2m}(p - \frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2 + q\varphi - \frac{q}{c}(\partial_t\chi)\Big]\psi\Big\}e^{(iq/\hbar c)\chi}\,. \tag{L.91}$$

Beachte, dass in (L.91) die Ableitungen in $\Big\{\dots\Big\}$ nicht auf $\exp\left((iq/\hbar c)\chi\right)$ wirken.
Wir entnehmen den Gleichungen (L.86) und (L.91), dass $\tilde{\psi}$ die Schrödingergleichung zu $H(\tilde{\varphi}, \tilde{\boldsymbol{A}}, t)$ erfüllt,

$$i\hbar\partial_t\tilde{\psi} = \Big[\frac{1}{2m}(p - \frac{q}{c}\tilde{\boldsymbol{A}})^2 + q\tilde{\varphi}\Big]\tilde{\psi}\,, \tag{L.92}$$

falls ψ eine Lösung der Schrödingergleichung zu $H(\varphi, \boldsymbol{A}, t)$ (L.85) ist.

Übung 4. Freies Elektron im Magnetfeld: Landau Quantisierung

> *Lernziel: Wir lernen in dieser Übung, wie ein Magnetfeld das Spektrum freier Elektronen in Landauniveaus quantisiert. Wir bestimmen wie die Wellenfunktionen in einer bestimmten Eichung aussehen und berechnen die Hall-Leitfähigkeit des Systems.*

Wir betrachten ein Elektron in einem homogenen Magnetfeld B in z-Richtung. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\Big(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\Big)^2\,, \tag{16}$$

wobei $\boldsymbol{A}$ das Vektorpotential ist, m und e die Masse und Ladung des Teilchens und c die Lichtgeschwindigkeit. In Landau-Eichung wählt für das Vektorpotential $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = (0, Bx, 0)$.

(a) Löse die Schrödingergleichung mittels eine Separationsansatzes und zeige, dass sich das Problem auf das eines harmonischen Oszillators zurückführen lässt. Führe zur Vereinfachung die Zyklotronfrequenz $\omega_c = eB/mc$ und die magnetischen Länge $\ell = \sqrt{\hbar c/eB}$ ein. Bestimme zu allen Energieeigenwerten (Landauniveaus) die zugehörigen Wellenfunktionen.

(b) Wir betrachten nun ein endliches System mit Abmessungen L_x und L_y. Bestimme den Entartungsgrad N_n der Landauniveaus. Vergleiche das Ergebnis mit der Anzahl Flussquanten $N_\Phi = \Phi/\Phi_0$ (mit $\Phi_0 = hc/e$) die das System durchfliessen.

(c) *Zusätzlich zum Magnetfeld werde nun noch ein homogenes elektrisches Feld entlang x angelegt. Beschreibe dieses durch das Potential $\phi(x) = -Ex$. Wie ändert sich das Spektrum?*

(d) *Berechne den Ladungsstrom*

$$I_y = -e \int dx\ j_y(x) \tag{17}$$

eines besetzten Eigenzustandes $E_{n,k}$ von $\mathcal{H}$. Vergleiche dein Ergebnis mit dem klassischen Resultat (klassischer Hall-Effekt). Bestimme die Stromdichte $J_n = (I_y/L_x L_y)N_n$ eines gefüllten Landau-Niveaus und zeige, dass gilt $\sigma_{xy}^n = J_n/E = e^2/h$. Dieses Resultat ist unabhängig von n und führt zur bekannten Quantisierung des Hall-Effektes.

Lösung

(a) Zuerst substituieren wir den Ausdruck für das Vektorpotential in den Hamilton Operator und finden

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{eB}{c}x\right)^2\right). \tag{L.93}$$

Bemerke, dass y nicht in H vorkommt und dass p_y deswegen mit H kommutiert. Eigenfunktionen von p_y sind daher auch Eigenfunktionen von H und wir können deswegen annehmen, dass $\psi(x, y) = \chi(x)e^{ik_y y}$. Für $\chi(x)$ erhalten wir noch die folgende Diff. Gleichung

$$H\chi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\left(x + \frac{p_y c}{eB}\right)^2\right)\chi(x) = E\chi(x). \tag{L.94}$$

Dies ist genau der Fall des harmonischen Oszillators mit Frequenz $\omega_c = eB/mc$ (Zyklotronfrequenz) verschoben vom Ursprung um $p_y c/eB = k_y\ell^2$ ($p_y = \hbar k_y$). Das Spektrum ist deswegen jenes des harmonischen Oszillators: $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. Sei $\chi_n(x)$ also eine normalisierte Eigenfunktion des harmonischen Oszillators (die expliziete Form von $\chi_n(x)$ ist nicht wichtig für den Rest dieser Lösung), so ist die totale Lösung

$$\psi_{n,k_y}(x, y) = e^{ik_y y}\chi_n(x + k_y\ell^2). \tag{L.95}$$

Beachte noch, dass die Eigenwerte E_n *nicht* von k_y abhängig sind und daher ist die Entartung genau so gross wie es verschiedene erlaubte k_y-Werte gibt.

(b) Die Frage der Entartung N_n lässt sich einfach beantworten, da wir uns aus a) wissen, dass sie genau der Anzahl erlaubter k_y-Werte entspricht. Für ein System der Länge L_y, sind die zugehörigen k-Werte quantisiert mit $k_y = 2\pi m/L_y$, wobei $m \in \mathbb{Z}$. Da das System aber auch in x-Richtung endlich ist, gilt zudem, dass die Wellenfunktionen zu k_y bei x um $x_0 = -k_y\ell^2$ lokalisiert ist. Mit der Bedingung $-L_x/2 < x_0 < L_x/2$ folgt daraus, $|k_y| \leq L_x/2\ell^2$ und somit sind nur $n_{\max} = N_n = L_x L_y/2\pi\ell^2$ Zustände erlaubt. Der magnetische Fluss durch das System ist $\Phi = L_x L_y B = N_\phi \Phi_0$, mit dem Flussquantum $\Phi_0 = hc/e$. Wir finden dann sofort $N_n = \Phi/\Phi_0 = N_\phi$, d.h. den Entartung des Landauniveaus ist genau so gross wie die Anzahl Flussquanten die das System durchdringen.

(c) In diesem Fall ist der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{eB}{c}x\right)^2\right) + eEx, \tag{L.96}$$

und hängt immer noch nicht von y ab. Für $\chi(x)$ finden wir jetzt die Differentialgleichung

$$H\chi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m}{2}\omega_c^2(x + k_y\ell^2 + \frac{eE}{m\omega_c^2})^2 - p_y\frac{Ec}{B} - \frac{m}{2}\frac{E^2c^2}{B^2}\right)\chi(x) = E\chi(x). \tag{L.97}$$

Dies ist wiederum die Differentialgleichung eines verschobenes harmonischen Oszillators. Allerdings kommt es nun zu einer Aufspaltung der Energieeigenwerte, da E_n von p_y abhängt

$$E_n = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) - p_y\frac{Ec}{B} - \frac{m}{2}\frac{E^2c^2}{B^2}. \tag{L.98}$$

(d) Wir berechnen zuerst den Ausdruck für die Stromdichte aus Gl. (14) auf dem Übungsblatt mit $q = -e$

$$j_y = \frac{1}{L_y}\left(\frac{eB}{mc}x + \frac{\hbar k_y}{m}\right)|\chi(x + k_y\ell^2 + \frac{eE}{m\omega_c^2})|^2, \tag{L.99}$$

wobei wir als Wellenfunktion $\psi_{n,k_y}(x,y) = (1/\sqrt{L_y})e^{ik_yy}\chi_n(x+k_y\ell^2+\frac{eE}{m\omega_c^2})$ benutzt haben, und die Form von χ_n unwichtig ist da sie nicht von y abhängt. Der totale Strom I_y lässt sich dann wie folgt schreiben

$$I_y = -\frac{e\omega_c}{L_y}\int_{-\infty}^{\infty} dx|\chi_n(x + k_y\ell^2 + \frac{eE}{m\omega_c^2})|^2\Big(x + \frac{\hbar k_y}{m\omega_c}\Big) \tag{L.100}$$

$$= -\frac{e\omega_c}{L_y}\int_{-\infty}^{\infty} dx|\chi_n(x + k_y\ell^2 + \frac{eE}{m\omega_c^2})|^2\left(x + k_y\ell^2\right) \tag{L.101}$$

$$= -\frac{e\omega_c}{L_y}\int_{-\infty}^{\infty} dX|\chi_n(X)|^2\Big(X - \frac{eE}{m\omega_c^2}\Big), \tag{L.102}$$

wobei wir im letzten Schritt $X = x + k_y\ell^2 + eE/m\omega_c^2$ substituiert haben. Da $|\chi(X)|^2$ eine symmetrische Funktion ist, ist $|\chi(X)|^2X$ antisymmetrisch und integriert sich zu 0. Der zweite Term ergibt $-eE/m\omega_c^2L_y$ weil $\chi(X)$ normalisiert ist, und finden also $I_y = e^2E/m\omega_cL_y$. Die Driftgeschwindigkeit v der Elektronen lässt sich im klassischen Hall-Effekt ermitteln aus $I_y = \rho v$. Mit der Ladungsdichte $\rho = -e/L_y$ ist $v = -Ec/B = -eE/m\omega_c$ und wir finden das klassische Resultat wieder. Die Strom*dichte* eines gefüllten Landauniveaus lässt sich nun schreiben als

$$J_n = \frac{I_y}{L_x}N_n = \frac{e^2E}{m\omega_cL_xL_y}\frac{L_xL_yB}{2\pi\ell^2} = \frac{e^2EB}{2\pi m\omega_c\ell^2} = \frac{e^2}{h}E, \tag{L.103}$$

so dass $\sigma_{xy}^n = e^2/h$. Damit sehen wir wie die Entartung der Landauniveaus zur Quantisierung der elektrischen Leitfähigkeit führen. Dies ist der bekannte 'Quanten-Hall Effekt'.