Quantenmechanik I

FSU Jena - WS 07/08

Klausur 1 - Lösungen

Stilianos Louca

3. Juni 2008

Aufgabe 01

Es ist

$$\exp(i[A,B])^\dagger = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i[A,B])^n}{n!}\right]^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{((i[A,B])^n)^\dagger}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left((i[A,B])^\dagger\right)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i[A,B]^\dagger)^n}{n!}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\left[B^\dagger, A^\dagger\right]\right)^n}{n!} \overset{A,B}{\underset{\text{hermitesch}}{=}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i[B,A])^n}{n!} = \exp\left(-i[B,A]\right) \overset{[A,B]=-[B,A]}{=} \exp\left(i[A,B]\right)$$

das heißt $\mathscr{E} := \exp(i[A,B])$ ist hermitesch. Betrachten wir nun einen beliebigen Zustand ψ so ist

$$\langle [A,B]\rangle = \langle\psi|\,[A,B]\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,[A,B]^\dagger\,|\psi\rangle^* = \langle\psi|\,\left[B^\dagger, A^\dagger\right]|\psi\rangle^* \overset{A,B}{\underset{\text{hermitesch}}{=}} \langle\psi|\,[B,A]\,|\psi\rangle^* = -\langle\psi|\,[A,B]\,|\psi\rangle^*$$

Die Eigenschaft $z = -z^*$ ist nur für rein imaginäre Zahlen erfüllt, denn aus

$$z = x + iy = -(x+iy)^* = -(x-iy) = -x + iy \quad , \; x, y \in \mathbb{R}$$

folgt $x = 0$. Somit muss auch $\langle [A,B]\rangle$ rein imaginär sein. $\square$

Aufgabe 02

Nach den Postulaten der Quantenmechanik ergibt sich diese Wahrscheinlichkeit gemäß

$$\frac{1}{\langle\psi,\psi\rangle}\cdot \int\limits_{x\in(0,d)} |\langle\vec r\,|\psi\rangle|^2 \; d^3r = \left(\int\limits_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec r,t)|^2 \; d^3r\right)^{-1} \cdot \int\limits_{\mathbb{R}^2} dy\; dz \int\limits_0^d dx \;\; |\psi(\vec r,t)|^2$$

$$= \left(\int\limits_{\mathbb{R}^3} e^{-|x|/a-|y|/b-|z|/c}\; d^3r\right)^{-1} \cdot \int\limits_{\mathbb{R}^2} dy\; dz\; e^{-|y|/b-|z|/c} \cdot \int\limits_0^d e^{-|x|/a}\; dx$$

$$= \left(\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-|x|/a}\; dx\right)^{-1} \cdot \int\limits_0^d e^{-|x|/a}\; dx = \left(2\int\limits_0^\infty e^{-x/a}\; dx\right)^{-1} \cdot \int\limits_0^d e^{-x/a}\; dx$$

$$= \frac{1}{2}\frac{\left[e^{-x/a}\right]_0^d}{\left[e^{-x/a}\right]_0^\infty} = \frac{1}{2}\left[1 - e^{-\frac{d}{a}}\right]$$

Aufgabe 03

Beginnen mit dem bekannten Gaußschen Integral

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-cx^2+kx}\ dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \cdot e^{\frac{k^2}{4c}}\ ,\ c,k \in \mathbb{C}\ ,\ \Re(c) > 0$$

und schreiben

$$(*) : \int_{\mathbb{R}} e^{-c(x-x_0)^2+kx}\ dx \overset{\text{Sub: } u:=x-x_0}{=} \int_{\mathbb{R}} e^{-cx^2+k(x+x_0)}\ dx = e^{kx_0} \int_{\mathbb{R}} e^{-cx^2+kx}\ dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \cdot e^{\frac{k^2}{4c}+kx_0}$$

so dass sich schließlich ergibt

$$\langle V'(x) \rangle = \frac{1}{\int_{\mathbb{R}} \rho(x)\ dx} \int_{\mathbb{R}} V'(x)\rho(x)\ dx = \frac{V_0}{\int_{\mathbb{R}} e^{-(x-x_0)^2/2b^2}\ dx} \cdot \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}} \frac{d}{dx} \left(1 - e^{-\frac{x}{a}}\right)^2\ dx$$

$$\overset{*}{=} \frac{2V_0}{ab\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{\mathbb{R}} \left[e^{-(x-x_0)^2/2b^2 - x/a} - e^{-(x-x_0)^2/2b^2 - 2x/a}\right]\ dx \overset{*}{=} \frac{2V_0}{a} \cdot \left[e^{\frac{b^2}{2a^2} - \frac{x_0}{a}} - e^{\frac{2b^2}{a^2} - \frac{2x_0}{a}}\right]$$

Somit verschwindet $\langle V'(x) \rangle$ genau dann wenn

$$\exp\left\{\frac{b^2}{2a^2} - \frac{x_0}{a}\right\} = \exp\left\{\frac{2b^2}{a^2} - \frac{2x_0}{a}\right\}$$

ist, also

$$x_0 = \frac{3b^2}{a}$$

Aufgabe 04

Berechnen zuerst

$$\left[H, X^j P_j\right] = \left[\frac{P_l P^l}{2m} + V, X^j P_j\right] = \frac{1}{2m}\left[P_l P^l, X^j P_j\right] + \left[V, X^j P_j\right] = \frac{1}{2m}\left\{P_l\left[P^l, X^j P_j\right] + \left[P_l, X^j P_j\right] P^l\right\} + \left[V, X^j P_j\right]$$

$$= \frac{1}{2m}\{P_l X^j \underbrace{\left[P^l, P_j\right]}_{0} + P_l \underbrace{\left[P^l, X^j\right]}_{-i\hbar\delta_{jl}} P_j + X^j \underbrace{\left[P_l, P_j\right]}_{0} + \underbrace{\left[P_l, X^j\right]}_{-i\hbar\delta_{jl}} P_j P^l\} + X^j\left[V, P_j\right] + \underbrace{\left[V, X^j\right]}_{0} P_j$$

$$= -\frac{i\hbar}{m} P_j P^j - X^j \left[P_j, V\right]$$

und ferner

$$\left[P_j, V\right] \psi(\vec{r}) = \left(P_j V - V P_j\right) \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\left(\partial_j(V\psi) - V\partial_j\psi\right)(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\left(V\partial_j\psi + \psi\partial_j V - V\partial_j\psi\right)(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x_j}\psi(\vec{r})$$

und bekommen

$$\left[H, X^j P_j\right] = -\frac{i\hbar}{m} P_j P^j - \frac{\hbar}{i} X^j \frac{\partial V}{\partial x_j} = \frac{i\hbar}{m}\vec{P}^2 - \frac{\hbar}{i}\vec{X} \cdot \nabla V$$

Unter Verwendung des Ehrenfestschen Theorems

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

für die Schrödinger-Gleichung erfüllende Zustände und beliebigem Operator A, schreiben wir

$$\partial_t \langle \vec{x} \cdot \vec{p} \rangle = \partial_t \left\langle X^j P_j \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \left\langle [H, X^j P_j] \right\rangle + \underbrace{\left\langle \partial_t \left(X^j P_j \right) \right\rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t X^j = \partial_t P_j = 0}} = \frac{i}{\hbar} \left\langle \frac{i\hbar}{m} \vec{P}^2 - \frac{\hbar}{i} \vec{X} \cdot \nabla V \right\rangle$$

$$= 2 \left\langle \frac{\vec{P}^2}{2m} \right\rangle - \left\langle \vec{X} \cdot \nabla V \right\rangle = 2 \langle T \rangle - \left\langle \vec{X} \cdot \nabla V \right\rangle \quad \square$$

Für Zustände der Art $\psi(t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(t)$ gilt

$$\mathcal{H}\psi(t) = i\hbar \partial_t \psi(t) = i\hbar \left(-\frac{iE}{\hbar} \psi(t) \right) = E\psi(t)$$

das heißt ψ ist Eigenfunktion von $\mathcal{H}$ bzgl. des Eigenwertes E. Somit ergibt sich für beliebigen Operator A (insbesondere für $\vec{x} \cdot \vec{p}$):

$$\langle [\mathcal{H}, A] \rangle = \langle \psi | \mathcal{H}A - A\mathcal{H} | \psi \rangle = \langle \mathcal{H}\psi | A | \psi \rangle - \langle \psi | A | \mathcal{H}\psi \rangle = E^* \langle \psi | A | \psi \rangle - E \langle \psi | A | \psi \rangle \overset{E \in \mathbb{R}}{=} 0$$

das heißt

$$\partial_t \langle \vec{x} \cdot \vec{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \underbrace{\langle [\mathcal{H}, \vec{x} \cdot \vec{p}] \rangle}_{0} + \underbrace{\left\langle \partial_t \left(X^j P_j \right) \right\rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t X^j = \partial_t P_j = 0}} = 0$$

Demnach ist

$$2 \langle T \rangle = \left\langle \vec{X} \cdot \nabla V \right\rangle$$

Aufgabe 06

Beginnen mit

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(t) \ , \ \mathcal{H}(t)\varphi_n(t) = E_n(t)\varphi_n(t) \ , \ i\hbar \partial_t \psi(t) = \mathcal{H}(t)\psi(t)$$

und schreiben

$$i\hbar c_m(t) = i\hbar \partial_t \langle \varphi_m(t), \psi(t) \rangle = i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \psi(t) \rangle + i\hbar \langle \varphi_m(t), \partial_t \psi(t) \rangle = i\hbar \left\langle \partial_t \varphi_m(t), \sum_n c_n(t) \varphi_n(t) \right\rangle + \langle \varphi_m(t), i\hbar \partial_t \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_n i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle \cdot c_n(t) + \langle \varphi_m(t), \mathcal{H}(t)\psi(t) \rangle = \sum_n i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle \cdot c_n(t) + \left\langle \varphi_m(t), \mathcal{H}(t) \sum_n c_n(t) \varphi_n(t) \right\rangle$$

$$= \sum_n i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle \cdot c_n(t) + \sum_n c_n(t) \langle \varphi_m(t), \mathcal{H}(t)\varphi_n(t) \rangle = \sum_n \{ i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle + E_n(t) \langle \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle \} \cdot c_n(t)$$

$$= \sum_n \underbrace{\{ i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t), \varphi_n(t) \rangle + E_n(t) \delta_{mn} \}}_{h_{mn}(t)} \cdot c_n(t) \quad \square$$

Die Matrix h_{mn} ist hermitesch, denn

$$(h_{mn}(t))^\dagger = (h_{nm}(t))^* = \delta^*_{nm} E_m(t)^* + (i\hbar \langle \partial_t \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle)^* \overset{\delta_{nm}, E_n \in \mathbb{R}}{=} \delta_{nm} E_m(t) - i\hbar \langle \partial_t \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle^*$$

$$= \delta_{nm} E_m(t) - i\hbar \langle \varphi_m(t) | \partial_t \varphi_n(t) \rangle = \delta_{nm} E_m(t) - i\hbar [\underbrace{\partial_t \underbrace{\langle \varphi_m(t) | \varphi_n(t) \rangle}_{\delta_{mn}}}_{0} - \langle \partial_t \varphi_m(t) | \varphi_n(t) \rangle]$$

$$= \underbrace{\delta_{nm} E_m(t)}_{\delta_{mn} E_n(t)} + i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t) | \varphi_n(t) \rangle = \delta_{mn} E_n(t) + i\hbar \langle \partial_t \varphi_m(t) | \varphi_n(t) \rangle = h_{nm}(t)$$

Im Falle eines zeitunabhängigen Hamilton-Operators $\mathcal{H}$ sind sowohl die Eigenwerte E_n als auch die Eigenfunktionen φ_n zeitunabhängig, das heißt

$$\partial_t \varphi_m = 0$$

so dass sich die obere Beziehung vereinfacht zu

$$i\hbar \partial_t c_m(t) = \sum_n \left[\delta_{mn} E_n + i\hbar \langle 0, \varphi_n \rangle\right] c_n(t) = E_m c_m(t)$$

Somit ergibt sich

$$c_m(t) = e^{-\frac{iE_m}{\hbar} t} \cdot c_m(t_0)$$

für ein festes t_0, wobei $c_m(t_0)$ entsprechend gegeben sind durch

$$c_m(t_0) = \langle \varphi_m, \psi(t_0) \rangle$$

also

$$\boxed{c_m(t) = e^{-\frac{iE_m}{\hbar} t} \cdot \langle \varphi_m, \psi(t_0) \rangle}$$