Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 6

Präsenzübungen

Aufgabe 1:

(a) Es ist

$$\begin{aligned}&||\alpha+\beta||^2+||\alpha-\beta||^2=\langle\alpha+\beta|\alpha+\beta\rangle+\langle\alpha-\beta|\alpha-\beta\rangle\\&=\langle\alpha|\alpha\rangle+\langle\alpha|\beta\rangle+\langle\beta|\alpha\rangle+\langle\beta|\beta\rangle+\langle\alpha|\alpha\rangle-\langle\alpha|\beta\rangle-\langle\beta|\alpha\rangle+\langle\beta|\beta\rangle\\&=2\langle\alpha|\alpha\rangle+2\langle\beta|\beta\rangle=2||\alpha||^2+2||\beta||^2.\end{aligned}\tag{1}$$

(b) Zerlege $|\beta\rangle$ in eine parallele und eine senkrechte Komponente relativ zu $|\alpha\rangle$: Die parallele Komponente ist

$$\frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle}=:z\,|\alpha\rangle.\tag{2}$$

Die senkrechte Komponente ist

$$\left(|\beta\rangle-\frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle}\right)=:|\gamma\rangle.\tag{3}$$

Man sieht, dass

$$\langle\alpha|\gamma\rangle=0\ ,\tag{4}$$

$$|\beta\rangle=z|\alpha\rangle+|\gamma\rangle\ .\tag{5}$$

Damit bilden wir

$$\begin{aligned}||\beta||^2&=||z\alpha+\gamma||^2=\langle z\alpha+\gamma|z\alpha+\gamma\rangle\\&=|z|^2\langle\alpha|\alpha\rangle+\langle\gamma|\gamma\rangle+z^*\langle\alpha|\gamma\rangle+z\langle\gamma|\alpha\rangle\\&=\frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{||\alpha||^2}+||\gamma||^2\geq\frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{||\alpha||^2}\ .\end{aligned}\tag{6}$$

Es folgt

$$\big|\langle\alpha|\beta\rangle\big|\leq||\alpha||\,||\beta||\ .\tag{7}$$

(c) Zu zeigen:

$$\big|\,||\alpha||-||\beta||\,\big|\leq||\alpha+\beta||\leq||\alpha||+||\beta||.\tag{8}$$

1. Behauptung:

$$\big|\,||\alpha||-||\beta||\,\big|\leq||\alpha+\beta||\tag{9}$$

$$\Leftrightarrow\quad ||\alpha||^2-2||\alpha||\,||\beta||+||\beta||^2\leq||\alpha+\beta||^2.\tag{10}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}||\alpha+\beta||^2&=\langle\alpha+\beta|\alpha+\beta\rangle=||\alpha||^2+||\beta||^2+\langle\alpha|\beta\rangle+\langle\beta|\alpha\rangle\\&=||\alpha||^2+||\beta||^2+2\,\mathrm{Re}\,\langle\alpha|\beta\rangle\geq||\alpha||^2+||\beta||^2-2|\langle\alpha|\beta\rangle|\\&\geq||\alpha||^2+||\beta||^2-2||\alpha||\,||\beta||\qquad\text{q.e.d.}\end{aligned}\tag{11}$$

$\uparrow$ Schwarzsche Ungleichung

2. Behauptung:

$$
\begin{aligned}
&& ||\alpha+\beta|| \le ||\alpha|| + ||\beta|| && (12)\\
\Leftrightarrow && ||\alpha+\beta||^2 \le ||\alpha||^2 + ||\beta||^2 + 2||\alpha||\,||\beta||. && (13)
\end{aligned}
$$

Beweis:

$$
\begin{aligned}
||\alpha+\beta||^2 &= ||\alpha||^2 + ||\beta||^2 + 2\,\mathrm{Re}\,\langle\alpha|\beta\rangle \le ||\alpha||^2 + ||\beta||^2 + 2|\langle\alpha|\beta\rangle| \\
&\le ||\alpha||^2 + ||\beta||^2 + 2||\alpha||\,||\beta|| \qquad \text{q.e.d.} \qquad (14)\\
&\uparrow \text{Schwarzsche Ungleichung}
\end{aligned}
$$

Aufgabe 2:

(a) Es gilt

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{p}|\varphi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}\,\varphi(x) \\
&= \left[-\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}\,\varphi^*(x)\right)\psi(x)\right]^* \\
&\overset{\text{partiell}}{=} \left[+\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\varphi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}\,\psi(x)\right]^* \qquad (15)\\
&\qquad \text{(der Randterm verschwindet wegen Quadratintegrabilität)} \\
&= \langle\varphi|\hat{p}|\psi\rangle^*. \qquad (16)
\end{aligned}
$$

(b) Untersuche den Definitionsbereich des adjungierten Operators $\hat{p}^\dagger$:

$$
\begin{aligned}
D_{\hat{p}^\dagger} &= \left\{\varphi \in L_2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \langle\varphi|\hat{p}|\psi\rangle \text{ existiert für alle } \psi \in D_{\hat{p}}\right\} \qquad (17)\\
&= \left\{\varphi \in L_2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\varphi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}\,\psi(x) \text{ existiert für alle } \psi \in D_{\hat{p}}\right\}. \qquad (18)
\end{aligned}
$$

Zu zeigen: Es existiert ein $\varphi \in D_{\hat{p}^\dagger}$ mit $\varphi \notin D_{\hat{p}}$, so dass $\hat{p}^\dagger \neq \hat{p}$.

Lösung: Betrachte $\varphi(x) = \varphi_0\, e^{-|x|/l}$. Die Funktion φ ist nicht stetig differenzierbar bei $x = 0$, daher ist $\varphi \notin D_{\hat{p}}$. Andererseits gilt

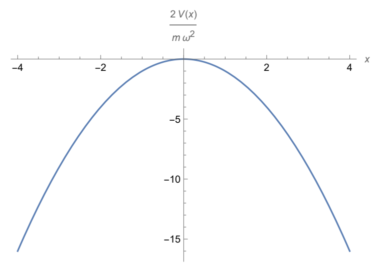
$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\varphi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}\,\psi(x) &= \varphi_0^*\,\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-|x|/l}\,\frac{d}{dx}\,\psi(x) \qquad (19)\\
&= \varphi_0^*\,\frac{\hbar}{i}\left[\int_{-\infty}^{0} dx\, e^{x/l}\,\psi'(x) + \int_{0}^{\infty} dx\, e^{-x/l}\,\psi'(x)\right] \\
&\overset{\text{partiell}}{=} \varphi_0^*\,\frac{\hbar}{i}\Bigg[e^{x/l}\,\psi(x)\Big|_{-\infty}^{0} - \int_{-\infty}^{0} dx\,\frac{1}{l}\,e^{x/l}\,\psi(x) \\
&\qquad + e^{-x/l}\,\psi(x)\Big|_{0}^{\infty} + \int_{0}^{\infty} dx\,\frac{1}{l}\,e^{-x/l}\,\psi(x)\Bigg] \\
&= \varphi_0^*\,\frac{\hbar}{i}\left[\cancel{\psi(0)} - \cancel{\psi(0)} + \frac{1}{l}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\mathrm{sgn}(x)\, e^{-|x|/l}\,\psi(x)\right]. \qquad (20)
\end{aligned}
$$

Nun ist $\psi \in L_2(\mathbb{R})$, woraus folgt, dass $\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi(x)|^2$ existiert. Also fällt $|\psi(x)|^2$ für $x \to \pm\infty$ schneller als $1/x$ ab. Also fällt $|\psi(x)|$ für $x \to \pm\infty$ schneller als $1/\sqrt{x}$ ab. Es folgt, dass das Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\mathrm{sgn}(x)\, e^{-|x|/l}\,\psi(x)$ existiert und damit $\varphi \in D_{\hat{p}^\dagger}$.

Hausaufgaben

Aufgabe 3:

(a) Das Potential hat folgende Form:



Das Spektrum ist kontinuierlich für alle E und zweifach entartet.

(b) Die zeitunanhängige Schrödinger-Gleichung für den inversen harmonischen Oszillator ist gegeben durch

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{21}$$

Durch die Variablen-Substitutionen $\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $K := \frac{2E}{\hbar\omega}$ erhalten wir für die Schrödinger-Gleichung:

$$\psi''(\xi) = -(\xi^2 + K)\psi(\xi) \tag{22}$$

Für große $|\xi|$ lautet die Gleichung:

$$\psi''(\xi) = -\xi^2\psi(\xi) \tag{23}$$

mit der assymptotischen Gleichung:

$$\psi(\xi) = Ae^{-i\xi^2/2} + Be^{+i\xi^2/2} = Ah(\xi)e^{-i\xi^2/2} + Bg(\xi)e^{+i\xi^2/2} \tag{24}$$

Der Faktor $\exp(\pm i\xi^2/2)$ kann abgespaltet werden. Die Phase rotiert für große x immer schneller, da die kinetische Energie divergiert, aber dieser Faktor ist offensichtlich beschränkt. Mit

$$\psi' = (h' - i\xi h)Ae^{-i\xi^2/2} + (g' + i\xi g)Be^{+i\xi^2/2} \tag{25}$$

$$\psi'' = (h'' - 2i\xi h' - (\xi^2 + i)h)Ae^{-i\xi^2/2} + (g'' + 2i\xi g' - (\xi^2 - i)g)Be^{+i\xi^2/2} \tag{26}$$

finden wir

$$0 = \underbrace{(h'' - 2i\xi h' + (K - i)h)}_{=0}Ae^{-i\xi^2/2} + \underbrace{(g'' + 2i\xi g' + (K + i)g)}_{=0}Be^{+i\xi^2/2}\,. \tag{27}$$

Jeder Vorfaktor muss individuell null sein damit die Gleicung erfüllt ist. Mit

$$h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j\,, \qquad g(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j\xi^j \tag{28}$$

$$h'(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} ja_j\xi^{j-1}\,, \qquad g'(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} jb_j\xi^{j-1} \tag{29}$$

$$h''(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j\,, \qquad g''(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)(j+2)b_{j+2}\xi^j \tag{30}$$

erhalten wir für den ersten Vorfaktor

$$\sum_{j=0}^{\infty}[(j+1)(j+2)a_{j+2} - i2ja_j + (K - i)a_j]\xi^j = 0\,. \tag{31}$$

Diese Gleichung muss für alle Summanden gelten. Daher gilt

$$[(j+1)(j+2)a_{j+2} - i2ja_j + (K-i)a_j] = 0 \tag{32}$$

$$\Rightarrow a_{j+2} = \frac{i(2j+1) - K}{(j+1)(j+2)} a_j \tag{33}$$

Für den zweiten Vorfaktor finden wir

$$[(j+1)(j+2)b_{j+2} + i2jb_j + (K+i)b_j] = 0 \tag{34}$$

$$\Rightarrow b_{j+2} = -\frac{i(2j+1) + K}{(j+1)(j+2)} b_j \tag{35}$$

Damit ψ beschränkt ist, muss die Summe über j abbrechen. Dies ist beim harmonischen Oszillator der Fall, wenn die Iteration abbrechenkann. Hier, im Fall des inversen harmonischen Oszillators ist dies nicht möglich, da beide Gleichungen

$$i(2j+1) - K = 0 \tag{36}$$

und

$$i(2j+1) + K = 0 \tag{37}$$

keine Lösung haben, da es sich bei j um positive, ganze Zahlen handelt. Die Wellenfunktion ist damit nicht beschränkt.

Dies bedeutet, dass für $x \to \infty$ assymptotisch keine ebene Welle existiert, da das Potential assymptotisch nicht konstant ist.

Aufgabe 4:

(a) Lösung 1: Es ist

$$H = -b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{38}$$

Die Eigenvektoren und Eigenwerte sind, siehe Aufgabe 4 von Blatt 5,

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \lambda_1 = -b, \tag{39}$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \lambda_2 = +b. \tag{40}$$

Die Zeitentwicklung der Eigenvektoren ist

$$U(t,t_0)\,|v_1\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}\,|v_1\rangle = e^{-i\lambda_1(t-t_0)/\hbar}\,|v_1\rangle = e^{ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_1\rangle, \tag{41}$$

$$U(t,t_0)\,|v_2\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}\,|v_2\rangle = e^{-i\lambda_2(t-t_0)/\hbar}\,|v_2\rangle = e^{-ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_2\rangle. \tag{42}$$

Ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle$ ist Linearkombination der Eigenvektoren,

$$|\varphi\rangle = |v_1\rangle\langle v_1|\varphi\rangle + |v_2\rangle\langle v_2|\varphi\rangle. \tag{43}$$

Die Zeitentwicklung des beliebigen Vektors $|\varphi\rangle$ ist daher

$$U(t,t_0)\,|\varphi\rangle = e^{ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_1\rangle\langle v_1|\varphi\rangle + e^{-ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_2\rangle\langle v_2|\varphi\rangle. \tag{44}$$

Es folgt

$$U(t,t_0) = e^{ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_1\rangle\langle v_1| + e^{-ib(t-t_0)/\hbar}\,|v_2\rangle\langle v_2|. \tag{45}$$

Die Matrixdarstellung der Projektionsoperatoren $|v_1\rangle\langle v_1|$ und $|v_2\rangle\langle v_2|$ ist das äußere (dyadische) Produkt

$$|v_1\rangle\langle v_1| = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad |v_2\rangle\langle v_2| = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}. \tag{46}$$

Die Matrixform des Zeitentwicklungsoperators ist daher

$$U(t-t_0) = \begin{pmatrix} \cos(b(t-t_0)/\hbar) & i\sin(b(t-t_0)/\hbar) \\ i\sin(b(t-t_0)/\hbar) & \cos(b(t-t_0)/\hbar) \end{pmatrix}. \tag{47}$$

<u>Lösung 2</u>: Man kann die Taylor-Reihe des Zeitentwicklungsoperators $U(t-t_0) = \exp\left[-iH\hbar(t-t_0)\right]$ direkt bestimmen. Die Potenzen der Matrix σ_x sind σ_x selbst oder die Einheitsmatrix:

$$\sigma_x^{2n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}, \tag{48}$$

$$\sigma_x^{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x. \tag{49}$$

Die Taylor-Reihe lautet

$$\begin{aligned} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-iH(t-t_0)/\hbar\right]^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(ib(t-t_0)/\hbar\right)^n \sigma_x^n \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (-1)^n \left[b(t-t_0)/\hbar\right]^{2n}}_{\cos(b(t-t_0)/\hbar)} \\ &\quad + i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (-1)^n \left[b(t-t_0)/\hbar\right]^{2n+1}}_{\sin(b(t-t_0)/\hbar)} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(b(t-t_0)/\hbar) & i\sin(b(t-t_0)/\hbar) \\ i\sin(b(t-t_0)/\hbar) & \cos(b(t-t_0)/\hbar) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{50}$$

(b) Für

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{51}$$

ist

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ i\sin(bt/\hbar) \end{pmatrix}. \tag{52}$$

Damit sind die gesuchten Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|\,\sigma_x\,|\psi(t)\rangle &= (\cos(bt/\hbar), -i\sin(bt/\hbar)) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ i\sin(bt/\hbar) \end{pmatrix} = i\cos\frac{bt}{\hbar}\sin\frac{bt}{\hbar} - i\cos\frac{bt}{\hbar}\sin\frac{bt}{\hbar} \\ &= 0, \end{aligned} \tag{53}$$

$$\langle\psi(t)|\,\sigma_y\,|\psi(t)\rangle = (\cos(bt/\hbar), -i\sin(bt/\hbar)) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ i\sin(bt/\hbar) \end{pmatrix} = 2\cos\frac{bt}{\hbar}\sin\frac{bt}{\hbar} = \sin\frac{2bt}{\hbar}, \tag{54}$$

$$\langle\psi(t)|\,\sigma_z\,|\psi(t)\rangle = (\cos(bt/\hbar), -i\sin(bt/\hbar)) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ i\sin(bt/\hbar) \end{pmatrix} = \cos^2\frac{bt}{\hbar} - \sin^2\frac{bt}{\hbar} = \cos\frac{2bt}{\hbar}. \tag{55}$$

Der „Spin“ $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ führt eine gleichförmige Rotation um die x-Achse aus.

(c) Für

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{56}$$

ist

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) + i\sin(bt/\hbar) \\ \cos(bt/\hbar) + i\sin(bt/\hbar) \end{pmatrix} = e^{ibt/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{ibt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \tag{57}$$

$|\psi(0)\rangle$ ist ein Eigenvektor von H! Daher besteht die Zeitentwicklung nur aus einem Phasenfaktor. Erwartungswerte sich daher zeitunabhängig.