2. Lösungsblatt Ferienkurs: Formalismus

Michael Drews

September 4, 2012

1 Ehrenfest-Theorem und Virialsatz

a)

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle\frac{d\Psi}{dt}|\hat{Q}\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{d\hat{Q}}{dt}\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{Q}\frac{d\Psi}{dt}\rangle$$

mit $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ ergibt das

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = \frac{-1}{i\hbar}\langle\hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle + \langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\rangle$$

Nutze, dass $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, dann ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle Q\rangle &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\hat{H}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle + \langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\rangle\end{aligned}$$

Das bedeutet, dass jeder Operator (der nicht explizit zeitabhängig ist), der mit dem Hamilton vertauscht, eine Erhaltungsgröße verkörpert.

b)

$$\begin{aligned}[\hat{H},\hat{x}]|f\rangle &= (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H})|f\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\cdot f) + V\cdot(x\cdot f) - x\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) - x\cdot(V\cdot f) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(f + x\cdot f') + \frac{\hbar^2}{2m}xf'' = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}(2f' + x\cdot f'') + \frac{\hbar^2}{2m}xf'' = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}2f'\end{aligned}$$

Also $[\hat{H},\hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{-i\hbar p}{m}$.

$$\begin{aligned}[\hat{H},\hat{p}]|f\rangle &= (\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H})|f\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\right) + V\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\right) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(Vf) = \\ &= -i\hbar f'\cdot V + i\hbar(V'\cdot f + f'\cdot V) = \\ &= i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}f\end{aligned}$$

Also $[\hat{H}, \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$.

Setze $\hat{Q} = \hat{p}$, dann sagt das Ehrenfest-Theorem:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = -\frac{\partial V}{\partial x} = -F$$

Die zeitliche Änderung des Impulses ist durch eine Kraft, d.h. durch den Gradienten des Potentials gegeben.

Setze $\hat{Q} = \hat{x}$, dann sagt das Ehrenfest-Theorem:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle = \frac{p}{m} = v$$

Die zeitliche Änderung des

c)

Betrachte

$$\begin{aligned}\langle [\hat{H}, \hat{xp}] \rangle &= \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{x}]\hat{p} + \hat{x}[\hat{H}, \hat{p}] | \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | -\frac{i\hbar}{m} p^2 \Psi \rangle + \langle \Psi | x \cdot i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \Psi \rangle = \\ &= i\hbar \left(-2\langle T \rangle + \langle x \cdot \frac{\partial V}{\partial x} \rangle \right)\end{aligned}$$

Also

$$\frac{d}{dt}\langle xp \rangle = 2\langle T \rangle - \langle x \frac{dV}{dx} \rangle$$

Bei stationären Zuständen ist $\frac{d}{dt}\langle xp \rangle = 0$.
Für den harmonischen Oszillator ist $V = c \cdot x^2$, also

$$\begin{aligned}0 &= 2\langle T \rangle - \langle x \cdot 2cx \rangle \\ \langle T \rangle &= \langle V \rangle\end{aligned}$$

2 Harmonischer Oszillator

a)

$$\hat{x} = \frac{\beta}{2}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)$$

$$\hat{p} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\beta}(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)$$

Einsetzen in den Hamiltonoperator liefert

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2} \right)$$

b)

$$
\begin{aligned}
[\hat{b}\hat{b}^\dagger] &= \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{x}}{\beta} + i\frac{\beta\hat{p}}{\hbar}, \frac{\hat{x}}{\beta} - i\frac{\beta\hat{p}}{\hbar}\right] = \\
&= \frac{1}{2}\left(\left[\frac{\hat{x}}{\beta}, -i\frac{\beta\hat{p}}{\hbar}\right] + \left[i\frac{\beta\hat{p}}{\hbar}, \frac{\hat{x}}{\beta}\right]\right) = \\
&= \left[i\frac{\beta\hat{p}}{\hbar}, \frac{\hat{x}}{\beta}\right] = \frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = 1
\end{aligned}
$$

$$
[\hat{H}, \hat{b}] = \hbar\omega[\hat{b}^\dagger\hat{b}, \hat{b}] = \hbar\omega(\hat{b}^\dagger[\hat{b}, \hat{b}] + [\hat{b}^\dagger, \hat{b}]\hat{b}) = -\hbar\omega\hat{b}
$$

$$
[\hat{H}, \hat{b}^\dagger] = \hbar\omega[\hat{b}^\dagger\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \hbar\omega(\hat{b}^\dagger[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] + [\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger]\hat{b}) = \hbar\omega\hat{b}^\dagger
$$

c)

$$
\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle
$$

d)

Untersuche erst $\hat{b}(\hat{b}^\dagger)^n$:

$$
\begin{aligned}
\hat{b}(\hat{b}^\dagger)^n &= (\hat{b}\hat{b}^\dagger)(\hat{b}^\dagger)^{n-1} = \\
&= (\hat{b}^\dagger\hat{b} + 1)(\hat{b}^\dagger)^{n-1} = \\
&= (\hat{b}^\dagger)^n\hat{b} + n(\hat{b}^\dagger)^{n-1}
\end{aligned}
$$

Also ist

$$
\begin{aligned}
\hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}\right)c_n(\hat{b}^\dagger)^n|0\rangle = \\
&= \hbar\omega\left(c_n\hat{b}^\dagger\hat{b}(\hat{b}^\dagger)^n|0\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle\right) = \\
&= \hbar\omega\left(c_n\hat{b}^\dagger((\hat{b}^\dagger)^n\hat{b} + n(\hat{b}^\dagger)^{n-1})|0\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle\right) = \\
&= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle
\end{aligned}
$$

e)

Nehmen wir an, dass es einen Eigenzustand $|\alpha\rangle$ von $\hat{H}$ mit Eigenwert $E_\alpha = \hbar\omega(\alpha + 1/2)$ mit $\alpha \neq 0, 1, 2, ...$ gibt. Aus Teil b):

$$
\hat{H}\hat{b}|\alpha\rangle = -\hbar\omega\hat{b}|\alpha\rangle + \hat{b}\hat{H}|\alpha\rangle = \hbar\omega\left(\alpha - \frac{1}{2}\right)\hat{b}|\alpha\rangle
$$

d.h. $\hat{b}|\alpha\rangle$ ist ein Eigenzustand von $\hat{H}$ und der entsprechene Eigenwert ist $\hbar\omega(\alpha - 1/2)$. Es folgt, dass die Zustände der Art $\hat{b}^n|\alpha\rangle$ auch Eigenzustände sind. Die entsprechenden Eigenwerte $\hbar\omega(\alpha + 1/2 - n)$ sind aber von unten unbegrenzt, was unmöglich ist. Dieser Widerspruch beweist, dass es keine anderen Eigenwerte gibt.

3 Skalar-Produkt und Matrix-Darstellung

a)

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

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

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

b)

Durch Anwendung von $\hat{A}$ auf Basiszustände folgt:

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

Also

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

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

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

4 Rabi-Oszillationen

a)

Die Matrixdarstellung lautet

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

b)

Das Eigenwertproblem lautet

$$H \cdot \vec{x} = \lambda\vec{x}$$

also durch Umstellen

$$(H - \lambda\mathbb{1}) \cdot \vec{x} = 0$$

Dies hat nur eine Lösung falls

$$\begin{aligned}det(H - \lambda\mathbb{1}) &= 0 \\ &= h^2 - 2h\lambda + \lambda^2 - g^2 \\ &= \lambda^2 - 2h\lambda + (h^2 - g^2) = 0\end{aligned}$$

Dies hat die Lösungen $\lambda_1 = h + g$ und $\lambda_2 = h - g$.
Oben einsetzen und Suchen der Eigenvektoren liefert

$$\vec{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{x}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

c)

Lösung der Schrödinger-Gleichung durch den Zeitentwicklungsoperator:

$$|\Psi(x,t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\Psi(x,0)\rangle$$

mit $\Psi(x,0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Die Transformationsmatrix S ist gegeben durch die Eigenvektoren als Spaltenvektoren:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Invertieren der Matrix liefert:

$$S^{-1} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Daher ist

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} &= S \cdot e^D \cdot S^{-1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{-i(h+g)t/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-i(h-g)t/\hbar} \end{pmatrix} \cdot \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/2e^{-i(h+g)t/\hbar} & 1/2e^{-i(h+g)t/\hbar} \\ 1/2e^{-i(h-g)t/\hbar} & -1/2e^{-i(h-g)t/\hbar} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} + e^{-i(h-g)t/\hbar}) & 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} - e^{-i(h+g)t/\hbar}) \\ 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} - e^{-i(h-g)t/\hbar}) & 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} + e^{-i(h-g)t/\hbar}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} |\Psi(x,t)\rangle &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\Psi(x,0)\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} + e^{-i(h-g)t/\hbar}) \\ 1/2(e^{-i(h+g)t/\hbar} - e^{-i(h-g)t/\hbar}) \end{pmatrix} \\ &= e^{-iht/\hbar} \cdot \begin{pmatrix} cos(gt/\hbar) \\ -isin(gt/\hbar) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

5 Hermitesche Operatoren

Es gilt $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ und $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$.

a)

1.

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

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

2.

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

b)

1.

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

2.

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

3.

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

c)

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

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

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

Die Differenz ist

$$0 = (a_n - a_m^*)\langle m|n\rangle$$

Für denn Fall, dass $m = n$:

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

Also ist a_n reel.

Für den Fall $n \neq m$:

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

weil $(a_n - a_m^*) \neq 0$. Also sind die Eigenfunktionen orthogonal.

6 Heisenbergsche Unschärferelation

a)

Für eine Observable $\hat{A}$ haben wir

$$\sigma_A^2 = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi\rangle = \langle f|f\rangle$$

mit $|f\rangle = (\hat{A} - \langle A\rangle)|\Psi\rangle$.
Ebenso haben wir für die Observable B:

$$\sigma_B^2 = \langle g|g\rangle$$

mit $|g\rangle = (\hat{B} - \langle B\rangle)|\Psi\rangle$.
Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung erhalten wir

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

Nun gilt für jede komplexe Zahl z:

$$|z|^2 = (Re(z))^2 + (Im(z))^2 \geq (Im(z))^2 = [\frac{1}{2i}(z - z^*)]^2$$

Jetzt ist

$$\begin{aligned}
\langle f|g\rangle &= \langle\hat{A} - \langle A\rangle\Psi|\hat{B} - \langle B\Psi\rangle\rangle = \\
&= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\rangle = \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle)\Psi\rangle = \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle = \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle
\end{aligned}$$

Ebenso erhält man für

$$\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle$$

Also ist

$$\begin{aligned}
\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle &= \langle f|g\rangle - \langle f|g\rangle^* \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle = \\
&= \langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle
\end{aligned}$$

Oben eingesetzt ergibt sich damit

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right]^2$$

b)

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(f) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf) = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{df}{dx} - (f + x\frac{df}{dx})\right] = i\hbar f$$

Also

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Daher ist

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$