2. Beweisen Sie für die Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ die Relation:

$$e^{\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \big[\hat{A}, \hat{B}\big]_{(n)},$$

wobei $\big[\hat{A}, \hat{B}\big]_{(0)} = \hat{B}$, $\big[\hat{A}, \hat{B}\big]_{(1)} = \big[\hat{A}, \hat{B}\big]$, $\big[\hat{A}, \hat{B}\big]_{(2)} = \Big[\hat{A}, \big[\hat{A}, \hat{B}\big]\Big]$, …

Hinweise:
- Ersetzen Sie $\hat{A} \to \hat{A}\,s$ (s-Parameter);
- führen Sie $\hat{B}(s) \equiv e^{s\,\hat{A}}\hat{B}\,e^{-s\,\hat{A}}$ ein;
- entwickeln Sie $\hat{B}(1)$ in eine TAYLORreihe um $s = 0$.
- Untersuchen Sie die Ableitungen von $\hat{B}(s)$ nach s in beliebiger Ordnung.

Wenden Sie die bewiesene Beziehung nun auf die Operatoren $\hat{A} = \varphi_0 \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$ und $\hat{B} = \hat{L}_x$ an.

Hinweis: Für die Drehimpulskomponenten gilt $[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = -\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ikl}\hat{L}_l$.

Betrachte Hilfsfunktion

$$\hat{B}(s) = e^{s\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-s\hat{A}}$$

Falls s in Taylorreihe entwickelbar gilt:

$$\hat{B}(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left.\frac{d^n\hat{B}}{ds^n}\right|_{s=0} s^n$$

Berechne also Ableitungen

$$\hat{B}(s) = [\hat{A}, \hat{B}(s)]_{(0)}$$

$$\frac{d\hat{B}(s)}{ds} = \hat{A}\,e^{s\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-s\hat{A}} + e^{s\hat{A}}\,B\,e^{-s\hat{A}}(-\hat{A})$$

$$= \big[\hat{A}, \hat{B}(s)\big]_{(1)}$$

$$\frac{d^2 \hat{B}(s)}{ds^2} = \left[\hat{A}, \frac{d}{ds}\hat{B}(s)\right] = \left[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}(s)]\right] = [\hat{A}, \hat{B}(s)]_{(2)}$$

$\vdots$

Beh. $\forall n: \quad \frac{d^n B(s)}{ds^n} = [\hat{A}, \hat{B}(s)]_{(n)} \qquad (*)$

Beweis per Induktion über n

IA: $n = 0$: siehe oben

IS: Gelte für bel. n und betrachte

$$\frac{d^{n+1} \hat{B}(s)}{ds^{n+1}} = \frac{d}{ds} \frac{d^n \hat{B}(s)}{ds^{n+1}} \overset{(*)}{=} \frac{d}{ds} [\hat{A}, \hat{B}(s)]_{(n)}$$

$$= \frac{d}{ds} \underbrace{[\hat{A}, [\hat{A}, \ldots,}_{n\text{-mal}} [\hat{A}, \hat{B}(s)] \ldots]]$$

$$\underset{\text{„Linearität"}}{=} \left[\hat{A}, \frac{d}{ds}\hat{B}(s)\right]_{(n)}$$

$$\underset{\substack{\text{siehe}\\\text{oben}}}{=} \left[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}(s)]\right]_{(n)}$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}(s)]_{(n+1)}$$

$\underset{\substack{\text{vollst.}\\\text{Induktion}}}{\Rightarrow}$ Beh.

Damit für $s = 1$:

$$\hat{B}(1) = e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\hat{A}, \hat{B}]_{(n)}$$

Beispiel: $\hat{A} = \varphi_0 \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$, $\hat{B} = \hat{L}_x$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_z, [\hat{L}_z, \hat{L}_x]] = i\hbar [\hat{L}_z, \hat{L}_y] = \hbar^2 \hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x]_{(3)} = \hbar^2 [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar^3 \hat{L}_y$$

$\vdots$

$$\Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{L}_x]_{(2n)} = \hbar^{2n} \hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x]_{(2n+1)} = i\hbar^{2n+1} \hat{L}_y$$

$$\Rightarrow e^{A} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\varphi_0 i}{\hbar}\right)^n [L_z, L_x]_{(n)}$$

$$= \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (-1)^n \left(\frac{\varphi_0}{\hbar}\right)^{2n} \hbar^{2n}}_{= \cos\varphi_0} \hat{L}_x$$

$$+ \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (-1)^n i \left(\frac{\varphi_0}{\hbar}\right)^{2n+1} i\hbar^{2n+1}}_{= -\sin\varphi_0} \hat{L}_y$$

$$= \cos\varphi_0 \hat{L}_x - \sin\varphi_0 \hat{L}_y$$

Rotation um z-Achse um Winkel φ

3. Beweisen Sie den quantenmechanischen Virialsatz, indem Sie:

a) zuerst zeigen, dass in stationären Zuständen (Lösungen der stationären Schrödingergleichung) der Erwartungswert jedes nicht explizit zeitabhängigen (also im Schrödingerbild zeitunabhängigen) Operators *zeitunabhängig* ist.

b) nun ein Teilchen betrachten, das sich im Potential $V(\vec{r})$ befinde. Gewinnen Sie aus der Zeitableitung des Erwartungswertes des Operators

$$\hat{A} = \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{r}}$$

in *stationären* Zuständen einen Zusammenhang zwischen den Erwartungswerten von kinetischer Energie $\langle T \rangle$ und $\langle \hat{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla} V \rangle$ in diesen Zuständen (*Virialsatz*). Was ergibt sich insbesondere, wenn das Potential eine *homogene* Funktion n-ten Grades (diese hat die Eigenschaft $V(\lambda \vec{r}) = \lambda^n V(\vec{r})$) ist? Diskutieren Sie speziell das harmonische Oszillator- und das COULOMBpotential.

a) Lösungen d. stationären SGL

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

haben als Zeitabhängigkeit eine Phase $e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$

→ diese verschwindet in Erwartungswerten mit Operatoren

Für einen bel. Operator $\hat{A}$ gilt

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t \underset{\text{VL}}{\overset{\uparrow}{=}} \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t$$

Ist $\hat{A}$ explizit zeitunabhängig gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \varphi_n | \cancel{e^{i \frac{E_n}{\hbar} t}} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) \cancel{e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}} | \varphi_n \rangle$$

$$\sim \langle \varphi_n | E_n \hat{A} - \hat{A} E_n | \varphi_n \rangle = 0 \;//$$

b) Betrachte stationären Zustand von $\hat{H} = \hat{T}(\hat{\vec{p}}) + V(\hat{\vec{r}})$

Mit a) gilt für $\hat{A} = \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{r}}$

$$0 = \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t$$

Berechne Kommutator

$$[\hat{T}, \hat{A}] = \frac{1}{2m} \left([\hat{p}_i \hat{p}_i, \hat{r}_j \hat{p}_j] + [\hat{p}_i \hat{p}_i, \hat{p}_j \hat{r}_j] \right)$$

$$= \frac{1}{2m} \Big(p_i \underbrace{[\hat{p}_i, \hat{r}_j]}_{= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}} \hat{p}_j + [\hat{p}_i, \hat{r}_j] \hat{p}_i \hat{p}_j$$

$$+ \hat{p}_i \hat{p}_j [\hat{p}_i, \hat{r}_j] + \hat{p}_j [\hat{p}_i, \hat{r}_j] \hat{p}_i \Big)$$

$$= 4 \frac{\hbar}{i} \frac{p_i p_i}{2m}$$

$$= 4 \frac{\hbar}{i} \hat{T}$$

$$[\hat{V}, \hat{A}] = [V(\hat{\vec{r}}), \hat{r}_i \hat{p}_i] + [V(\hat{\vec{r}}), \hat{p}_i \hat{r}_i]$$

$$\overset{[V(\hat{\vec{r}}), \hat{r}_i] = 0}{=} \hat{r}_i [V(\hat{\vec{r}}), \hat{p}_i] + [V(\hat{\vec{r}}), \hat{p}_i] \hat{r}_i$$

Mit

$$[V(\vec{r}), \hat{p}_i] = \frac{\partial V}{\partial r_k}[\hat{r}_k, \hat{p}_i]$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial r_k}\delta_{ki} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial r_i}$$

$$\Rightarrow [\hat{V}, \hat{A}] = -2\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial r_i}\cdot r_i = -2\frac{\hbar}{i}\hat{\vec{r}}\cdot\frac{\partial \hat{V}}{\partial \vec{r}}$$

$$\Rightarrow 0 \overset{!}{=} \langle[\hat{T}+\hat{V}, \hat{A}]\rangle = 2\frac{\hbar}{i}\left(2\langle T\rangle - \left\langle\hat{\vec{r}}\cdot\frac{\partial \hat{V}}{\partial \vec{r}}\right\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{2\langle T\rangle = \left\langle\hat{\vec{r}}\cdot\frac{\partial V}{\partial \vec{r}}\right\rangle}$$ Virialsatz