Ferienkurs Quantenmechanik

Struktur und Grundlagen der Quantenmechanik

1 Kurze Fragen

a) Nennen Sie zwei Experimente, die ein Elektron als Welle identifizieren, und zwei, die es als Teilchen identifizieren.

Lösung: Interferenz und Beugung als Welleneigenschaften, Compton-Effekt und Photoeffekt als Teilcheneigenschaften.

b) Für welche Amplitudenverteilung $\varphi(x,t)$ nimmt ein Wellenpaket die minimale Orts-Impuls-Unschärfe $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ an?

Lösung: Die minimale Unschärfe wird für ein Gaußsches Wellenpaket erreicht.

c) Leiten Sie die allgemeine Form des Zeitentwicklungsoperators aus der Tatsache her, dass sich $\psi(\vec{x},t)$ durch Kenntnis von $\psi(\vec{x},t_0)$ und seiner Zeitentwicklung eindeutig bestimmen lässt.

Lösung: Es gilt also:

$$\psi(\vec{x},t) = \hat{U}(t,t_0)\psi(\vec{x},t=t_0) \tag{1}$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ergibt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0) \tag{2}$$

und es folgt die allgemeine Form des Zeitentwicklungsoperators:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) \tag{3}$$

d) Warum kann die Schrödinger-Gleichung keine relativistische Dynamik beschreiben?

Lösung: Die SG ist 1. Ordnung in der Zeit und 2. Ordnung im Ort. Sie ist damit nicht invariant unter einer Lorentz-Transformation und kann somit nicht zur Beschreibung relativistischer Dynamik dienen.

e) Lässt sich beim Doppelspaltexperiment der Auftreffort eines einzelnen Elektrons auf dem Detektor voraussagen? Welche Aussage kann man treffen?

Lösung: Nein. Wir können nur eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit dafür treffen, dass das Elektron an einem bestimmten Ort auftrifft.

f) Definieren Sie Phasen- und Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpaketes.

Lösung: Die Phasengeschwindigkeit ist definiert als $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$,die Gruppengeschwindigkeit als $v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k}$.

g) Wie lautet die Normierungsbedingung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude?

Lösung:

$$\int d^3x |\psi(\vec{x},t)|^2 = 1 \tag{4}$$

h) Ist die Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ direkt messbar? Wenn nicht, was sonst?

Lösung: Nein. Wir können nur deren Betragsquadrat, die Wahrscheinlichkeitsdichte, messen.

2 Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

2.1 Normierung

Zeigen Sie, dass die Schrödinger-Gleichung homogen sein muss, damit die Normierungsbedingung für alle Zeiten erfüllt sein kann.

Hinweis: Nehmen Sie an, die Schrödinger-Gleichung besäße eine Inhomogenität, und zeigen Sie, durch Einsetzen der SG in die Normierungsbedingung, dass diese nicht zu allen Zeiten erfüllt bleibt.
Benutzen Sie den Gaußschen Integralsatz

$$\int_V d^3x\, \vec{\nabla}\, \vec{F} = \oint_S d\Omega\, \vec{F}; \qquad (V \subset \mathbb{R}^n) \text{ kompakt und } \vec{F} \text{ stetig differenzierbar} \tag{5}$$

und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi] \tag{6}$$

Lösung: Die freie Schrödinger-Gleichung mit einer hinzugefügten Inhomogenität q lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x},t) + q \tag{7}$$

Wir betrachten die Änderung der Normierung mit der Zeit. Im Falle erhaltener Normierung muss gelten:

$$\frac{d}{dt}\int d^3x|\psi(\vec{x},t)|^2 = 0 \tag{8}$$

Wir können Integration und Differentiation vertauschen und erhalten:

$$\frac{d}{dt}\int d^3x|\psi(\vec{x},t)|^2 = \int d^3x(\dot{\psi}\psi^* + \psi\dot{\psi}^*) \tag{9}$$

$$= \int d^3x(-\frac{\hbar}{2mi}(\vec{\nabla}^2\psi)\psi^* + \frac{\hbar}{2mi}\psi(\vec{\nabla}^2\psi^*)) + \int d^3x(\frac{q}{i\hbar}\psi^* - \psi\frac{q^*}{i\hbar}) \tag{10}$$

wobei wir einfach für ψ bzw. ψ^* die SG, bzw. die konjugierte SG aus (7) eingesetzt haben. Mittels der Definition der Wahrscheinlichkeitsstromdichte können wir weiter unter Verwendung des Gaußschen Integralsatzes schreiben

$$\frac{d}{dt}\int d^3x|\psi(\vec{x},t)|^2 = -\int d^3x\, \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{x},t) + \int d^3x(q\psi^* + \psi q^*) \tag{11}$$

$$= -\oint_S d\Omega\, \vec{j}(\vec{x},t) + \int d^3x\, 2\,\mathrm{Re}\{q\psi^*\} \tag{12}$$

Wir wissen, dass für $\psi \in \mathbb{L}^2$ der erste Term Null wird. Allerdings ist der zweite Term i.A. ungleich Null und steht somit im Widerspruch zu unserer Annahme.

3 Wellenpakete

3.1 Gaußsches Wellenpaket

Wir betrachten das eindimensionale Wellenpaket

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\varphi(p)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right\} \tag{13}$$

mit folgender Amplitudenverteilung:

$$\varphi(p) = A\exp\left\{-(p-p_0)^2 d^2/\hbar^2\right\} \tag{14}$$

a) Werten Sie explizit $|\psi(x,t)|^2$ für das angegebene Wellenpaket aus.
Hinweis: Benutzen Sie die Substitutionen

$$a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i\frac{t}{2m\hbar}, \quad b = \frac{d^2 p_0}{\hbar^2} + i\frac{x}{2\hbar}, \quad c = \frac{d^2 p_0^2}{\hbar^2} \tag{15}$$

und das Gauß-Integral

$$\int dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{16}$$

Lösung: Wir schreiben das Wellenpaket nochmal zusammen auf:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} A \exp\left\{-(p-p_0)^2 d^2/\hbar^2\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right\} \tag{17}$$

Wir machen die Substitution und erhalten

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} A \exp\left\{-(p^2 a - 2pb + c)\right\} \tag{18}$$

Wir müssen den Exponenten nun auf eine Form bringen, die erlaubt, das Integral auszuwerten. Wir schreiben den Exponenten um, um ihn mit Hilfe des Gauß-Integrals lösen zu können:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} A \exp\left\{-a(p - \frac{b}{a})^2 + \frac{b^2}{a} - c\right\} \tag{19}$$

Wir können dann integrieren und erhalten

$$\psi(x,t) = \frac{A}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{a} - c\right\} \tag{20}$$

und weiter das Betragsquadrat zu

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{|a|} \exp\left\{2\mathrm{Re}\left\{\frac{b^2 - ac}{a}\right\}\right\} \tag{21}$$

b) Zeigen Sie, dass für die Normierungskonstante $A = \sqrt[4]{8\pi d^2}$ gilt.
Hinweis: Verwenden Sie die Substitutionen

$$v = \frac{p_0}{m}, \; \Delta = \frac{t\hbar}{2md^2} \tag{22}$$

und die Identität

$$2\mathrm{Re}\{(b^2 - ac)a^*\}/|a|^2 = \frac{(x - vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)} \tag{23}$$

Lösung: Wir setzen an:

$$\int dx |\psi(x,t)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \tag{24}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\int dx|\psi(x,t)|^2 &= \int dx \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{|a|} \exp\left\{2\mathrm{Re}\left\{\frac{b^2-ac}{a}\right\}\right\} &(25)\\
&= \int dx \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{|a|} \exp\left\{\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}\right\} &(26)\\
&= \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{|a|} \int dx \exp\left\{\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}\right\} &(27)\\
&= \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{|a|} \sqrt{\pi 2d^2(1+\Delta^2)} &(28)\\
&= 1 &(29)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{A}{2\pi\hbar}\right)^4 \frac{\pi^2}{|a|^2}\pi 2d^2(1+\Delta^2) = 1 \tag{30}$$

$$A^4 = 8\pi\hbar^4 \frac{|a|^2}{d^2(1+\Delta^2)} \tag{31}$$

$$A^4 = 8\pi d^2 \frac{\hbar^4|a|^2}{d^4(1+\Delta^2)} \tag{32}$$

$$A = \sqrt[4]{8\pi d^2} \tag{33}$$

Wir haben hierbei im letzten Schritt die Definitionen (15) und (23) eingesetzt.

c) Interpretieren Sie das Ergebnis für $t = 0$ und $t > 0$. Was ist v?

Lösung: Für t = 0 erhalten wir:

$$|\psi(x,0)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x)^2}{2d^2}\right\} \tag{34}$$

Dies beschreibt ein Gaußverteilung im Ortsraum. Wir sehen, dass sich das Maximum des Wellenpaketes mit der Gruppengeschwindigkeit $v = \frac{p_0}{m} = \frac{\partial\omega}{\partial k}$ bewegt. Für Zeiten $t > 0$ erhalten wir:

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} \exp\left\{-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}\right\} \tag{35}$$

Wir sehen, dass das Wellenpaket für Zeiten $t > 0$ zerfließt.

4 Operatoren, Kommutatoren

4.1 Wichtige Kommutatoren

Berechnen Sie folgende wichtige Kommutatoren in Ortsdarstellung:

a)

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \tag{36}$$

Lösung:

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

b) Sei $\hat{P}$ der Paritätsoperator und $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(x)$ der Hamilton-Operator mit $V(x)$ symmetrisch.

$$[\hat{H}, \hat{P}] \tag{37}$$

Lösung:

$$[\hat{H}, \hat{P}]f(x) = \hat{H}\hat{P}f(x) - \hat{P}\hat{H}f(x) = 0 \tag{38}$$

Da das Potenzial V(x) symmetrisch ist, gilt $V(x) = V(-x)$. Weiter taucht im Hamilton-Operator nur die zweite Ableitung nach x auf, und somit gilt für jede komplexe Funktion.

$$\hat{P}\hat{H}f(x) = \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 f(-x)}{\partial(-x)^2} - V(-x)f(-x) = \hat{H}f(-x) = \hat{H}\hat{P}f(x) \tag{39}$$

4.2 Operatoreigenschaften

a) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte hermitescher Operatoren reell sind.

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

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

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

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

Wir betrachten den Fall $n = m$, da wir uns nur für den Erwartungswert interessieren.

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

$\Rightarrow a_n$ ist reel

b) Zeigen Sie, dass die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren orthogonal aufeinander stehen (für den nicht-entarteten Fall). Gilt die Orthogonalität auch für den entarteten Fall?

Lösung: Die vorherigen Betrachtungen gelten weiter und wir nehmen nun an, dass $n \neq m$.

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

$\Rightarrow$ Die Eigenfunktionen sind orthogonal. Die Orthogonalität kann man auch für den entarteten Fall nachweisen (Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren).

c) Zeigen Sie, dass kommutierende Operatoren einen gemeinsamen Satz an Eigenfunktionen haben.

Lösung: Wir setzen voraus:

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{40}$$

Wir müssen nun wieder zwischen entartetem und nicht entartetem Fall unterscheiden. Für den Fall, dass die Eigenfunktionen nicht entartet sind, folgt:

$$\hat{B}(\hat{A}\psi) = \hat{A}(\hat{B}\psi) = a(\hat{B}\psi) \tag{41}$$

Da ψ die einzige Eigenfunktion zu $\hat{A}$ ist (nicht entartet) folgt, dass $\hat{B}\psi \propto \psi$ sein muss. D.h., es muss gelten:

$$\hat{B}\psi = b\psi \tag{42}$$

und damit, dass ψ auch Eigenfunktion zu $\hat{B}$ ist.
Für den entarteten Fall können wir mit obigem Argument nur aussagen, dass $\hat{B}\psi_i$ nur eine Linearkombination der möglichen Eigenfunktionen ψ_i ist. Wir können nun aber im Raum der ψ_i die Eigenfunktionen $\hat{B}$ diagonalisieren, und damit ist der Satz bewiesen.

d) Zeigen Sie, dass für $[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = 1$ und jede Funktion $f(\hat{A}^\dagger)$ mit $\hat{A}\,|0\rangle = 0$ gilt:

$$\hat{A} f(\hat{A}^\dagger)\,|0\rangle = \frac{df(\hat{A}^\dagger)}{d\hat{A}^\dagger}\,|0\rangle \tag{43}$$

Lösung: Es gilt also $[\hat{A},\hat{A}^\dagger] = \hat{A}\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{A} = 1$.
Wir können die Funktion $f(\hat{A})^\dagger$ als Potenzreihe entwickeln:

$$f(\hat{A}^\dagger) = \sum_n c_n (\hat{A}^\dagger)^n \tag{44}$$

$$\Rightarrow \hat{A} f(\hat{A}^\dagger) = \sum_n c_n \hat{A} (\hat{A}^\dagger)^n \tag{45}$$

Wir betrachten:

$$\begin{aligned}
\hat{A}(\hat{A}^\dagger)^n = (\hat{A}\hat{A}^\dagger)(\hat{A}^\dagger)^{n-1} &= (\hat{A}^\dagger\hat{A} + [\hat{A},\hat{A}^\dagger])(\hat{A}^\dagger)^{n-1} && (46)\\
&= (\hat{A}^\dagger)^{n-1} + \hat{A}^\dagger(\hat{A}\hat{A}^\dagger)(\hat{A}^\dagger)^{n-2} && (47)\\
&= (\hat{A}^\dagger)^{n-1} + (\hat{A}^\dagger)^{n-2} + (\hat{A}^\dagger)^2\hat{A}(\hat{A}^\dagger)^{n-2} && (48)\\
&= n \cdot (\hat{A}^\dagger)^{n-1} + (\hat{A}^\dagger)^n \cdot \hat{A} && (49)
\end{aligned}$$

Dann folgt:

$$\begin{aligned}
\hat{A} f(\hat{A}^\dagger)\,|0\rangle &= \sum_n c_n \hat{A} (\hat{A}^\dagger)^n && (50)\\
&= \sum_n c_n (n \cdot (\hat{A}^\dagger)^{n-1} + (\hat{A}^\dagger)^n \cdot \hat{A})\,|0\rangle && (51)\\
&= \sum_n c_n n (\hat{A}^\dagger)^{n-1}\,|0\rangle && (52)\\
&= \sum_n c_n \frac{d}{d\hat{A}^\dagger}[(\hat{A}^\dagger)]^n\,|0\rangle && (53)\\
&= \frac{d}{d\hat{A}^\dagger}\sum_n c_n (\hat{A}^\dagger)^n\,|0\rangle && (54)\\
&= \frac{df(\hat{A}^\dagger)}{d\hat{A}^\dagger}\,|0\rangle && (55)
\end{aligned}$$

4.3 Matrix-Exponentielle

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

$$e^{-\hat{A}}e^{\hat{A}} = e^{\hat{A}}e^{-\hat{A}} = 1 \tag{56}$$

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \quad \text{für} \quad [\hat{A},\hat{B}] = 0 \tag{57}$$

a) Zeigen Sie für einen hermiteschen Operator $\hat{H}$, dass der zu $e^{-i\hat{H}}$ der zu $e^{i\hat{H}}$ adjungierte Operator ist.

Lösung:

$$\left(e^{i\hat{H}}\right)^\dagger = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(i\hat{H}\right)^n}{n!}\right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\hat{H}^\dagger\right)^n}{n!} = e^{-i\hat{H}} \tag{58}$$

b) Zeigen Sie, dass $\hat{U} = e^{i\hat{H}}$ für einen hermiteschen Operator $\hat{H}$ unitär ist.

Lösung: $\widehat{U}$ ist unitär $\Leftrightarrow \widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{1}$

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

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

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

$c)$ 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 $f(\lambda)$.

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

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

$$\begin{aligned}f(0) &= e^0\widehat{B}e^0 = \widehat{B}\end{aligned}$$

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

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

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

4.4 Matrixdarstellung

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

$$\hat{H} = \varepsilon\left(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|\right)$$

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

a) Wie lautet die Matrixdarstellung des Operators $\hat{H}$ in dieser Basis.

Lösung: Durch Anwendung von $\hat{H}$ auf die Basiszustände folgt:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|1\rangle &= \varepsilon\left[|1\rangle\langle 1|1\rangle - |2\rangle\langle 2|1\rangle + |1\rangle\langle 2|1\rangle + |2\rangle\langle 1|1\rangle\right] \\
&= \varepsilon\left[|1\rangle + |2\rangle\right] \\
\\
\hat{H}|2\rangle &= \varepsilon\left[|1\rangle\langle 1|2\rangle - |2\rangle\langle 2|2\rangle + |1\rangle\langle 2|2\rangle + |2\rangle\langle 1|2\rangle\right] \\
&= \varepsilon\left[|1\rangle - |2\rangle\right] \\
\\
\hat{H} &= \varepsilon\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

b) Finden Sie die Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenzustände des Operators $\hat{H}$.

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

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

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

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

5 Dirac-Darstellung

Dirac-Formalismus für ebene Wellen

Die Lösungen in Form von ebenen Wellen $\psi(x) \propto e^{ikx}$ der freien Schrödinger-Gleichung werden im Dirac-Formalismus durch (uneigentliche) Zustände $|k\rangle$ beschrieben, die in Ortsdarstellung die Form $\langle x|k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$

a) Verifizieren Sie die Orthogonalität $\langle k|k'\rangle = \delta(k-k')$ der Zustände $|k\rangle$

Lösung: Für das Skalarprodukt erhält man durch Einschub des Einsoperators $\hat{I}$ definiert durch

$$\hat{I} = \int |x\rangle \langle x| \, dx \tag{59}$$

mit $\langle x|k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$ und $\langle k|x\rangle = \langle x|k\rangle^*$ die Fourier-Darstellung der Delta-Distribution

$$\langle k|k'\rangle = \langle k|\hat{I}|k'\rangle = \int \langle k|x\rangle \langle x|k'\rangle \, dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i(k-k')x} dx = \delta(k-k') \tag{60}$$

b) Betrachten Sie einen Zustand ($\langle\psi|\psi'\rangle = 1$) im Hilbertraum in k-Darstellung

$$|\psi\rangle = \int dk \psi(k) \, |k\rangle \, . \tag{61}$$

Zeigen Sie, dass der Ortsoperator $\hat{x}$ in dieser Darstellung die Form $\hat{x} = i\partial_k$ hat, d.h. $\langle k|\hat{x}\psi\rangle = i\partial_k \psi(k)$. Bestimmen Sie damit den Erwartungswert $\langle\psi| \, f(\hat{x}) \, |\psi\rangle$ einer beliebigen Funktion f(x) in der Impulsdarstellung, d.h. ausgedrückt durch $\psi(k)$.

Lösung: Sei $|x\rangle$ ein Eigenzustand des Ortsoperators mit der Eigenschaft $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$ so erhält man:

$$\begin{aligned}
\langle k|\hat{x}\psi\rangle = \langle k|\hat{x}\hat{I}|\psi\rangle &= \int \langle k|\hat{x}x\rangle \langle x|\psi\rangle \, dx && (62)\\
&= \int x \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle \, dx && (63)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int x e^{-ikx} \psi(x) dx && (64)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \left(i \frac{\partial}{\partial k} e^{-ikx} \right) && (65)\\
&= i \frac{\partial}{\partial k} \int \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle \, dx && (66)\\
&= i \frac{\partial}{\partial k} \langle k|\psi\rangle && (67)\\
&= i\partial_k \psi(k) && (68)
\end{aligned}$$

Für den Erwartungswert einer beliebigen Funktion $f(\hat{x})$ in Impulsdarstellung gilt somit:

$$\langle\psi|f(\hat{x}|\psi\rangle = \langle\psi|f(\hat{x})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}f(\hat{x})|\psi\rangle = \int \langle\psi|k\rangle \langle k|f(\hat{x})|\psi\rangle \, dk = \int \psi^*(k) f(i\partial_k) \psi(k) dk \tag{69}$$

wobei $f(i\partial_k)$ durch die Potenzreihendarstellung

$$f(i\partial_k)\psi(k) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n i^n \frac{\partial^n}{\partial k^n} \psi(k) \tag{70}$$

definiert ist.

c) Wie müssen die Ortswellenfunktionen $\langle x|E\rangle \propto e^{ik_E x}$ mit $k_E = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ in der Energie-Darstellung normiert werden, damit die Standard-Ortogonalitätsrelation $\langle E|E'\rangle = \delta(E-E')$ erfüllt ist?
Hinweis: Benutzen Sie die Relation für die Delta-Distribution:

$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x-x_0)}{|f'(x_0)|} \quad \text{für} \quad x_0 = 0 \tag{71}$$

Lösung: Wir wissen $\langle x|E\rangle = Ce^{-ik_E x}$. Damit ergibt sich:

$$\langle E|E'\rangle = \langle E|\hat{I}|E\rangle = \int \langle E|x\rangle x|E'dx = |C|^2 \int e^{-i(k_E-k_{E'})x}dx = 2\pi|C|^2\delta(k_E-k_{E'}) \tag{72}$$

Wir definieren eine Funktion

$$f(E) = k_E - K_{E'} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}(\sqrt{E}-\sqrt{E'}) \tag{73}$$

man erhät dann mit

$$\frac{df}{dE}\|_E = E' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E'}} = \frac{1}{\hbar v} \tag{74}$$

und (71) erhält man als Bedingung

$$\langle E|E'\rangle = 2\pi|C|^2\delta(k_e-k_{E'}) = 2\pi|C|^2\hbar v\delta(E-E') \stackrel{!}{=} \delta(E-E_0) \tag{75}$$

und erhält somit als Normierungskonstante

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}} \tag{76}$$

6 Cauchy-Schwarz-Ungleichung

a) Beweisen Sie die Cauchy-Schwarz-Ungleichung für zwei Wellenfunktionen $\psi,\ \phi \in \mathbb{L}^2$

$$|\langle\phi,\psi\rangle|^2 \leq \langle\phi,\phi\rangle\langle\psi,\psi\rangle \tag{77}$$

Hinweis: Zerlegen Sie ψ o.B.d.A in: $\psi = z\phi + \xi$ mit $\langle\phi,\xi\rangle = 0$

Lösung: Wir sehen sofort, dass die Ungleichung für den Fall $\phi = 0$ erfüllt ist.
Wir müssen also für $\phi \neq 0$ ψ in einen Anteil parallel zu ϕ und einen Anteil senkrecht zu ϕ zerlegen:

$$\psi = z\phi + \xi \tag{78}$$

wobei wir o.B.d.A voraussetzen, dass $\langle\phi,\xi\rangle = 0$. Es folgt $\langle\phi,\xi\rangle = z\langle\phi,\phi\rangle$ und somit für den Proportionalitätsfaktor $z = \frac{\langle\phi,\psi\rangle}{\langle\psi,\psi\rangle}$. Es folgt also weiter:

$$\langle\psi,\psi\rangle = \langle z\phi+\xi, z\phi+\xi\rangle = z^*z\langle\phi,\phi\rangle + \langle\xi,\xi\rangle \geq z^*z\langle\phi,\phi\rangle \tag{79}$$

Einsetzen von z ergibt dann

$$\langle\psi,\psi\rangle \geq \frac{|\langle\phi,\psi\rangle|^2}{\langle\phi,\phi\rangle}, \tag{80}$$

womit die Behauptung bewiesen ist.

b) Beweisen Sie, dass für zwei hermitesche Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ die verallgemeinerte Unschärferelation

$$\Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle[\hat{A},\hat{B}]\right\rangle\right| \tag{81}$$

gilt.
Hinweis: Betrachten Sie die Schwarzsche Ungleichung für

$$\phi = (\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2)\xi \quad \text{und} \tag{82}$$

$$\psi = (\langle\hat{B}^2\rangle - \langle\hat{B}\rangle^2)\xi \tag{83}$$

Lösung: 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:

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

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

c) Folgern Sie, dass man daraus für $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{B} = \hat{p}$ die Ort-Zeit-Unschärferelation

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{84}$$

erhält.

Lösung: $\langle[\widehat{x},\widehat{p}]\rangle = \langle\hbar i\rangle = \hbar i$

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

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

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

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

Zeigen Sie, dass das Gleichheitszeichen nur für Gaußfunktionen gilt.

Lösung: 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 Impumlsoperators $\widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ 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.