Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 07

Klausur 1 - Lösungen

Stilianos Louca

10. Juni 2008

Aufgabe 01

Die Matrixdarstellung von A ist definitionsgemäß gegeben durch

$$A_{ij} = \langle i| A |j\rangle = \langle i| \sum_{n=1}^{N} |n\rangle \langle n+1| \, |j\rangle = \sum_{n=1}^{N} \langle i| \, |n\rangle \langle n+1| \, |j\rangle = \sum_{n=1}^{N} \langle i \, |n\rangle \langle n+1 \, |j\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^{N-1} \delta_{in}\delta_{j,n+1} + \delta_{iN}\delta_{j,1} = \begin{cases} \delta_{j,i+1} & : i < N \\ \delta_{j,1} & : i = N \end{cases}$$

$$\rightarrow \; (A_{ij}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Aus der linearen Algebra ist bekannt, eine Matrix (bzw. ein Operator mit der entsprechenden Matrix) ist genau dann unitär wenn seine Spalten eine Orthonormalbasis in $\mathbb{C}^N$ bilden. dies ist der Fall, den die Spalten von $A(_{ij})$ bilden genau die Standardbasis $e_N, e_2, .., e_{N-1}$.

Variante: Der zu A adjungierte Operator $A^\dagger$ ist gegeben durch

$$A^\dagger = \left(\sum_{n=1}^{n} |n\rangle \langle n+1| \right)^\dagger = \sum_{n=1}^{N} (|n\rangle \langle n+1|)^\dagger = \sum_{n=1}^{N} |n+1\rangle \langle n|$$

so dass folgt

$$A \circ A^\dagger = \left(\sum_{n=1}^{N} |n\rangle \langle n+1| \right) \circ \left(\sum_{m=1}^{N} |m+1\rangle \langle m| \right) = \sum_{n,m=1}^{N} |n\rangle \underbrace{\langle n+1 \, |m+1\rangle}_{\delta_{n+1,m+1}=\delta_{n,m}} \langle m| = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle \langle n| = \mathrm{Id}$$

Bekanntlich ist für Endomorphismen jedes rechts-Inverses auch links-Inverses, so dass $A^\dagger = A^{-1}$ ist, das heißt A ist unitär.

Eigenwerte

Für $N = 3$ ist die Matrix von A gegeben durch

$$A \sim \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

so dass sich das charakteristische Polynom p_A von A ergibt als

$$p_A(X) = \det(X\,\mathrm{Id} - A) = \det \begin{pmatrix} X & -1 & 0 \\ 0 & X & -1 \\ -1 & 0 & X \end{pmatrix} = X^3 - 1$$

Die Eigenwerte λ von A sind genau die Nullstellen von p_A, das heißt

$$\lambda^3 = 1 \;\rightarrow\; \lambda = e^{i\frac{2\pi k}{3}},\; k = 0,1,2 \;\rightarrow\; \lambda \in \left\{1, -\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right\}$$

Aufgabe 02

Betrachten zuerst eine Potentialbarriere der Art

$$V(x) = \Theta(x)\Theta(x-\varepsilon)\frac{V_0}{\varepsilon}$$

und die dem Problem entsprechende Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + \Theta(x)\Theta(x-\varepsilon)\frac{V_0}{\varepsilon}$$

Machen den Ansatz

$$\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

gehen damit in die DGL ein und erhalten das Eigenwertproblem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi(x) + V(x)\psi(x) = E\varphi(x)$$

Im negativen Halbraum $x \in (-\infty, 0)$ vereinfacht sich dieses zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi(x) = E\varphi(x)$$

dessen allgemeine Lösung gegeben ist durch

$$\varphi_1(x) = A_1e^{i\Omega x} + B_1e^{-i\Omega x} \quad,\; A_1, B_1 \in \mathbb{C}\;,\; \Omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow\; \psi_1(x,t) = A_1e^{i\left(\Omega x - \frac{E}{\hbar}t\right)} + B_1e^{-i\left(\Omega x + \frac{E}{\hbar}\right)}$$

Analog ergibt sich auch in (ε, ∞) die allgemeine Lösung als

$$\varphi_3(x) = A_3e^{i\Omega x} + B_3e^{-i\Omega x} \quad,\; A_3, B_3 \in \mathbb{C}$$

$$\rightarrow\; \psi_3(x,t) = A_3e^{i\left(\Omega x - \frac{E}{\hbar}t\right)} + B_3e^{-i\left(\Omega x + \frac{E}{\hbar}\right)}$$

Innerhalb des Intervalls $(0, \varepsilon)$ ergibt sich das Problem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) + \frac{V_0}{\varepsilon}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

dessen allgemeine Lösung sich ergibt als

$$\varphi_2(x) = A_2e^{\gamma x} + B_2e^{-\gamma x} \quad,\; A_2, B_2 \in \mathbb{C},\; \gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{\varepsilon} - E\right)} \in \mathbb{R}$$

wobei schon ε genügend klein gesetzt wurde dass $\frac{V_0}{\varepsilon} - E > 0$ ist.
Im Halbraum (ε, ∞) kann sich das Teilchen nur nach rechts bewegen, das heißt $B_3 = 0$. Fordern wir die Stetigkeit der 0. und 1. Ableitung von $\varphi(x)$ in ganz $\mathbb{R}$ so ergibt sich

$$\varphi_1(0) \stackrel{!}{=} \varphi_2(0) \ \rightarrow \ A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\partial_x \varphi_1(0) \stackrel{!}{=} \partial_x \varphi_2(0) \ \rightarrow \ i\Omega(A_1 - B_1) = \gamma(A_2 - B_2)$$

$$\varphi_2(\varepsilon) \stackrel{!}{=} \varphi_3(\varepsilon) \ \rightarrow \ A_2 e^{\gamma\varepsilon} + B_2 e^{-\gamma\varepsilon} = A_3 e^{i\Omega\varepsilon}$$

$$\partial_x \varphi_2(\varepsilon) \stackrel{!}{=} \partial_x \varphi_3(\varepsilon) \ \rightarrow \ \gamma \left[A_2 e^{\gamma\varepsilon} - B_2 e^{-\gamma\varepsilon} \right] = i\Omega A_3 e^{i\Omega\varepsilon}$$

Durch algebraische Manipulation ergibt sich

$$A_2 = \frac{i\Omega(A_1 - B_1) + \gamma(A_1 + B_1)}{2\gamma}$$

$$B_2 = \frac{\gamma(A_1 + B_1) - i\Omega(A_1 - B_1)}{2\gamma}$$

$$A_2 = \frac{i\gamma - \Omega}{i\gamma + \Omega} \cdot e^{-2\varepsilon\gamma} \cdot B_2$$

$$\rightarrow \ B_1 = \frac{i\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)\left(e^{-2\varepsilon\gamma} - 1\right) \cdot A_1}{i\left(\Omega^2 - \gamma^2\right)\left(e^{-2\varepsilon\gamma} - 1\right) + 2\gamma\Omega\left(e^{-2\varepsilon\gamma} + 1\right)}$$

$$\rightarrow \ A_3 = \frac{4\Omega\gamma e^{-i\Omega\varepsilon} \cdot A_1}{i\left(\Omega^2 - \gamma^2\right)\left(e^{-\varepsilon\gamma} - e^{\varepsilon\gamma}\right) + 2\gamma\Omega\left(e^{\varepsilon\gamma} + e^{-\varepsilon\gamma}\right)}$$

Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist gegeben durch das Verhältnis der Wahrscheinlichkeitsdichten der reflektierten und aufprallenden Welle, gemäß

$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \frac{\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)^2 \left(e^{-\varepsilon\gamma} - e^{\varepsilon\gamma}\right)^2}{\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)^2 \left(e^{-\varepsilon\gamma} - e^{\varepsilon\gamma}\right)^2 + 16\gamma^2\Omega^2} = \frac{\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)^2 \sinh^2(\varepsilon\gamma)}{\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)^2 \sinh^2(\varepsilon\gamma) + 4\gamma^2\Omega^2}$$

Analog ergibt sich dann die Transmissionswahrscheinlichkeit gemäß

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4\Omega^2\gamma^2}{\left(\Omega^2 + \gamma^2\right)^2 \sinh^2(\varepsilon\gamma) + 4\gamma^2\Omega^2}$$

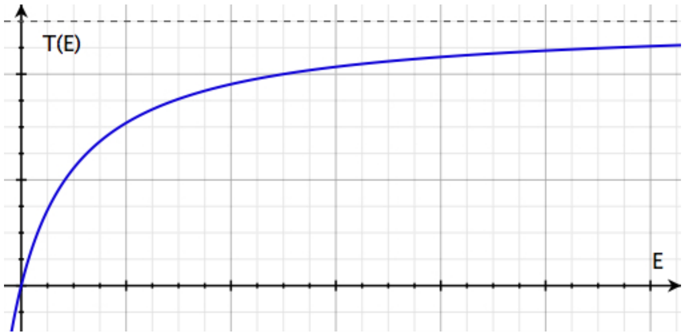
wobei zu erkenn ist dass $T + R = 1$. Ersetzen wir $\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{\varepsilon} - E\right)}$ und $\Omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ so erhalten wir den Transmissionskoeffizienten

$$T = \frac{4E\left(\frac{V_0}{\varepsilon} - E\right)}{\frac{V_0^2}{\varepsilon^2} \sinh^2\left(\varepsilon\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{\varepsilon} - E\right)}\right) + 4E\left(\frac{V_0}{\varepsilon} - E\right)}$$

Lassen wir nun $\varepsilon \to 0$ gehen, so geht der Potentialwall in die Form $V_0\delta(x)$ über, und wir erhalten mit Hilfe der L'Hopitalschen Regel:

$$T \xrightarrow{\varepsilon \to 0} \frac{4EV_0}{\frac{2mV_0^3}{\hbar^2} + 4EV_0}$$

Dieser Zusammenhang wird unten qualitativ $(E = V)$ illustriert:



Zu erkennen ist das asymptotische Verhalten für $E \to \infty$, wo $T \to 1$ geht.

Aufgabe 03

Beginnen mit dem Ehrenfestschen Theorem für Operatoren A und die Schrödingergleichung erfüllende Zustände ψ:

$$\partial_t \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \langle \partial_t A \rangle$$

und der aus Aufgabe 05 bekannten Identität $[H, X] = -\frac{i\hbar}{m} P$ und schreiben

$$m\partial_t (\Delta X)^2 = m\partial_t \left\langle (X - \langle X \rangle)^2 \right\rangle = \frac{im}{\hbar} \left\langle \left[H, (X - \langle X \rangle)^2\right] \right\rangle + \underbrace{\left\langle \partial_t (X - \langle X \rangle)^2 \right\rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t X = 0}}$$

$$= \frac{im}{\hbar} \left\langle \left[H, X^2 - 2 \langle X \rangle X + \langle X \rangle^2\right] \right\rangle = \frac{im}{\hbar} \left\langle [H, X]X + X[H, X] - 2 \langle X \rangle [H, X] + \langle X \rangle^2 [H, \mathrm{Id}] \right\rangle$$

$$\overset{[H,\mathrm{Id}]=0}{=} \frac{im}{\hbar} \left\langle -\frac{i\hbar}{m} PX - \frac{i\hbar}{m} XP + 2 \langle X \rangle \frac{i\hbar}{m} P \right\rangle = \langle PX + XP \rangle - \langle 2 \langle X \rangle P \rangle = \langle PX + XP \rangle - 2 \langle X \rangle \langle P \rangle \quad \square$$

Aufgabe 04

Beginnen mit der Schrödingergleichung für ein Teilchen im Potential $V(\vec{r})$:

$$i\hbar\partial_t \psi = \mathcal{H}\psi \quad , \quad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

Wegen

$$\mathcal{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar\partial_t \psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \psi(\vec{r}, t)$$

und

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2}\partial_r \left(r^2 \partial_r \psi\right) = \left[\frac{r^2}{a^4} - \frac{3}{a^2}\right] \cdot \psi$$

ergibt sich

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \cdot \left[\mathcal{H}\psi(\vec{r}, t) + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t)\right] = \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{r^2}{a^4} - \frac{3}{a^2}\right] = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left[\frac{r^2}{2a^2} - 1\right]$$

Aufgabe 05

Beginnen mit

$$[H,X] = HX - XH = \frac{P^2X}{2m} + VX - \frac{XP^2}{2m} - \underbrace{XV}_{VX} = -\frac{1}{2m}\left[X,P^2\right] = -\frac{1}{2m}\underbrace{[X,P]}_{i\hbar}P - \frac{1}{2m}P\underbrace{[X,P]}_{i\hbar} = -\frac{i\hbar}{m}P$$

und schreiben

$$\langle n'|\,P\,|n\rangle = \frac{im}{\hbar}\langle n'|\,[H,X]\,|n\rangle = \frac{im}{\hbar}\langle n'|\,HX - XH\,|n\rangle = \frac{im}{\hbar}\left\langle H^\dagger n'\right|X\,|n\rangle - \frac{im}{\hbar}\langle n'|\,X\,|Hn\rangle$$

$$\overset{H=H^\dagger}{=} \frac{im}{\hbar}\langle E_{n'}n'|\,X\,|n\rangle - \frac{im}{\hbar}\langle n'|\,X\,|E_n n\rangle = \frac{im}{\hbar}\left(\overline{E_{n'}} - E_n\right)\langle n'|\,X\,|n\rangle \overset{E_{n'}\in\mathbb{R}}{=} \frac{im}{\hbar}\left(E_{n'} - E_n\right)\langle n'|\,X\,|n\rangle$$

Schließlich verwenden wir die Vollständigkeit der $|n\rangle$

$$\sum_{n'} |n'\rangle\langle n'| = \mathrm{Id}$$

und erhalten

$$\frac{\hbar^2}{m^2}\langle n|\,P^2\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle n|\,P\,\mathrm{Id}\,P\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle n|\,P\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|\,P\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{n'}\langle n|\,P\,|n'\rangle\langle n'|\,P\,|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{n'}\left(\frac{im}{\hbar}\right)^2 (E_n - E_{n'})\langle n|\,X\,|n'\rangle (E_{n'} - E_n)\langle n'|\,X\,|n\rangle = \sum_{n'}(E_{n'} - E_n)^2\,\overline{\langle n'|\,X^\dagger\,|n\rangle}\,\langle n'|\,X\,|n\rangle$$

$$\overset{X^\dagger=X}{=} \sum_{n'}(E_{n'} - E_n)^2\,\overline{\langle n'|\,X\,|n\rangle}\,\langle n'|\,X\,|n\rangle = \sum_{n'}(E_{n'} - E_n)^2\,\left|\langle n'|\,X\,|n\rangle\right|^2 \quad \square$$

Aufgabe 06

Seien

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} A^1 \\ A^2 \\ A^3 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^3,\ \vec{B} = \begin{pmatrix} B^1 \\ B^2 \\ B^3 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^3$$

beliebige Vektoren und

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix}$$

Dann ist

$$\vec{A}\cdot\vec{B}\,\mathrm{Id} + i\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)\cdot\sigma = A^iB^i\,\mathrm{Id} + i\left(A^iB^j\varepsilon_{ijk}\vec{e}_k\right)\cdot\sigma = A^iB^i\,\mathrm{Id} + \frac{1}{2}A^iB^j\underbrace{2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k}_{\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i}$$

$$= A^iB^i\,\mathrm{Id} + \frac{1}{2}A^iB^j\sigma_i\sigma_j - \frac{1}{2}A^iB^j\cdot\underbrace{\sigma_j\sigma_i}_{2\delta_{ij}\,\mathrm{Id} - \sigma_i\sigma_j} = A^iB^i\,\mathrm{Id} + A^iB^j\sigma_i\sigma_j - \underbrace{A^iB^j\delta_{ij}}_{A^iB^i}\mathrm{Id} = A^iB^j\sigma_i\sigma_j$$

$$= \left(A^i\sigma_i\right)\cdot\left(B^j\sigma_j\right) = \left(\vec{A}\cdot\vec{\sigma}\right)\cdot\left(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\right) \quad \square$$

Aufgabe 07

Beginnen mit dem Ansatz

$$\psi(t) = e^{-i\mathcal{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0)$$

gehen damit in die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \mathcal{H}\psi$$

ein

$$i\hbar\partial_t\psi(t) = i\hbar \cdot \left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\right) \underbrace{e^{-i\mathcal{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0)}_{\psi(t)} = \mathcal{H}\psi(t)$$

und sehen dass der Ansatz tatsächlich korrekt war.

Evolution des Systems

Bei einem an einem Zeitpunkt τ vorgegebenem Zustand $\psi(\tau)$ entwickelt sich das System gemäß der Vorschrift

$$i\hbar\partial_t\psi(t) = \mathcal{H}\psi(t)$$

Nach dem Picard-Lindelöf Theorem ist diese Entwicklung eindeutig, das heißt es existiert unter obiger Voraussetzung genau eine Lösung. Wir haben gesehen dass

$$\psi(t) = \exp\left\{-i\frac{(t-\tau)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\psi(\tau)\ ,\ t \geq \tau$$

solch eine Lösung, und somit auch die einzige ist. Wird nun am Zeitpunkt t_1 der Wert a_n für die Observable A gemessen, so ist dieser Notwendigerweise ein Eigenwert von A. Genau an dem Zeitpunkt kollabiert die Wellenfunktion ψ und geht in den Zustand

$$\frac{P_n\psi(t_1)}{\sqrt{\langle\psi(t_1)|\, P_n\, |\psi_n(t_1)\rangle}}$$

über, wobei P_n genau der (eindeutig bestimmte) Orthogonalprojektor auf den Eigenraum $E_{a_n}(A)$ von A zum Eigenwert a_n ist.

Bemerke: Bilden die Eigenvektoren $\psi_n^i,\ i \in I$ eine Orthonormalbasis des Eigenraums $E_{a_n}(A)$ so ist P_n gegeben durch

$$P_n = \sum_{i\in I} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i|$$

Ohne weitere Einflüsse, entwickelt sich nun das System erneut gemäß $i\hbar\partial_t\psi = \mathcal{H}\psi$ weiter. Nach obiger Überlegung ist dann der Zustand für $t_2 > t_1$ gegeben durch

$$\psi(t_2) = \exp\left\{-i\frac{(t_2-t_1)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\frac{P_n\psi(t_1)}{\sqrt{\langle\psi(t_1)|\, P_n\, |\psi_n(t_1)\rangle}}$$

$$= \exp\left\{-i\frac{(t_2-t_1)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\frac{P_n\exp\left\{-i\frac{(t_1-t_0)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\psi(t_0)}{\sqrt{\left\langle\exp\left\{-i\frac{(t_1-t_0)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\psi(t_0)\middle|\, P_n\,\middle|\exp\left\{-i\frac{(t_1-t_0)}{\hbar}\mathcal{H}\right\}\psi_n(t_0)\right\rangle}}$$