Christoph Schnarr Blatt 1

# Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2009

Grundlagen der Quantenmechanik

## 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 $\widehat{A} = |\alpha\rangle\,\langle\beta|$ und geben Sie die Matrixdarstellung von $\widehat{A}$ an.
3. Ist der Operator $\widehat{A}$ hermitesch? Begründung?

## 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 $\epsilon$ 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 $\mathcal{H}$.

## 3 Normierung (*)

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

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante A.

# 4 Kommutatoren (*)

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

$$\left[\widehat{A}, \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]\right] = \left[\widehat{B}, \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]\right] = 0$$

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

$$\left[\widehat{A}^n, \widehat{B}\right] = n\widehat{A}^{n-1}\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]$$

# 5 Hermitesche Operatoren (**)

1. Gegeben seien die hermiteschen Operatoren $\widehat{A}$ und $\widehat{B}$. Zeigen Sie, dass
   (a) der Operator $\widehat{A}\widehat{B}$ hermitesch ist, nur wenn $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$ gilt.
   (b) $\left(\widehat{A} + \widehat{B}\right)^n$ hermitesch ist.
2. Beweisen Sie, dass für jeden Operator $\widehat{A}$ folgende Operatoren hermitesch sind:
   (a) $\left(\widehat{A} + \widehat{A}^\dagger\right)$
   (b) $i\left(\widehat{A} - \widehat{A}^\dagger\right)$
   (c) $\left(\widehat{A}\widehat{A}^\dagger\right)$
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 $p \rightarrow \widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ für den Übergang zum Hamiltonoperator führt aber zu verschiedenen Operatoren. In dem Ansatz

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

   ist die Reihenfolge offen gelassen.

   Wie ist der reelle Koeffizient $\alpha$ zu wählen, damit der resultierende Operator hermitesch ist?

# 6 Matrix-Exponentielle (***)

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

Sie hat folgende Eigenschaften:

- $e^{-\widehat{A}}e^{\widehat{A}} = e^{\widehat{A}}e^{-\widehat{A}} = \widehat{1}$
- $e^{\widehat{A}+\widehat{B}} = e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}} \quad$ für $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = 0$

1. Zeigen Sie für den hermiteschen Operator $\widehat{H}$, dass der adjungierte Operator von $e^{i\widehat{H}}$ der Operator $e^{-i\widehat{H}}$ ist.
2. Zeigen Sie, dass $\widehat{U} = e^{i\widehat{H}}$ für einen hermiteschen Operator $\widehat{H}$ unitär ist.

3. Nehmen Sie für zwei nicht-kommutierende Operatoren $\widehat{A}$ und $\widehat{B}$ die Funktion

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

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

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

zu zeigen.

Hierbei sind: $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]^{(1)} = \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]$ und $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]^{(n)} = \left[\widehat{A}, \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]^{(n-1)}\right]$

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

# 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 $\lambda$, der die linke Seite minimiert.
   Beachten Sie, dass $\lambda$ und $\lambda^*$ unabhängig voneinander variiert werden können.

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

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

   gilt.
   Hierbei ist: $\left(\Delta\widehat{A}\right)^2 = \left\langle\widehat{A}^2\right\rangle - \left\langle\widehat{A}\right\rangle^2$ und $\left(\Delta\widehat{B}\right)^2 = \left\langle\widehat{B}^2\right\rangle - \left\langle\widehat{B}\right\rangle^2$

   **Hinweis:** Betrachten Sie die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung mit:

   $|\phi\rangle = \left(\widehat{A} - \left\langle\widehat{A}\right\rangle\right)|\xi\rangle$

   $|\psi\rangle = \left(\widehat{B} - \left\langle\widehat{B}\right\rangle\right)|\xi\rangle$

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

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

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

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

   erhält.

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

$$\int dx \left| \left[ \gamma \left( x - \langle x \rangle \right) - i \left( \widehat{p} - \langle p \rangle \right) \right] \psi(x) \right|^2 \geq 0$$

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

Zeigen Sie, dass das Gleichheitszeichen nur für Gaußfunktionen gilt.

# 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:

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

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 $|1\rangle$,$|2\rangle$,...,$|N\rangle$:

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

Diese Vektoren spannen einen bestimmen (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 $a_1, a_2, ..., a_N$. Man setze

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

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

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 $n_\alpha$ Eigenvektoren zum Eigenwert $a_\alpha$ habe ($n_\alpha$-fache Entwartung).
   $P_\alpha = \sum\limits_{i=1}^{n_\alpha} |\alpha, i\rangle \langle \alpha, i|$ sei der Projektor auf den Unterraum $\mathcal{E}_\alpha$, den die $|\alpha, i\rangle$ aufspannen.
   Zeigen Sie, dass
   $$\sum_\alpha P_\alpha = 1$$
   gilt.

# 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 $\omega$ als Parameter.

# 10 Dichte-Operatoren (**)

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

2. Zeigen Sie, dass die Gleichung
   $$\widehat{\varrho}^2 = \widehat{\varrho}$$
   für einen beliebigen Dichte-Operator $\widehat{\varrho} = \sum\limits_\alpha p_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \langle \Psi_\alpha|$ dann und nur dann gilt, wenn $\widehat{\varrho}$ einen reinen Zustand beschreibt.

3. Leiten Sie ausgehend von der Schrödinger-Gleichung die von Neumann Gleichung her, welche die Zeitentwicklung eines Dichte-Operators beschreibt:
   $$\frac{d\widehat{\varrho}}{dt} = \frac{\partial \widehat{\varrho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\widehat{\varrho}, \mathcal{H}]$$
   Hierbei ist: $\frac{\partial \widehat{\varrho}}{\partial t} = \sum\limits_\alpha \dot{p}_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \langle \Psi_\alpha|$

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

$$\widehat{\varrho} = \sum_{\alpha} p_\alpha \left|\Psi_\alpha\right\rangle \left\langle\Psi_\alpha\right| \qquad (\dot{p}_\alpha = 0 \ \text{ für alle } \ \alpha)$$

hat.

Zeigen Sie, dass in diesem Fall die Zeitentwicklung der Erwartungswerte

$$\langle\widehat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\widehat{\varrho}\widehat{A}\right)$$

gegeben ist durch:

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