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.

Lösung:

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

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

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

Lösung:

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}\widehat{A}\,|1\rangle &= |\alpha\rangle\,\langle\beta|1\rangle = -i\,|\alpha\rangle = |1\rangle + 2i\,|2\rangle - |3\rangle \\ \widehat{A}\,|2\rangle &= |\alpha\rangle\,\langle\beta|2\rangle = 0 \\ \widehat{A}\,|3\rangle &= |\alpha\rangle\,\langle\beta|3\rangle = 2\;\;|\alpha\rangle = 2i\,|1\rangle - 4\,|2\rangle - 2i\,|3\rangle\end{aligned}$$

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

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

3. $\widehat{A} \neq \widehat{A}^* \quad\Rightarrow\quad \widehat{A}$ ist nicht hermitesch

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 $\hat{\mathcal{H}}$.

Lösung:

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
\det\left(\hat{\mathcal{H}} - \lambda\mathbb{1}\right) &= 0 \\
-(\epsilon-\lambda)(\epsilon+\lambda) - \epsilon^2 &= 0 \\
\lambda^2 &= 2\epsilon^2 \\
\lambda_{1/2} &= \pm\sqrt{2}\epsilon
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbf{v_1} &= \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon}{-\sqrt{2}\epsilon+\epsilon} \\ 1 \end{pmatrix} \\
\mathbf{v_2} &= \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon}{\sqrt{2}\epsilon+\epsilon} \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

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:

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

LÖSUNG:

Beweis per Induktion:

1. Schritt: $n = 1$:

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

2. Schritt: $n \to n+1$:

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

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

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 reel ist und dass die Eigenfunktionen orthogonal sind. Sie können sich auf den nicht-entarteten Fall beschränken.
4. In der klassischen Hamiltonfunktion sind die Terme $p \cdot f(x)$ und $f(x) \cdot p$ äquivalent. Die Ersetzungsregel $p \to \widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ für den Übergang zum Hamiltonoperator führt aber zu verschiedenen Operatoren. In dem Ansatz

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

   ist die Reihenfolge offen gelassen.

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

LÖSUNG:

1. Laut Voraussetzung gilt: $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$ und $\widehat{B} = \widehat{B}^\dagger$
   (a) $\left(\widehat{A}\widehat{B}\right)^\dagger = \widehat{B}^\dagger\widehat{A}^\dagger = \widehat{B}\widehat{A}$
   $\Rightarrow \left(\widehat{A}\widehat{B}\right)^\dagger = \widehat{A}\widehat{B}$ genau dann, wenn $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$
   (b)

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

2. (a) $\left(\widehat{A} + \widehat{A}^\dagger\right)^\dagger = \widehat{A}^\dagger + \left(\widehat{A}^\dagger\right)^\dagger = \widehat{A}^\dagger + \widehat{A} = \widehat{A} + \widehat{A}^\dagger$
   (b) $\left[i\left(\widehat{A} - \widehat{A}^\dagger\right)\right]^\dagger = -i\left[\widehat{A}^\dagger - \left(\widehat{A}^\dagger\right)^\dagger\right] = i\left(\widehat{A} - \widehat{A}^\dagger\right)$
   (c) $\left(\widehat{A}\widehat{A}^\dagger\right)^\dagger = \left(\widehat{A}^\dagger\right)^\dagger\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}\widehat{A}^\dagger$

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

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

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

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

Fallunterscheidung:

(a) $n = m$

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

$\Rightarrow a_n$ ist reel

(b) $n \neq m$

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

$\Rightarrow$ Die Eigenfunktionen sind orthogonal.

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

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

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 reel ist. Die Bedingung kann umgeformt werden zu:

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

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

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

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 quadratintegrable Funktionen sind, muss $\alpha = \frac{1}{2}$ sein.

Die Ersetzungsregel lautet dann:

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

$\frac{1}{2}\left[\widehat{p}\ f(x) + f(x)\ \widehat{p}\right]$ ist hierbei hermitesch.

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

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

LÖSUNG:

1. $\left(e^{i\widehat{H}}\right)^\dagger = \left(\sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(i\widehat{H})^n}{n!}\right)^\dagger = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\widehat{H}^\dagger)^n}{n!} = e^{-i\widehat{H}}$
2. $\widehat{U}$ ist unitär $\Leftrightarrow \widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{1}$

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

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

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

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

$$f(\lambda) = f(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \left.\frac{f^{(n)}(\lambda)}{n!}\right|_{\lambda=0} \lambda^n$$

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

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\lambda) &= e^{\lambda\widehat{A}}\widehat{A}\widehat{B}e^{-\lambda\widehat{A}} - e^{\lambda\widehat{A}}\widehat{B}\widehat{A}e^{-\lambda\widehat{A}} = e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]e^{-\lambda\widehat{A}} \\ f^{(1)}(0) &= \left[\widehat{A},\widehat{B}\right] = \left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\lambda) &= e^{\lambda\widehat{A}}\widehat{A}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]e^{-\lambda\widehat{A}} - e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\widehat{A}e^{-\lambda\widehat{A}} \\ &= e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\right]e^{-\lambda\widehat{A}} \\ &= e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(2)}e^{-\lambda\widehat{A}} \\ f^{(2)}(0) &= \left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(2)} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} f^{(n+1)}(\lambda) &= \frac{d}{d\lambda}f^{(n)}(\lambda) \\ &= e^{\lambda\widehat{A}}\widehat{A}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(n)}e^{-\lambda\widehat{A}} - e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(n)}\widehat{A}e^{-\lambda\widehat{A}} \\ &= e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(n)}\right]e^{-\lambda\widehat{A}} \\ &= e^{\lambda\widehat{A}}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(n+1)}e^{-\lambda\widehat{A}} \\ f^{(n)}(0) &= \left[\widehat{A},\widehat{B}\right]^{(n)} \end{aligned}$$

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

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

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

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 $\widehat{A}$ 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.

Lösung:

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

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\lambda^*} g(\lambda,\lambda^*) &= \langle \phi|\psi\rangle + \lambda \langle \phi|\phi\rangle = 0 \\
\frac{\partial}{\partial\lambda} g(\lambda,\lambda^*) &= \langle \psi|\phi\rangle + \lambda^* \langle \phi|\phi\rangle = 0 \\
\Rightarrow \lambda_{min} &= -\frac{\langle \phi|\psi\rangle}{\langle \phi|\phi\rangle} \\
\Rightarrow \lambda^*_{min} &= -\frac{\langle \psi|\phi\rangle}{\langle \phi|\phi\rangle} \\
0 \leq g(\lambda_{min}, \lambda^*_{min}) &= \langle \psi|\psi\rangle - \frac{|\langle \phi|\psi\rangle|^2}{\langle \phi|\phi\rangle} \\
\Rightarrow \langle \phi|\phi\rangle \langle \psi|\psi\rangle &\geq |\langle \phi|\psi\rangle|^2
\end{aligned}$$

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

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

Eingesetzt in die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung folgt:

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

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

3. Der Kommutator berechnet sich wie folgt:

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

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

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

4. Wegen der Betragsstriche kann das Gleichheitszeichen in der Angabe nur dann gelten, wenn der Integrand identisch 0 ist:
$$[\gamma (x - \langle x \rangle) - i (\widehat{p} - \langle p \rangle)] \psi(x) = 0$$
Setzt man die Definition des Impulsoperators $\widehat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ 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 $|1\rangle$,$|2\rangle$,...,$|N\rangle$:
$$\langle m|n \rangle = \delta_{mn} \qquad (m, n = 1, 2, ..., N)$$
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 endlich 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_α Eigenvektoren zum Eigenwert a_n habe (n_α-fache Entwartung).
$P_a = \sum\limits_{i=1}^{n_\alpha} |\alpha, i\rangle \langle \alpha, i|$ sei der Projektor auf den Unterraum $\mathcal{E}_\alpha$, den die $|\alpha, i\rangle$ aufspannen.
Zeigen Sie, dass
$$\sum_\alpha P_a = 1$$
gilt.

Lösung:

1. Für ein beliebiges $|v\rangle$ gilt:
$$\langle u|P_a|v\rangle = \langle u|v_a\rangle = \langle u_a|v_a\rangle = \langle u_a|v\rangle$$
$$\Rightarrow \langle u| P_a = \langle u_a|$$
$$\Rightarrow P_a \text{ ist hermitesch.}$$

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 $\widehat{P}$, der die Gleichung $\widehat{P}^2 = \widehat{P}$ erfüllt, ein Projektor.

3. Für ein beliebiges $|u\rangle$ gilt:
$$|u\rangle = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle \langle n|u\rangle + \sum_{Rest} |a\rangle \langle a|u\rangle = |u_N\rangle + |u_N^\times\rangle, \qquad \langle a|m\rangle = 0$$

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

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

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)

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

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

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:

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

   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.

Lösung:

1. Durch Ableitung der Energie folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | \hat{\mathcal{H}}(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \\
&= \langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \hat{\mathcal{H}}(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \hat{\mathcal{H}}(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \rangle \\
&= E(\lambda) \langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + E(\lambda) \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \rangle \\
&= E(\lambda) \left[\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \rangle \right] + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \\
&= E(\lambda) \underbrace{\frac{\partial}{\partial \lambda} \underbrace{\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle}_{=1}}_{=0} + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \\
&= \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle
\end{aligned}$$

2. m als Parameter:

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

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

ω als Parameter:

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

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

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

10 Zeitumkehrinvarianz

Betrachten Sie die Transformation

$$t \to -t$$

in der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit einem rellen 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 $\left\langle \widehat{F} \right\rangle_t$ eines zeitunabhängigen hermiteschen Operators $\widehat{F}$?

Lösung:

1. Die Transformation angewendet auf die Schrödingergleichung ergibt:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, -t) + V(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}, -t)$$

Dieser Ausdruck soll nun mit der komplex konjugierten Schrödingergleichung verglichen werden:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\, \psi^*(\mathbf{r}, t)$$

Durch den Vergleich sieht man:

$$\psi(\mathbf{r}, -t) = \psi^*(\mathbf{r}, t)$$

Bildet man nun auf beiden Seiten das Betragsquadrat, folgt:

$$|\psi(\mathbf{r}, -t)|^2 = |\psi^*(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist folglich invariant unter Zeitumkehr.

2. Für den zeitabhängigen Erwartungswert eines zeitunabhängigen hermiteschen Operators gilt:

$$\begin{aligned}
\left\langle \widehat{F} \right\rangle_{-t} &= \int d^3r\, \psi^*(\mathbf{r}, -t)\ \widehat{F}\, \psi(\mathbf{r}, -t) \\
&= \int d^3r\, \psi(\mathbf{r}, t)\ \widehat{F}\, \psi^*(\mathbf{r}, t) \\
&= \int d^3r\, \left(\widehat{F}\, \psi(\mathbf{r}, t)\right)\ \psi^*(\mathbf{r}, t) \\
&= \int d^3r\, \psi^*(\mathbf{r}, t)\ \widehat{F}\, \psi(\mathbf{r}, t) \\
&= \left\langle \widehat{F} \right\rangle_t
\end{aligned}$$

Der Erwartungswert eines zeitunabhängigen hermiteschen Operators ist folglich invariant unter Zeitumkehr.