

Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2009

Grundlagen der Quantenmechanik (Lösungen)

1 Skalarprodukt und Matrixdarstellung (*)

In einem dreidimensionalen Hilbertraum sind folgende Vektorzustände gegeben:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle \\ |\beta\rangle &= i|1\rangle + 2|3\rangle \end{aligned}$$

Hierbei sind $|1\rangle$, $|2\rangle$ und $|3\rangle$ die orthonormierten Basiszustände.

1. Berechnen Sie die Skalarprodukte $\langle\alpha|\beta\rangle$ und $\langle\beta|\alpha\rangle$ explizit und zeigen Sie, dass $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$.
2. Finden Sie alle Matrixelemente von $\hat{A} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ und geben Sie die Matrixdarstellung von \hat{A} an.
3. Ist der Operator \hat{A} hermitesch? Begründung?

LÖSUNG:

1. Zu beachten ist die komplexe Konjugation für das erste Argument.

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= -ii\langle 1|1\rangle - 2i\langle 1|3\rangle - 2i\langle 1|2\rangle - 4\langle 2|3\rangle + ii\langle 3|1\rangle + 2i\langle 3|3\rangle \\ &= 1 + 2i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle\beta|\alpha\rangle &= -ii\langle 1|1\rangle + 2i\langle 1|2\rangle + ii\langle 1|3\rangle + 2i\langle 3|1\rangle - 4\langle 3|2\rangle - 2i\langle 3|3\rangle \\ &= 1 - 2i \end{aligned}$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle^* = (1 + 2i)^* = 1 - 2i = \langle\beta|\alpha\rangle$$

2. Durch Anwendung von \hat{A} auf die Basiszustände folgt:

$$\hat{A}|1\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|1\rangle = -i|\alpha\rangle = |1\rangle + 2i|2\rangle - |3\rangle$$

$$\hat{A}|2\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|2\rangle = 0$$

$$\hat{A}|3\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|3\rangle = 2|\alpha\rangle = 2i|1\rangle - 4|2\rangle - 2i|3\rangle$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -2i & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2i & -4 & 2i \end{pmatrix}$$

3. $\hat{A} \neq \hat{A}^\dagger \Rightarrow \hat{A}$ ist nicht hermitesch

2 Matrixdarstellung und Eigenwerte (*)

Der Hamilton-Operator eines Zwei-Niveau-Systems lautet:

$$\mathcal{H} = \epsilon (|1\rangle \langle 1| - |2\rangle \langle 2| + |1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|)$$

Hierbei sind $|1\rangle$ und $|2\rangle$ die orthonormierten Basiszustände. Der Parameter ϵ hat Energieeinheiten.

1. Wie lautet die Matrixdarstellung des Operators \mathcal{H} in dieser Basis.
2. Finden Sie die Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenzustände des Operators \mathcal{H} .

LÖSUNG:

1. Durch Anwendung von \mathcal{H} auf die Basiszustände folgt:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}|1\rangle &= \epsilon [|1\rangle \langle 1|1\rangle - |2\rangle \langle 2|1\rangle + |1\rangle \langle 2|1\rangle + |2\rangle \langle 1|1\rangle] \\ &= \epsilon [|1\rangle + |2\rangle]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}|2\rangle &= \epsilon [|1\rangle \langle 1|2\rangle - |2\rangle \langle 2|2\rangle + |1\rangle \langle 2|2\rangle + |2\rangle \langle 1|2\rangle] \\ &= \epsilon [|1\rangle - |2\rangle]\end{aligned}$$

$$\mathcal{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

2. Zum Finden der Eigenwerte gilt es das Eigenwertproblem $(\mathcal{H} - \lambda \mathbb{1}) \mathbf{v} = 0$ zu lösen:

$$\det(\mathcal{H} - \lambda \mathbb{1}) = 0$$

$$\begin{aligned}-(\epsilon - \lambda)(\epsilon + \lambda) - \epsilon^2 &= 0 \\ \lambda^2 &= 2\epsilon^2 \\ \lambda_{1/2} &= \pm\sqrt{2}\epsilon\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der Eigenwerte in das Eigenwertproblem lassen sich folgende Eigenvektoren finden:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_1 &= \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon}{-\sqrt{2}\epsilon + \epsilon} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{v}_2 &= \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon}{\sqrt{2}\epsilon + \epsilon} \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

3 Normierung (*)

Ein Elektron befindet sich im Spinzustand $\chi = A \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix}$

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante A.

LÖSUNG:

1. A ist so zu finden, dass $|\chi| = 1$ gilt.

$$\sqrt{(-3Ai \quad 4A) \cdot \begin{pmatrix} 3Ai \\ 4A \end{pmatrix}} = \sqrt{9A^2 + 16A^2} = \sqrt{25A^2} = 5A \stackrel{!}{=} 1$$

$$A = \frac{1}{5}$$

4 Kommutatoren (*)

Gegeben seien zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} , wobei gilt:

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

Zeigen Sie, dass für $n = 1, 2, 3, \dots$ gilt:

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}]$$

LÖSUNG:

Beweis per Induktion:

1. $n = 1$:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^1, \hat{B}] &= [\hat{A}, \hat{B}] \\ 1 \cdot \hat{A}^{1-1} [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}^0 [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned}$$

2. $n \rightarrow n + 1$:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^{n+1}, \hat{B}] &= [\hat{A}\hat{A}^n, \hat{B}] \\ &= \hat{A} \underbrace{[\hat{A}^n, \hat{B}]}_{n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]} + \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\hat{A}^n[\hat{A}, \hat{B}]} \hat{A}^n \\ &= n\hat{A}^n [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{A}^n [\hat{A}, \hat{B}] \\ &= (n+1)\hat{A}^n [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned}$$

Aussage gilt für $n + 1 \Rightarrow$ Aussage gilt auch für $n = 1, 2, 3, \dots$

5 Hermitesche Operatoren (**)

1. Gegeben seien die hermiteschen Operatoren \hat{A} und \hat{B} . Zeigen Sie, dass

- der Operator $\hat{A}\hat{B}$ hermitesch ist, nur wenn $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ gilt.
- $(\hat{A} + \hat{B})^n$ hermitesch ist.

2. Beweisen Sie, dass für jeden Operator \hat{A} folgende Operatoren hermitesch sind:

(a) $(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$

(b) $i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$

(c) $(\hat{A}\hat{A}^\dagger)$

3. Zeigen Sie, dass der Eigenwert eines hermiteschen Operators reell ist und dass die Eigenfunktionen orthogonal sind.

4. In der klassischen Hamiltonfunktion sind die Terme $p f(x)$ und $f(x) p$ äquivalent. Die Ersetzungsregel $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ für den Übergang zum Hamiltonoperator führt aber zu verschiedenen Operatoren. In dem Ansatz

$$p f(x) \rightarrow \alpha \hat{p} f(x) + (1 - \alpha) f(x) \hat{p}$$

ist die Reihenfolge offen gelassen.

Wie ist der reelle Koeffizient α zu wählen, damit der resultierende Operator hermitesch ist?

LÖSUNG:

1. Laut Voraussetzung gilt: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ und $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$

(a) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$

$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$ genau dann, wenn $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

(b)

$$\begin{aligned} [(\hat{A} + \hat{B})^n]^\dagger &= (\hat{A} + \hat{B})^\dagger (\hat{A} + \hat{B})^\dagger \cdots (\hat{A} + \hat{B})^\dagger \\ &= (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger) (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger) \cdots (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger) \\ &= (\hat{A} + \hat{B})^n \end{aligned}$$

2. (a) $(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}^\dagger + (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{A} = \hat{A} + \hat{A}^\dagger$

(b) $[i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)]^\dagger = -i[\hat{A}^\dagger - (\hat{A}^\dagger)^\dagger] = i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$

(c) $(\hat{A}\hat{A}^\dagger)^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{A}\hat{A}^\dagger$

3. Gegeben sei der hermitesche Operator \hat{A} sowie die o.B.d.A. normierten Zustände $|m\rangle$ und $|n\rangle$.

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{A}|n\rangle &= \langle m|\hat{A}n\rangle \\ &= \langle m|a_n n\rangle \\ &= a_n \langle m|n\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{A}|n\rangle &= \langle \hat{A}^\dagger m|n\rangle \\ &= \langle \hat{A}m|n\rangle \\ &= \langle a_m m|n\rangle \\ &= a_m^* \langle m|n\rangle \end{aligned}$$

Nun bildet man die Differenz: $0 = (a_n - a_m^*) \langle m|n\rangle$

Fallunterscheidung:

(a) $n = m$

$$\begin{aligned} 0 &= (a_n - a_n^*) \langle m|n \rangle \\ 0 &= (a_n - a_n^*) \underbrace{\langle n|n \rangle}_{=1} \\ 0 &= (a_n - a_n^*) \\ a_n &= a_n^* \end{aligned}$$

$\Rightarrow a_n$ ist reell

(b) $n \neq m$

$$\begin{aligned} 0 &= (a_n - a_m^*) \langle m|n \rangle \\ \text{Die Eigenwerte seien nicht entartet} \\ 0 &= \underbrace{(a_n - a_m^*)}_{\neq 0} \langle m|n \rangle \\ 0 &= \langle m|n \rangle \end{aligned}$$

\Rightarrow Die Eigenfunktionen sind orthogonal.

4. Setzt man $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ in den Ansatz ein, so folgt:

$$p f(x) \rightarrow -i\hbar \left[\alpha \frac{d}{dx} f(x) + (1 - \alpha) f(x) \frac{d}{dx} \right] = -i\hbar \left[\alpha f'(x) + f(x) \frac{d}{dx} \right]$$

Die Forderung für die Hermitezität lautet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \left(-i\hbar \left[\alpha f'(x) + f(x) \frac{d}{dx} \right] \psi(x) \right) \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-i\hbar \left[\alpha f'(x) + f(x) \frac{d}{dx} \right] \phi(x) \right)^* \psi(x)$$

Hierbei wird verwendet, dass $f(x)$ als Teil einer klassischen Hamiltonfunktion reell ist. Die Bedingung kann umgeformt werden zu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx [2\alpha f'(x) \phi^*(x) \psi(x) + f(x) (\phi^*(x) \psi(x))'] \stackrel{!}{=} 0$$

Diese Gleichung kann partiell integriert werden, wobei die Randterme im Unendlichen verschwinden:

$$(2\alpha - 1) \int_{-\infty}^{\infty} dx f'(x) \phi^*(x) \psi(x) \stackrel{!}{=} 0$$

Wir schließen den Fall $f'(x) = 0$ aus, da $f(x)$ dann eine Konstante wäre und sich somit die Frage der Reihenfolge nicht stellen würde. Da $\phi(x)$ und $\psi(x)$ beliebige quadratintegrale Funktionen sind, muss $\alpha = \frac{1}{2}$ sein.

Die Ersetzungsregel lautet dann:

$$p f(x) \rightarrow \frac{1}{2} [\hat{p} f(x) + f(x) \hat{p}]$$

$\frac{1}{2} [\hat{p} f(x) + f(x) \hat{p}]$ ist hierbei hermitesch

6 Matrix-Exponentielle (***)

Die Matrix-Exponentielle ist für einen Operator \hat{A} definiert als: $e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$

Sie hat folgende Eigenschaften:

- $e^{-\hat{A}}e^{\hat{A}} = e^{\hat{A}}e^{-\hat{A}} = \hat{1}$
- $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ für $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

1. Zeigen Sie für den hermiteschen Operator \hat{H} , dass der adjungierte Operator von $e^{i\hat{H}}$ der Operator $e^{-i\hat{H}}$ ist.
2. Zeigen Sie, dass $\hat{U} = e^{i\hat{H}}$ für einen hermiteschen Operator \hat{H} unitär ist.
3. Nehmen Sie für zwei nicht-kommutierende Operatoren \hat{A} und \hat{B} die Funktion

$$f(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} \quad (\lambda \in \mathbb{R})$$

an.

Benutzen Sie diese Funktion, um die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

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

zu zeigen.

$$\text{Hierbei sind: } [\hat{A}, \hat{B}]^{(1)} = [\hat{A}, \hat{B}] \quad \text{und} \quad [\hat{A}, \hat{B}]^{(n)} = [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]^{(n-1)}]$$

Hinweis: Verwenden Sie die Taylor-Entwicklung von $f(\lambda)$.

LÖSUNG:

$$1. \left(e^{i\hat{H}}\right)^\dagger = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hat{H})^n}{n!}\right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H}^\dagger)^n}{n!} = e^{-i\hat{H}}$$

$$2. \hat{U} \text{ ist unitär} \Leftrightarrow \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$$

$$\hat{U} = e^{i\hat{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hat{H})^n}{n!}$$

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H}^\dagger)^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H})^n}{n!} \\ &= e^{-i\hat{H}} \end{aligned}$$

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = e^{-i\hat{H}}e^{i\hat{H}} = \hat{1} \Rightarrow \hat{U} \text{ ist unitär}$$

3. Die Taylorentwicklung von $f(\lambda)$ um $\lambda = 0$ ist gegeben durch:

$$f(\lambda) = f(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda^n$$

$$f(0) = e^0 \widehat{B} e^0 = \widehat{B}$$

$$f^{(1)}(\lambda) = e^{\lambda \widehat{A}} \widehat{A} \widehat{B} e^{-\lambda \widehat{A}} - e^{\lambda \widehat{A}} \widehat{B} \widehat{A} e^{-\lambda \widehat{A}} = e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, \widehat{B}] e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$f^{(1)}(0) = [\widehat{A}, \widehat{B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(1)}$$

$$f^{(2)}(\lambda) = e^{\lambda \widehat{A}} \widehat{A} [\widehat{A}, \widehat{B}] e^{-\lambda \widehat{A}} - e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, \widehat{B}] \widehat{A} e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$= e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]] e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$= e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(2)} e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$f^{(2)}(0) = [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(2)}$$

Allgemein gilt für $[\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)}$:

$$f^{(n+1)}(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} f^{(n)}(\lambda)$$

$$= e^{\lambda \widehat{A}} \widehat{A} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)} e^{-\lambda \widehat{A}} - e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)} \widehat{A} e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$= e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)}] e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$= e^{\lambda \widehat{A}} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n+1)} e^{-\lambda \widehat{A}}$$

$$f^{(n)}(0) = [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)}$$

$$\Rightarrow f(\lambda) = \widehat{B} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)}}{n!} \lambda^n$$

$$[\widehat{A}, \widehat{B}]^{(0)} = \widehat{B} \text{ wegen } [\widehat{A}, \widehat{B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(1)} = [\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(0)}]$$

$$\text{Für } \lambda = 1 \text{ folgt: } e^{\widehat{A}} \widehat{B} e^{-\widehat{A}} = \widehat{B} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\widehat{A}, \widehat{B}]^{(n)}$$

7 Cauchy-Schwarzsche Ungleichung und verallgemeinerte Unschärferelation (**)

1. Beweisen Sie die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung $\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \psi | \phi \rangle|^2$

Hinweis: Betrachten Sie die Ungleichung $\langle \psi + \lambda\phi | \psi + \lambda\phi \rangle \geq 0$ und finden Sie den Wert von λ , der die linke Seite minimiert.

Beachten Sie, dass λ und λ^* unabhängig voneinander variiert werden können.

2. Beweisen Sie, dass für zwei hermitesche Operatoren \hat{A} und \hat{B} die verallgemeinerte Unschärferelation

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

gilt.

Hierbei ist: $(\Delta\hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ und $(\Delta\hat{B})^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2$

Hinweis: Betrachten Sie die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung mit:

$$|\phi\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\xi\rangle$$

$$|\psi\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\xi\rangle$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \xi | \hat{A} | \xi \rangle$$

$$\langle \hat{B} \rangle = \langle \xi | \hat{B} | \xi \rangle$$

3. Rechnen Sie nach, dass man für $\hat{A} = \hat{x} = x$ und $\hat{B} = \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ die Unschärferelation

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{1}{2}\hbar$$

erhält.

4. Die Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ lässt sich auch aus der Ungleichung

$$\int dx |\gamma(x - \langle x \rangle) - i(\hat{p} - \langle p \rangle)|^2 |\psi(x)|^2 \geq 0$$

mit $\gamma \in \mathbb{R}$ folgern.

Zeigen Sie, dass das Gleichheitszeichen nur für Gaußfunktionen gilt.

LÖSUNG:

1. $0 \leq \langle \psi + \lambda\phi | \psi + \lambda\phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \lambda^* \langle \phi | \psi \rangle + \lambda \langle \psi | \phi \rangle + \lambda\lambda^* \langle \phi | \phi \rangle = g(\lambda, \lambda^*)$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda^*} g(\lambda, \lambda^*) = \langle \phi | \psi \rangle + \lambda \langle \phi | \phi \rangle = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} g(\lambda, \lambda^*) = \langle \psi | \phi \rangle + \lambda^* \langle \phi | \phi \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_{min} = -\frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

$$\Rightarrow \lambda_{min}^* = -\frac{\langle \psi | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

$$0 \leq g(\lambda_{min}, \lambda_{min}^*) = \langle \psi | \psi \rangle - \frac{|\langle \phi | \psi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

$$\Rightarrow \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \geq |\langle \phi | \psi \rangle|^2$$

2. Unter Verwendung der in der Aufgabenstellung gegebenen Definitionen folgt:

$$\begin{aligned}\langle \phi | \phi \rangle &= \langle \xi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \xi \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = (\Delta \hat{A})^2 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \xi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 | \xi \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2 = (\Delta \hat{B})^2 \\ \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \xi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \xi \rangle = \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \\ \langle \psi | \phi \rangle &= \langle \xi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) | \xi \rangle = \langle \hat{B} \hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle\end{aligned}$$

Eingesetzt in die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung folgt:

$$\begin{aligned}(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 &\geq |\langle \phi | \psi \rangle|^2 = [\Re(\langle \phi | \psi \rangle)]^2 + [\Im(\langle \phi | \psi \rangle)]^2 \geq [\Im(\langle \phi | \psi \rangle)]^2 = \left(\frac{1}{2} |\langle \phi | \psi \rangle - \langle \psi | \phi \rangle|\right)^2 \\ &= \left(\frac{1}{2} |\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle|\right)^2 \\ &= \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 \\ \Rightarrow \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} &\geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|\end{aligned}$$

3. Der Kommutator berechnet sich wie folgt:

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}] \psi &= \left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi \\ &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\psi x) \\ &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\hbar}{i} \psi - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \\ &= \hbar i \psi \\ [\hat{x}, \hat{p}] &= \hbar i\end{aligned}$$

Der Erwartungswert des Kommutators ist: $\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = \langle \hbar i \rangle = \hbar i$

$$\Rightarrow \Delta \hat{x} \Delta \hat{p} \geq \frac{1}{2} |\hbar i| = \frac{\hbar}{2}$$

4. Wegen der Betragsstriche kann das Gleichheitszeichen in der Angabe nur dann gelten, wenn der Integrand identisch 0 ist:

$$[\gamma(x - \langle x \rangle) - i(\hat{p} - \langle p \rangle)] \psi(x) = 0$$

Setzt man die Definition des Impulsoperators $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ ein, ergibt sich eine Differentialgleichung erster Ordnung:

$$\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = [\gamma(x - \langle x \rangle) + i\langle p \rangle] \psi(x)$$

Diese Gleichung kann leicht integriert werden:

$$\psi(x) = C \cdot \exp \left[\frac{\gamma}{2\hbar} (x - \langle x \rangle)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x \right]$$

Damit die Wellenfunktion normierbar ist, muss $\gamma < 0$ gelten.

Die Normierung ergibt $C = \sqrt[4]{\frac{|\gamma|}{\pi\hbar}}$

Für $\gamma < 0$ ist $\psi(x)$ eine Gaußfunktion, das Gleichheitszeichen in der Unschärferelation gilt folglich genau für Gaußfunktionen.

8 Projektor-Algebra (***)

Es sei \mathcal{E}_a ein Teilraum des Hilbertraums, \mathcal{E}_a^\times der dazu komplementäre Raum. Jeder Ket-Vektor $|u\rangle$ besitzt eine Projektion in \mathcal{E}_a und eine in \mathcal{E}_a^\times , sodass

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_a^\times\rangle$$

Man definiert als Projektionsoperator einen linearen Operator mit der Eigenschaft:

$$P_a |u\rangle = |u_a\rangle$$

1. Zeigen Sie, dass der Projektor P_a hermitesch ist.
2. Beweisen Sie folgende Operatorgleichung:

$$P_a^2 = P_a$$

3. Betrachten Sie eine Folge von orthonormierten Vektoren $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (m, n = 1, 2, \dots, N)$$

Diese Vektoren spannen einen bestimmten (N-dimensionalen) Unterraum \mathcal{E}_N des Vektorraums auf, zu dem sie gehören.

Zeigen Sie, dass

$$P_N = \sum_{m=1}^N |m\rangle \langle m|$$

der Projektionsoperator auf \mathcal{E}_N ist.

4. Eine Observable A besitze endliche viele verschiedene Eigenwerte a_1, a_2, \dots, a_N . Man setze

$$f(A) = (A - a_1)(A - a_2) \cdots (A - a_N) = (A - a_n) g_n(A)$$

$$\text{mit: } g_n(A) = \prod_{m \neq n} (A - a_m)$$

Zeigen Sie, dass

- (a) $f(A) = 0$ gilt.
- (b) der Projektor P_n auf dem Unterraum zum n -ten Eigenwert durch den Ausdruck

$$P_n = \frac{g_n(A)}{g_n(a_n)}$$

gegeben ist.

5. Betrachten Sie den Fall, dass A jeweils n_α Eigenvektoren zum Eigenwert a_α habe (n_α -fache Entwertung).

$P_\alpha = \sum_{i=1}^{n_\alpha} |\alpha, i\rangle \langle \alpha, i|$ sei der Projektor auf den Unterraum \mathcal{E}_α , den die $|\alpha, i\rangle$ aufspannen.

Zeigen Sie, dass

$$\sum_{\alpha} P_\alpha = 1$$

gilt.

LÖSUNG:

1. Für ein beliebiges $|v\rangle$ gilt:

$$\langle u|P_a|v\rangle = \langle u|v_a\rangle = \langle u_a|v_a\rangle = \langle u_a|v\rangle$$

$$\Rightarrow \langle u|P_a = \langle u_a|$$

$\Rightarrow P_a$ ist hermitesch.

2. Für ein beliebiges $|u\rangle$ gilt:

$$P_a^2|u\rangle = P_a(P_a|u\rangle) = P_a|u_a\rangle = |u_a\rangle = P_a|u\rangle$$

$$\Rightarrow P_a^2 = P_a$$

Umgekehrt ist jeder hermitesche Operator \hat{P} , der die Gleichung $\hat{P}^2 = \hat{P}$ erfüllt, ein Projektor.

3. Für ein beliebiges $|u\rangle$ gilt:

$$|u\rangle = \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n|u\rangle + \sum_{Rest} |a\rangle \langle a|u\rangle = |u_N\rangle + |u_N^\times\rangle, \quad \langle a|m\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} P_N|u\rangle &= \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N |m\rangle \langle m|n\rangle \langle n|u\rangle + \sum_{m=1}^N \sum_{Rest} |m\rangle \langle m|a\rangle \langle a|u\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n|u\rangle + 0 \\ &= |u_N\rangle \end{aligned}$$

$$P_N^2 = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N |m\rangle \langle m|n\rangle \langle n| = \sum_{m=1}^N |m\rangle \langle m| = P_N$$

4. Der hermitesche Operator A ist eine Observable, falls die Eigenvektoren von A den gesamten Raum \mathcal{E} aufspannen. Eigenvektoren einer Observablen bilden ein vollständiges System.

Für einen beliebigen Eigenvektor $|n\rangle$ gilt:

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

(a) Wendet man $f(A)$ auf einen Zustand $|n\rangle$ an, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} f(A)|n\rangle &= g_n(A)(A - A_n)|n\rangle \\ &= g_n(A)(a_n - a_n)|n\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow f(A) = 0$$

(b)

$$P_n|m\rangle = \frac{1}{g_n(a_n)} g_n(A)|m\rangle = \delta_{nm}|m\rangle$$

$$\Rightarrow P_n|n\rangle = |n\rangle$$

$$\Rightarrow P_n|m\rangle = 0 \text{ (falls } m \neq n\text{)}$$

5. Bitte beachten: Da n_α die Entartung abzählt, steht der Index α statt n für die Nummerierung der verschiedenen Eigenwerte a_α .

$$P_\alpha = \sum_{i=1}^{n_\alpha} |\alpha, i\rangle \langle \alpha, i|$$

$$\sum_{\alpha=1}^N P_\alpha |u\rangle = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i=1}^{n_\alpha} |\alpha, i\rangle \langle \alpha, i|u\rangle = |u\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha=1}^N P_\alpha = \mathbb{1}$$

Die Folgerung und das letzte Gleichheitszeichen folgen aus der Vollständigkeit des Eigenvektorraums und aus der Wahl eines beliebigen Vektors $|u\rangle$.

9 Hellmann-Feynman-Theorem (*)

1. Beweisen Sie das Hellmann-Feynman-Theorem:

$$\langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial}{\partial \lambda} E(\lambda)$$

Hierbei ist:

$$\mathcal{H}(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$$

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1$$

2. Im Falle des harmonischen Oszillators ist $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ und $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

Berechnen Sie mit Hilfe des Hellmann-Feynman-Theorems das Verhältnis zwischen den Erwartungswerten der kinetischen und der potentiellen Energie.

Betrachten Sie einmal m und einmal ω als Parameter.

LÖSUNG:

1. Durch Ableitung der Energie folgt:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | \mathcal{H}(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \\
 &= \left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \mathcal{H}(\lambda) | \psi(\lambda) \right\rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \mathcal{H}(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \rangle \\
 &= E(\lambda) \left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \right\rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + E(\lambda) \left\langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \\
 &= E(\lambda) \left[\left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \right\rangle + \left\langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \right] + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \\
 &= E(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} \underbrace{\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle}_{=1} + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \\
 &= \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle
 \end{aligned}$$

2. m als Parameter:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{\partial}{\partial m} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right\rangle_n &= \left\langle -\frac{p^2}{2m^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2} \right\rangle_n \\
 &= -\frac{1}{m} \langle T \rangle_n + \frac{1}{m} \langle V \rangle_n \\
 &= \frac{\partial}{\partial m} E_n = 0
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n$$

ω als Parameter:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right\rangle_n &= \langle m\omega x^2 \rangle_n \\
 &= \frac{2}{\omega} \langle V \rangle_n \\
 &= \frac{\partial}{\partial \omega} E_n \\
 &= \frac{\partial}{\partial \omega} \left[\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \\
 &= \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \frac{1}{\omega} E_n
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow 2 \langle V \rangle_n = E_n = \langle T \rangle_n + \langle V \rangle_n$$

$$\Rightarrow \langle V \rangle_n = \langle T \rangle_n$$

10 Dichte-Operatoren (**)

1. Zeigen Sie, dass für einen reinen Zustand mit dem Dichte-Operator $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ der Erwartungswert einer Observable \hat{A} gegeben ist durch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

2. Zeigen Sie, dass die Gleichung

$$\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$$

für einen beliebigen Dichte-Operator $\hat{\varrho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$ dann und nur dann gilt, wenn $\hat{\varrho}$ einen reinen Zustand beschreibt.

3. Leiten Sie ausgehend von der Schrödinger-Gleichung die von Neumann Gleichung her, welche die Zeitentwicklung eines Dichte-Operators beschreibt:

$$\frac{d\hat{\varrho}}{dt} = \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\varrho}, \mathcal{H}]$$

Hierbei ist: $\frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} = \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$

4. Nehmen Sie an, dass der Dichte-Operator $\hat{\varrho}$ die Form

$$\hat{\varrho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \quad (\dot{p}_{\alpha} = 0 \text{ für alle } \alpha)$$

hat.

Zeigen Sie, dass in diesem Fall die Zeitentwicklung der Erwartungswerte

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\varrho} \hat{A})$$

gegeben ist durch:

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle$$

LÖSUNG:

$$1. \langle \hat{A} \rangle = \sum_k p_k \langle \Psi_k | \hat{A} | \Psi_k \rangle = \text{Tr}(\hat{\varrho} \hat{A})$$

$$\begin{aligned} \hat{\varrho} &= |\Psi\rangle \langle \Psi| \\ \Rightarrow \text{Tr}(\hat{\varrho} \hat{A}) &= \sum_{k'} \langle \Psi_{k'} | \hat{\varrho} \hat{A} | \Psi_{k'} \rangle \\ &= \sum_{k'} \langle \Psi_{k'} | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{A} | \Psi_{k'} \rangle \\ &= \sum_{k'} \delta_{\Psi, \Psi_{k'}} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi_{k'} \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

$$2. \hat{\varrho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$$

$$\hat{\varrho} = \sum_{\alpha, \alpha'} p_{\alpha} p_{\alpha'} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha'} \rangle \langle \Psi_{\alpha'}| = \sum_{\alpha, \alpha'} p_{\alpha} p_{\alpha'} |\Psi_{\alpha}\rangle \delta_{\alpha, \alpha'} \langle \Psi_{\alpha'}| = \sum_{\alpha} p_{\alpha}^2 |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$$

Bedingung für Gleichheit: $p_{\alpha}^2 = p_{\alpha}$ oder $p_{\alpha} = 1$

Nur ein Zustand mit Wahrscheinlichkeit 1, der Rest ist 0

$\Rightarrow \hat{\varrho}$ beschreibt reinen Zustand

3. Der Dichte-Operator habe die Form $\hat{\varrho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}|$

Die zeitliche Ableitung des Dichte-Operators ist dann gegeben durch:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\varrho} &= \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| + \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\dot{\Psi}_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| + \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \dot{\Psi}_{\alpha}| \\ &= \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\dot{\Psi}_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| + \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \dot{\Psi}_{\alpha}| \end{aligned}$$

Die Schrödinger-Gleichung hat die Form:

$$\begin{aligned} i\hbar |\dot{\psi}_{\alpha}\rangle &= \mathcal{H} |\psi_{\alpha}\rangle \Rightarrow |\dot{\psi}_{\alpha}\rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} |\psi_{\alpha}\rangle \\ -i\hbar \langle \dot{\psi}_{\alpha}| &= \langle \psi_{\alpha}| \mathcal{H} \Rightarrow \langle \dot{\psi}_{\alpha}| = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\alpha}| \mathcal{H} \end{aligned}$$

Eingesetzt in die zeitliche Ableitung folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\varrho} &= \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| - \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \mathcal{H} \\ &= \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \mathcal{H} - \mathcal{H} \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \right) \\ &= \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{\varrho} \mathcal{H} - \mathcal{H} \hat{\varrho}) \\ \frac{d}{dt} \hat{\varrho} &= \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\varrho}, \mathcal{H}] \end{aligned}$$

4.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{d}{dt} \text{Tr} (\hat{\varrho} \hat{A}) \\ &= \frac{d}{dt} \sum_{\alpha, \alpha'} p_{\alpha} \underbrace{\langle \psi_{\alpha'} | \psi_{\alpha} \rangle}_{\delta_{\alpha, \alpha'}} \langle \psi_{\alpha} | \hat{A} | \psi_{\alpha'} \rangle \\ &= \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \hat{A} | \psi_{\alpha} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \dot{\psi}_{\alpha} | \hat{A} | \psi_{\alpha} \rangle + \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \hat{A} | \dot{\psi}_{\alpha} \rangle + \underbrace{\sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \frac{d\hat{A}}{dt} | \psi_{\alpha} \rangle}_{\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \rangle} \\ &= -\sum_{\alpha} p_{\alpha} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\alpha} | \mathcal{H} \hat{A} | \psi_{\alpha} \rangle + \sum_{\alpha} p_{\alpha} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\alpha} | \hat{A} \mathcal{H} | \psi_{\alpha} \rangle + \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\alpha} | (\hat{A} \mathcal{H} - \mathcal{H} \hat{A}) | \psi_{\alpha} \rangle + \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\alpha} | [\hat{A}, \mathcal{H}] | \psi_{\alpha} \rangle + \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \end{aligned}$$