

Ferienkurs *Quantenmechanik* Sommer 2010

Quantenmechanischer Formalismus und Schrödingergleichung

1 Normierung

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

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante A.

2 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?

3 Matrixdarstellung und Eigenwerte

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

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

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

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

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:

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

5 Hermitesche Operatoren

- 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.
- Beweisen Sie, dass für jeden Operator \hat{A} folgende Operatoren hermitesch sind:
 - $(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$
 - $i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$
 - $(\hat{A}\hat{A}^\dagger)$
- Zeigen Sie, dass der Eigenwert eines hermiteschen Operators reel ist und dass die Eigenfunktionen orthogonal sind. Sie können sich auf den nicht-entarteten Fall beschränken.
- In der klassischen Hamiltonfunktion sind die Terme $p \cdot f(x)$ und $f(x) \cdot p$ 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

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

ist die Reihenfolge offen gelassen.

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

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 $f(\lambda)$.

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.

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 endlich 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_n 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.

9 Hellmann-Feynman-Theorem

1. Beweisen Sie das Hellmann-Feynman-Theorem:

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

Hierbei ist:

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

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

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

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.

10 Zeitumkehrinvarianz

Betrachten Sie die Transformation

$$t \rightarrow -t$$

in der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit einem reellen zeitunabhängigen Potential $V(\mathbf{r})$.

1. Welchen Einfluss hat diese Transformation auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$?

2. Welchen Einfluss hat diese Transformation auf den Erwartungswert $\langle \hat{F} \rangle_t$ eines zeitunabhängigen hermiteschen Operators \hat{F} ?