Ferienkurs Quantenmechanik - Aufgaben

Sommersemester 2014

Fabian Jerzembeck und Christian Kathan
Fakultät für Physik
Technische Universität München

08. September 2014

Grundlagen und Formalismus

Aufgabe 1 **(*)** *Betrachte die Wellenfunktion*

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t},$$

wobei $A, \lambda, \omega > 0$

a) Normiere Ψ

b) Was ist der Erwartungswert von x *und* x^2

c) Bestimme die Standardabweichung von x*. Wie sieht der Graph von* $|\Psi|^2$ *als Funktion von* x *aus? Markiere die Punkte* $(\langle x\rangle + \Delta x)$ *und* $(\langle x\rangle - \Delta x)$ *und berechne die Wahrscheinlichkeit das Teilchen außerhalb dieses Bereichs zu finden*

Lösung:

a)

$$1 = \int |\Psi|^2 dx = 2|A|^2 \int_0^\infty e^{-2\lambda x} = 2|A|^2 \left(\frac{e^{-2\lambda x}}{-2\lambda}\right)\Bigg|_0^\infty = \frac{|A|^2}{\lambda} \Longrightarrow \boxed{A = \sqrt{\lambda}}$$

b)

$$\langle x\rangle = \int x|\Psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-2\lambda|x|}dx \underset{ungerader Integrand}{=} 0$$

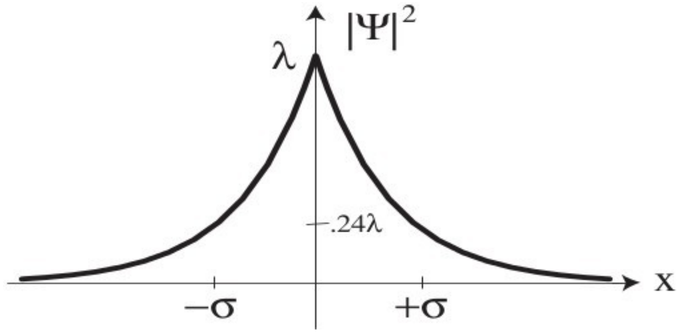
$$\langle x^2\rangle = 2|A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2\lambda x}dx = 2\lambda \left[\frac{2}{(2\lambda)^3}\right] = \boxed{\frac{1}{2\lambda^2}.}$$

c)

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{2\lambda^2} \Longrightarrow \boxed{\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}}$$

$$|\Psi(\pm\Delta x)|^2 = |A|^2 e^{-2\lambda\Delta x} = \lambda e^{-2\lambda/\sqrt{2}\lambda} = \lambda e^{-\sqrt{2}} \approx 0.2431\lambda$$

Graph:



Wahrscheinlichkeit das Teilchen außerhalb $\pm\Delta x$ anzutreffen:

$$2|A|^2 \int_{\Delta x}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 2|A|^2 \int_{\Delta}^{\infty} e^{-2\lambda x} dx = 2\lambda \left(\frac{e^{-2\lambda x}}{-2\lambda} \right) \Bigg|_{\Delta x}^{\infty} = e^{-2\lambda\Delta x} = \boxed{e^{-\sqrt{2}} = 0.2431.}$$

Aufgabe 2 **(**)** *Wir haben einen unendlichdimensionalen Hilbertraum mit einem abzählbaren Orthonormalsystem* $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, ...\}$, *dh* $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$. *Ein* kohärenter Zustand *ist definiert als*

$$|\Psi_\alpha\rangle \equiv C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

mit einer komplexen Zahl α.
Außerdem definieren wir uns den Absteigeoperator a *über*

$$a|n\rangle \equiv \sqrt{n}|n-1\rangle \;\; \forall n \geq 1 \quad \textit{und} \quad a|0\rangle \equiv 0$$

a) Bestimme C, *sodass* $|\Psi_\alpha\rangle$ *normiert ist.*

b) Zeige, dass $|\Psi_\alpha\rangle$ *Eigenzustand von* a *ist und berechne den Eigenwert.*

c) Sind kohärente Zustände $|\Psi_\alpha\rangle$ *und* $|\Psi_\beta\rangle$ *für* $\alpha \neq \beta$ *orthogonal?*

Lösung:

a)

$$1 = \langle \Psi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle = |C|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{nm}} = |C|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = |C|^2 e^{|\alpha|^2} \Longrightarrow \boxed{C = e^{-|\alpha|^2/2}}$$

b)

$$a\,|\Psi_\alpha\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}a\underbrace{|n\rangle}_{\sqrt{n}|n-1\rangle} = C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \alpha C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \alpha\,|\Psi_\alpha\rangle$$

c) Nein,

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{-|\beta|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}} = e^{-(|\alpha|^2+|\beta|^2)/2}e^{\alpha^*\beta}\neq 0$$

Aufgabe 3 **(*)** *Der Hamilton-Operator eines Zwei-Niveau-Systems sei durch*

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

gegeben. Hierbei sind $|1\rangle$ und $|2\rangle$ die orthonormierten Basiszustände. Der Parameter ϵ hat die Einheit einer Energie.

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

Lösung:

1. Um die Matrixelemente von $\hat{H}$ zu bestimmen, berechnen wir unter Ausnutzung der Orthogonalität im ersten Schritt

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

Durch Multiplikation der jeweils entsprechenden Bras erhalten wir somit die Matrixdarstellung zu

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

In der Matrixdarstellung übersetzt sich die Bestimmungsgleichung für die Eigenenergien zu $\hat{H}\vec{v} = \lambda\vec{v}$. Mit $\det(\hat{H} - \lambda I) = 0$ erhält man die zwei möglichen Messwerte für die Energie zu $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{2}\epsilon$. Durch Ausrechnen der entsprechenden Eigenvektoren

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}-1} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}+1} \\ -1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir die Eigenzustände des Hamilton-Operators.

Aufgabe 4 **(*)** *Wir benutzen einen zweidimensionalen komplexen Hilbertraum (dh. den $\mathbb{C}^2$) um ein System mit zwei Zuständen zu beschreiben. Unsere Orthonormalbasis bezeichnen wir mit $|+\rangle, |-\rangle$. Außerdem definieren wir uns die Operatoren*

$$S_x \equiv \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$$
$$S_y \equiv \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$$
$$S_z \equiv \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|)$$

a) *Zeige, dass $|+\rangle$ und $|-\rangle$ Eigenzustände von S_z sind*

b) *Zeige, dass $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$*

c) *Wie lautet die Unschärferelation für die beiden Operatoren S_x und S_y für ein System im Zustand $|+\rangle$.*

Lösung:

a)

$$S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle \underbrace{\langle +|+\rangle}_{=1} - |-\rangle \underbrace{\langle -|+\rangle}_{=0}) = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$$
$$S_z|-\rangle = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle \underbrace{\langle +|-\rangle}_{=0} - |-\rangle \underbrace{\langle -|-\rangle}_{=1}) = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle$$

b) In Matrixdarstellung

$$[S_x, S_y] = S_xS_y - S_yS_x = \frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right] =$$
$$\frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix}i & 0\\0 & -i\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}-i & 0\\0 & i\end{pmatrix}\right] = i\hbar\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = i\hbar S_z$$

c) Die Unschärferelation lautet

$$\Delta S_x \Delta S_y \geq \frac{1}{2}|\langle [S_x, S_y]\rangle_{|+\rangle}| \underset{b)}{=} \frac{\hbar}{2}|\langle +|S_z|+\rangle| = \frac{\hbar^2}{4}\langle +|\Big[|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\Big]|+\rangle = \frac{\hbar^2}{4}.$$

S_x und S_y können also nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden (Dies ist aber eine intrinsische Eigenschaft des Quantensystems und liegt nicht am Messprozess).

Aufgabe 5 (**)

a) Zeige, dass Eigenwerte von hermiteschen Operatoren reell sind.

b) Zeige, dass Eigenwerte von antihermiteschen Operatoren imaginär sind.

c) Zeige, dass Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten von hermiteschen Operatoren orthogonal sind.

Lösung:

a) Sei a ein Eigenwert von dem hermiteschen Operator A. Wir bezeichnen einen zugehörigen normierten Eigenvektor mit Ψ. Jetzt gilt

$$a = a\langle\Psi,\Psi\rangle = \langle\Psi,a\Psi\rangle = \langle\Psi,A\Psi\rangle = \langle\Psi,A^\dagger\Psi\rangle = \langle A\Psi,\Psi\rangle = \langle a\Psi,\Psi\rangle = a^*\langle\Psi,\Psi\rangle = a^*$$

Also ist a reell.

b) Analog: Sei b ein Eigenwert von dem antihermiteschen Operator B. Wir bezeichnen einen zugehörigen normierten Eigenvektor mit Ψ. Jetzt gilt

$$b = b\langle\Psi,\Psi\rangle = \langle\Psi,B\Psi\rangle = -\langle\Psi,B^\dagger\Psi\rangle = -\langle B\Psi,\Psi\rangle = -\langle b\Psi,\Psi\rangle = -b^*\langle\Psi,\Psi\rangle = -b^*$$

Also ist b rein imaginär.

c) Seien λ,μ verschiedene Eigenwerte von dem hermiteschen Operator A. Zugehörige Eigenvektoren seien respektive v,u. Dann gilt

$$\begin{aligned}(\lambda-\mu)\langle v,u\rangle &= \lambda\langle v,u\rangle - \mu\langle v,u\rangle = \langle\lambda v,u\rangle - \langle v,\mu u\rangle\\ &= \langle Av,u\rangle - \langle v,Au\rangle = \langle v,A^\dagger u\rangle - \langle v,Au\rangle = \langle v,(A^\dagger - A)u\rangle = 0\end{aligned}$$

Da aber $\lambda-\mu\neq 0$ gilt, muss $\langle\lambda|\mu\rangle = 0$ gelten.

Aufgabe 6 (*)

a) Zeige $[p,x^n] = -i\hbar n x^{n-1}$

b) Zeige mit a), dass $[p,F(x)] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x}$ *für alle* F *gilt, die als Potenzreihe ausgedrückt werden können.*

Lösung:

a) Beweis durch Induktion:

$n=1$: Das ist die bekannte kanonische Vertauschungsrelation von Ort und Impuls.

$n-1 \to n$: Nehmen wir an wir haben es für $n-1$ bereits gezeigt, dann folgt wegen

$$[p, x^n] = [p, x \cdot x^{n-1}] = x \underbrace{[p, x^{n-1}]}_{=-i\hbar(n-1)x^{n-2} \text{ nach IV}} + \underbrace{[p, x]}_{=-i\hbar} x^{n-1} = x \cdot (-i\hbar(n-1)x^{n-2}) - i\hbar x^{n-1} =$$

$$= -i\hbar n x^{n-1}$$

dass es auch für n gilt. Damit ist unsere Induktion vollständig.

b) Sei $F(x) = \sum a_n x^n$. Dann ist

$$[p, F(x)] = \sum_{n=0}^{\infty} a_n [p, x^n] \underset{a)}{=} \sum_{n=1}^{\infty} a_n(-i\hbar n x^{n-1}) = -i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1} = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x}$$

Aufgabe 7 **(*)** *Zeige für zwei hermitesche Operatoren A und B die Identität*

$$\langle i[B, A] \rangle_\Psi = 2\mathrm{Im} \langle A\Psi, B\Psi \rangle$$

Lösung:

$$\begin{aligned}
\langle i[B, A] \rangle_\Psi &= i \langle \Psi, BA\Psi \rangle - i \langle \Psi, AB\Psi \rangle \underset{A,B \text{ hermitesch}}{=} i \langle B\Psi, A\Psi \rangle - i \langle A\Psi, B\Psi \rangle \\
&= i \langle A\Psi, B\Psi \rangle^* - i \langle A\Psi, B\Psi \rangle = -i \Big[\underbrace{\langle A\Psi, B\Psi \rangle - \langle A\Psi, B\Psi \rangle^*}_{= 2i\mathrm{Im} \langle A\Psi, B\Psi \rangle} \Big] \\
&= 2\mathrm{Im} \langle A\Psi, B\Psi \rangle
\end{aligned}$$

Aufgabe 8 **(***)** *Zeige, dass kommutierende Observablen einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen haben, also simultan diagonalisierbar sind.*

Lösung:
Betrachte beliebige Observablen A und B für die gilt: $[A, B] = 0$. Für A kennen wir einen Satz Eigenfunktionen Ψ_i zu den Eigenwerten a_i.

Zunächst der Fall ohne Entartung von A(dh alle Eigenwerte von A sind verschieden):

$$AB\Psi_i \underset{AB=BA}{=} BA\Psi_i = Ba_i\Psi = a_i B\Psi_i$$

$B\Psi_i$ ist also wieder eine Eigenfunktion zum Eigenwert a_i von A. Da keine Entartung vorliegt muss $B\Psi_i$ linear abhängig von Ψ_i sein, es existiert also eine Zahl b_i, sodass $B\Psi_i = b_i\Psi_i$. Somit sind Ψ_i auch Eigenfunktionen von B.

Falls Entartung vorliegt, gilt das letzte Argument nicht. Wir können $B\Psi_i$ allerdings immer noch als Linearkombination von allen Eigenfunktionen zu a_i ausdrücken. B

lässt den Unterraum der Eigenfunktionen zum Eigenwert a_i also invariant. Auf diesem Unterraum kann B als hermitescher Operator diagonalisiert werden. Wenn wir den Schritt für jeden entarteten Eigenwert wiederholen, bekommen wir einen vollständigen Satz gemeinsamer Eigenfunktionen.

Aufgabe 9 **(**)** *Wir definieren das* Exponential *eines Operators A als*

$$e^A \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

a) *Zeige* $e^{A+B} = e^A e^B$ *für* $[A, B] = 0$. *Hinweis: Cauchy-Produkt*

b) *Zeige mit a), dass* $e^{-A}e^A = e^A e^{-A} = 1$

c) *Nun sei* $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. *Berechne*

$$e^A B e^{-A}.$$

Benutze dafür die Taylorentwicklung der operatorwertigen Funktion

$$f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$$

d) *Sei immer noch* $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. *Verwende c) um zu zeigen, dass*

$$e^B e^A = e^A e^B e^{[B,A]}$$

Lösung:

a) Der Beweis funktioniert analog zum Fall reeller Zahlen anstatt von Operatoren, also

$$e^{A+B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(A+B)^n \underset{AB=BA}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} A^k B^{n-k} = \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!} \frac{B^{n-k}}{(n-k)!}}_{\text{Cauchy Produkt}}$$

$$= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}\right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B^n}{n!}\right) = e^A e^B$$

b) Einsetzen in a) liefert

$$e^{-A}e^A = e^{-A+A} = e^0 = 1 \quad \text{und} \quad e^A e^{-A} = e^{A-A} = e^0 = 1$$

c) Es gilt

$$f'(\lambda) \underset{\text{Produktregel}}{=} e^{\lambda A} A B e^{-\lambda A} + e^{\lambda A} B(-A) e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A}$$
$$f''(\lambda) \underset{\text{Produktregel}}{=} e^{\lambda A} \underbrace{[A, [A, B]]}_{=0} e^{-\lambda A} = 0$$

Also sind alle höheren Ableitungen ebenfalls 0 und zwar für alle λ. Die Taylorreihe von $f(\lambda)$ bricht also nach dem zweiten Glied ab. Sie lautet im Punkt Null

$$f(\lambda) = f(0) + \lambda f'(0) = B + \lambda[A, B].$$

Ausgewertet in $\lambda = 1$ erhalten wir also

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B].$$

d) Wir werten $f(\lambda)$ noch einmal im Punkt $\lambda = -1$ aus. Wir erhalten

$$e^{-A} B e^A = B - [A, B] = B + [B, A]$$

Bezeichne $S \equiv e^{-A}$, dann ist $S^{-1} = e^A$. Wir haben

$$SBS^{-1} = B + [B, A].$$

Auf beide Seiten wenden wir jetzt wieder das Exponential an. Dann haben wir

$$e^{SBS^{-1}} = Se^B S^{-1} = e^{-A} e^B e^A \quad \text{und} \quad e^{B+[B,A]} = e^B e^{[B,A]}.$$

Also

$$e^{-A} e^B e^A = e^B e^{[B,A]} \quad \text{oder} \quad \boxed{e^B e^A = e^A e^B e^{[B,A]}}.$$

Aufgabe 10 **(*)** *Betrachte einen Hilbertraum der von den Eigenkets $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \ldots$ von A vollständig aufgespannt wird. Die entsprechenden Eigenwerte lauten $a_1, a_2, a_3, \ldots$. Beweise, dass*

$$\prod_n (A - a_n)$$

der Nulloperator ist.

Lösung:
Wir sehen das alle Faktoren in dem Produkt miteinander kommutieren. Anwenden von

$$\prod_n (A - a_n)$$

auf einen beliebigen Eigenket $|k\rangle$ von A liefert 0 (wende zuerst den Faktor $A - a_k$ auf $|k\rangle$ an). Jeder Vektor $|x\rangle$ kann als Linearkombination $|x\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle$ von Eigenkets dargestellt werden. Also wird auch $|x\rangle$ auf die Null abgebildet.

Aufgabe 11 **(*)** *Eine Observable A besitzt die zwei normierten Eigenzustände ψ_1 und ψ_2, mit den Eigenwerten a_1 und a_2. Die Observable B besitzt die normierten Eigenzustände ϕ_1 und ϕ_2 mit den Eigenwerten b_1 und b_2. Für die Eigenzustände gilt*

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \quad \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5$$

a) *Observable A wird gemessen und man erhält den Wert a_1. Was ist der Zustand des Systems direkt nach der Messung?*

b) *Im Anschluss wird B gemessen. Was sind die möglichen Ergebnisse und mit welcher Wahrscheinlickeit treten sie auf?*

c) *Direkt nach der Messung von B wird wieder A gemessen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit erhalten wir wieder a_1?*

Lösung:

a) Nach den Axiomen der QM befindet sich das System direkt nach der Messung im Eigenzustand vom zugehörigen Eigenwert, also in ψ_1.

b) Das System befindet sich im Zustand $\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5$. In dem Moment, wenn B gemessen wird, kollabiert dieser in einen Eigenzustand von B. Die Wahrscheinlichkeit, welchen Wert unsere Messung liefert, ist genau das Betragsquadrat des Faktor des zugehörigen Eigenzustands in der Linearkombination. Die Wahrscheinlichkeit b_1 zu messen, ist also $\left(\frac{3}{5}\right)^2$ und die Wahrscheinlichkeit b_2 zu messen, ist $\left(\frac{4}{5}\right)^2$.

c) Drücken wir die Eigenfunktionen von B in denen von A aus erhalten wir

$$\phi_1 = (3\psi_1 + 4\psi_2)/5, \quad \phi_2 = (4\psi_1 - 3\psi_2)/5.$$

Falls das System sich also in ϕ_1 befindet, beträgt die Wahrscheinlichkeit a_1 zu messen $\left(\frac{3}{5}\right)^2$. Andernfalls befindet sich das System in ϕ_2 und damit ist die Wahrscheinlichkeit a_1 zu messen gleich $\left(\frac{4}{5}\right)^2$.

Aus b) wissen wir:

Das System befindet sich mit Wahrscheinlichkeit $\left(\frac{3}{5}\right)^2$ im Zustand ϕ_1 und mit Wahrscheinlichkeit $\left(\frac{4}{5}\right)^2$ in ϕ_2. Multiplizieren der entsprechenden Wahrscheinlichkeiten entlang eines Pfades und Addieren der jeweiligen Gesamtwahrscheinlichkeiten, liefert eine Gesamtwahrscheinlichkeit a_1 zu messen von

$$\left(\frac{3}{5}\right)^2 \left(\frac{3}{5}\right)^2 + \left(\frac{4}{5}\right)^2 \left(\frac{4}{5}\right)^2 = \frac{337}{625}.$$

Aufgabe 12 **(**)** *Wir betrachten ein Teilchen in einem zeitlich konstanten Potential $V(\vec{r})$. Der Hamiltonoperator für dieses Teilchen ist dementsprechend $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\vec{r})$. Wenden Sie das Ehrenfesttheorem auf den Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ und Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ an. Kommt Ihnen etwas aus der klassischen Mechanik bekannt vor? Führen Sie hierzu im zweiten Fall eine Kraft ein. Kombinieren Sie schließlich beide Resultate.*

Lösung:
Zunächst setzen wir für den allgemein betrachteten Operator $\hat{A}$ den Ortsoperator $\hat{r}$ des Systems. Der Ortsoperator ist offenbar explizit zeitunabhängig, so dass dessen partielle Zeitableitung verschwindet. Weiterhin ist bekannt, dass der Kommutator des Impulsoperators $\hat{p}$ mit den Ortsoperator $\hat{r}$ gerade $[\hat{p}, \hat{r}] = -i\hbar$ ist. Ferner kommutiert das Potential $V(\hat{r})$ mit $\hat{r}$, da es nur vom Ortsoperator abhängt. Daher ist

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \hat{r} \rangle &= \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H}, \hat{r}] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{r}}{\partial t} \right\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \hat{r} \right] \right\rangle \\
&= \frac{i}{2m\hbar}\langle \hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}
\end{aligned}
$$

Diese Gleichung ist analog der klassischen Definition des Impulses. Darüber hinaus kann man die gleiche Rechnung für $\hat{A} = \hat{p}$ durchführen. Auch der Impulsoperator ist explizit zeitunabhängig, so dass die partielle Zeitableitung verschwindet. Zu berechnen bleibt daher noch der Kommutator des Hamiltonoperators und des Impulsoperators, was zu

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle &= \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H}, \hat{p}] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} \right\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \hat{p} \right] \right\rangle
\end{aligned}
$$

führt. Offenbar kommutiert der Impulsoperator mit sich selbst. Es bleibt also der Kommutator des Potentials $V(\hat{r})$ und des Impulsoperators $\hat{p}$ zu bestimmen. Dazu schreibt man den Impulsoperator in der Form $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ und erhält

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = \ldots &= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[V(\hat{r}), \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \right] \right\rangle \\
&= \left\langle \left[V(\hat{r}), \vec{\nabla} \right] \right\rangle = -\left\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \right\rangle = \left\langle \vec{F}(\hat{r}) \right\rangle
\end{aligned}
$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass ein Operator wie der Kommutator stets auf eine Funktion wirken muss. Nach dieser Rechnung sehen wir, dass auch dieser Fall in einer klassischen Gleichung resultiert. Kombination beider Resultate führt zu

$$m \cdot \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = m \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \right) = \left\langle \vec{F}(\hat{r}) \right\rangle ,$$

was der Forma nach genau der *Newtonschen* Bewegungsgleichung entspricht.

Anhand des Beispiels haben wir gesehen, dass die Erwartungswerte einer klassischen Bewegungsgleichung genügen. Beachtet werden muss allerdings, dass die Mittelwerte $\langle \hat{r} \rangle$ und $\langle \hat{p} \rangle$ *nicht* notwendigerweise die klassischen Trajektorien erfüllen müssen. Dazu müsste $\left\langle \vec{F}(\hat{r}) \right\rangle = \vec{F}(\langle \hat{r} \rangle)$ gelten.

Aufgabe 13 (**), Zeitentwicklungsoperator (wichtig) *Anstelle mit der Schrödinger-Gleichung kann die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes $|\psi_0\rangle$ auch durch Anwenden eines* Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}_t$ *beschrieben werden (Wir befinden uns also im Schrödinger-Bild). Leiten Sie hierzu eine Bestimmungsgleichung für $\hat{U}_t$ ab und lösen Sie explizit für ein isoliertes quantenmechanisches System, d.h. mit einem zeitunabhängigen Hamilton-Operator $\hat{H}$. Warum muss $\hat{U}_t$ stets unitär sein? Erfüllt dies ihre Lösung?*

Lösung:
Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}_t$ beschreibt die Evolution eines Anfangszustandes $|\psi_0\rangle$ von $t_0 = 0$ zu einem beliebigen Zeitpunkt t gemäß

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t \, |\psi_0\rangle \, . \tag{2}$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung führt zu

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\hat{U}_t \, |\psi_0\rangle \right) \stackrel{!}{=} \hat{H} \left(\hat{U}_t \, |\psi_0\rangle \right) . \tag{3}$$

Da die Ableitung nach der Zeit nur auf $\hat{U}_t$ wirkt und zudem die Gleichung für beliebige Anfangsbedingungen $|\psi_0\rangle$ gelten muss, erhalten wir die Bestimmungsgleichung zu

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_t = \hat{H} \hat{U}_t. \tag{4}$$

Die zugehörige Anfangsbedingung an $\hat{U}_t$ zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ ist $\hat{U}_0 = \mathbb{1}$, d.h. die Identitätsabbildung.

Schränken wir uns nun auf einen zeitunabhängigen Fall ($\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0$) ein, so erinnern wir uns an die Lösung im eindimensionalen Fall und können völlig analog schreiben

$$\hat{U}_t = e^{-i\hat{H} \cdot t/\hbar}, \tag{5}$$

wobei wir das in der Vorlesung definierte Operatorexponential verwendet haben.

Die Forderung nach Unitarität ist leicht einsehbar, wenn man bedenkt, dass die Normierungsbedingung für beliebige Zeiten gelten muss, was zu

$$1 \stackrel{!}{=} \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{U}_t^\dagger \hat{U}_t|\psi(t)\rangle \tag{6}$$

führt. Da dies für beliebige Anfangszustände gelten muss, folgt sofort, dass $\hat{U}_t^\dagger \hat{U}_t = \mathbb{1}$ gelten muss.

Gleichung (5) erfüllt dies, da der Hamilton-Operator $\hat{H}$ hermitesch sein muss und damit $e^{-i\hat{H}\cdot t/\hbar}$ unitär ist (vgl. Vorlesung).