Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 03 - Lösungen

Stilianos Louca

5. Mai 2008

Notationen:

- Für $z \in \mathbb{C}$ sei $\overline{z}$: komplex konjugierte.
- Es gelte die Einsteinsche Summenkonvention.
- Für Vektor $v \in \mathbb{K}^n$ im n-dimensionalen $\mathbb{K}$-Vektorraum mit Basis $b_1, .., b_n$ sei v^i die Komponente von v bzgl. b_i, das heißt $v = v^i b_i$.
- Für Matrix $A \in M_n(\mathbb{K})$ über Körper $\mathbb{K}$ sei $A^i_j \cong A_{ij}$ der Eintrag in der i-ten Zeile und j-ten Spalte.

Aufgabe 01

Lemma 1: Sei $c = a + ib \in \mathbb{C},\ a, b \in \mathbb{R}$ so dass $\Re c = a > 0$ ist. Dann gilt:

$$\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cx^2}\ dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$$

Beweis: Analog zu Aufgabe (02):
Definieren die (bijektive) Abbildung

$$\varphi : \underbrace{(0,\infty) \times [0, 2\pi)}_{K} \to \mathbb{R}^2\ ,\ f(r,\varphi) = \begin{pmatrix} r\cos\varphi \\ r\sin\varphi \end{pmatrix}$$

und legen los:

$$\left[\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cx^2} dx\right]^2 = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cx^2} dx \cdot \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cy^2} dy = \int\limits_{f(K)=\mathbb{R}^2} e^{-c(x^2+y^2)} dx\ dy$$

$$= \int\limits_{K} e^{-cr^2}\, |\det(\varphi')|\, dr\ d\varphi = \int\limits_{K} e^{-cr^2} r\ dr\ d\varphi = 2\pi \int\limits_0^\infty e^{-cr^2} r\ dr = -\frac{\pi}{c}\left[e^{-cr^2}\right]_0^\infty = \frac{\pi}{c}\left[1 - \lim_{r^2\to\infty} e^{-ar^2} e^{-ibr^2}\right] \overset{a \geq 0}{=} \frac{\pi}{c} - 0$$

$$\Rightarrow \int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$$

Lemma 2: Für $c \in \mathbb{C},\ j \in \mathbb{C}$ mit $\Re c > 0$ gilt:

$$\int\limits_{\mathbb{R}} e^{-cx^2 + jx} dx = e^{\frac{j^2}{4c}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{c}}$$

Beweis: Unter Verwendung des vorigen Ergebnisses bekommt man:

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-cx^2+jx}dx = \int_{\mathbb{R}} e^{-c\left(x-\frac{j}{2c}\right)^2+\frac{j^2}{4c}}\ dx \overset{*}{=} e^{\frac{j^2}{4c}} \cdot \underbrace{\int_{\mathbb{R}} e^{-cu^2}\ du}_{\sqrt{\frac{\pi}{c}}} = e^{\frac{j^2}{4c}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{c}}$$

$$(*) : \text{Sub.} : u := x - \frac{j}{2c}$$

Bestimmung der Wellenform

Das Wellenpaket ist gegeben durch

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(kx-\omega(k)t)}\tilde{\psi}(k)\ dk \quad , \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} = ak^2 \ , \ a := \frac{\hbar}{2m}$$

wobei $\tilde{\psi}(k) = \frac{A\,|b|}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{k_0^2b^2}{2}} \cdot e^{-\frac{b^2}{2}k^2+k_0b^2k}$ die Fouriertransformierte von $\frac{\psi(x,0)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}e^{ik_0x}$ ist (vgl. Aufgabe 05). Also:

$$\psi(x,t) = \underbrace{\frac{A\,|b|}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{k_0^2b^2}{2}}}_{=:\Psi_0} \cdot \int_{\mathbb{R}} e^{i(kx-ak^2t)} \cdot e^{-\frac{b^2}{2}k^2+k_0b^2k}\ dk = \Psi_0 \int_{\mathbb{R}} e^{-\overbrace{\left(\frac{b^2}{2}+iat\right)}^{c(t)}k^2+\overbrace{\left(k_0b^2+ix\right)}^{j(x)}k}\ dk$$

$$\overset{\substack{\text{Lemma 2}\\ \Re c=b^2>0}}{=} \underbrace{\Psi_0}_{\in\mathbb{R}} \cdot \underbrace{e^{\frac{j(x)^2}{4c(t)}}}_{\in\mathbb{C}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{\pi}{c(t)}}}_{\in\mathbb{C}}$$

$$\Rightarrow \ |\psi(x,t)|^2 = \Psi_0^2 \left|\sqrt{\frac{\pi}{c(t)}}\right|^2 \cdot \left|e^{\frac{(k_0b^2+ix)^2}{2b^2+4iat}}\right|^2$$

Für festes $t > 0$ hängt also $|\psi(x,t)|^2$ nur von

$$f(x) := \left|e^{\frac{(k_0b^2+ix)^2}{2b^2+4iat}}\right|^2 = \left|e^{\frac{(k_0b^2+ix)^2(2b^2-4iat)}{4b^4+16a^2t^2}}\right|^2 = \left|e^{\frac{\left(2k_0^2b^6-2b^2x^2+8k_0b^2atx\right)+i\left(4k_0b^4x+4atx^2-4atk_0^2b^4\right)}{4b^4+16a^2t^2}}\right|^2$$

$$= \left|e^{\frac{\left(2k_0^2b^6-2b^2x^2+8k_0b^2atx\right)}{4b^4+16a^2t^2}}\right|^2 \cdot \underbrace{\left|e^{i\frac{\left(4k_0b^4x+4atx^2-4atk_0^2b^4\right)}{4b^4+16a^2t^2}}\right|^2}_{1} = \left[e^{\frac{\left(2k_0^2b^6-2b^2x^2+8k_0b^2atx\right)}{4b^4+16a^2t^2}}\right]^2 = \exp\left[\frac{\left(k_0^2b^6-b^2x^2+4k_0b^2atx\right)}{b^4+4a^2t^2}\right]$$

ab, und ist maximal für genau die Werte für die $g(x) := -b^2\cdot x^2 + 4k_0b^2at\cdot x + k_0^2b^6$ maximal wird (da exp() monoton wachsend). Ableiten und annullieren von $g'(x)$ ergibt

$$g'(x) = -2b^2x + 4k_0b^2at \overset{!}{=} 0 \ \rightarrow \ x = 2k_0at = \frac{k_0\hbar}{m}t$$

und somit genau ein Maximum in $x_0 = 2k_0at$, mit dem Wert

$$f(x_0) = f(2k_0at) = e^{k_0^2b^2}$$

Bemerke: Fassen wir $k_0\hbar$ als den mittleren Impuls auf, so entspricht $x_0(t) = vt$ genau den klassischen Erwartungen, wobei v die mittlere Geschwindigkeit des Teilchens ist.

Suchen jedoch die Werte x für die $|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{e}|\psi(x_0,t)|^2$ also $f(x) = \frac{1}{e}f(x)$ ist. Setzen also

$$f(x) = e^{\frac{\left(k_0^2b^6-b^2x^2+4k_0b^2atx\right)}{b^4+4a^2t^2}} \overset{!}{=} \frac{1}{e}f(x_0) = e^{k_0^2b^2-1}$$

und bekommen so durch Exponentenvergleich die quadratische Gleichung

$$b^2x^2 - 4k_0b^2atx - \left(b^4 + 4a^2t^2 - 4a^2k_0^2b^2t^2\right) = 0$$

deren Lösungen sich ergeben als

$$x = 2k_0at \pm \frac{1}{|b|}\sqrt{b^4 + 4a^2t^2}$$

Somit ergibt sich die Breite Δx der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$ als

$$\Delta x = \frac{2}{|b|}\sqrt{b^4 + 4a^2t^2} = \frac{2}{|b|}\sqrt{b^4 + \left(\frac{\hbar}{m}t\right)^2}$$

Insbesondere ist für $t = 0$ die (Anfangs)breite genau

$$\Delta x = 2\,|b|$$

Aufgabe 02

Selbst-Adjungiertheit

Die Matrix M ist natürlich hermitesch, da $M_i^j = \overline{M_j^i}$ ist. Sei nun allgemein $A \in M_n(\mathbb{C})$ eine hermitesche $n \times n$ Matrix und $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$ ein Skalarprodukt auf $\mathbb{C}^n$. Dann gilt für beliebige Vektoren $v = v^ie_i, w = w^je_j$ ($e_1, .., e_n$ kanonische Basis in $\mathbb{C}^n$):

$$\langle Av, w\rangle = \left\langle Av^ie_i, w^je_j\right\rangle = \left\langle v^iAe_i, w^je_j\right\rangle = \overline{v^i}w^j\left\langle Ae_i, e_j\right\rangle = \overline{v^i}w^j\left\langle A_i^ke_k, e_j\right\rangle = \overline{v^i}w^j\overline{A_i^k}\left\langle e_k, e_j\right\rangle = \sum_{k,i}\overline{v^i}w^jA_k^i\left\langle e_k, e_j\right\rangle$$

$$\langle v, Aw\rangle = \left\langle v^ie_i, Aw^je_j\right\rangle = \left\langle v^ie_i, w^jAe_j\right\rangle = \overline{v^i}w^j\left\langle e_i, A_j^ke_k\right\rangle = \overline{v^i}w^jA_j^k\left\langle e_i, e_k\right\rangle$$

Es gilt: Ist

$$\left\langle e_i, e_j\right\rangle = \delta_{ij}\ ,\ \in \mathbb{C} \text{ für alle } i,j \in \{1,..,n\}$$

so ist nach obiger Rechnung

$$\langle Av, w\rangle = \sum_{k,i}\overline{v^i}w^jA_k^i\left\langle e_k, e_j\right\rangle = \sum_{k,i}\overline{v^i}w^jA_k^i\delta_{kj} = \sum_{i}\overline{v^i}w^jA_j^i = \overline{v^i}w^jA_j^k\delta_{ik} = \overline{v^i}w^jA_j^k\left\langle e_i, e_k\right\rangle = \langle v, Aw\rangle$$

also A selbstadjungiert bzgl. des gewählten Skalarproduktes.
Spezialfall: Die Matrix M ist selbstadjungiert bzgl. des Standardskalarprodukts auf $\mathbb{C}^n$, mit $\langle e_i, e_j\rangle = \delta_{ij}$.
Bemerke: Die Forderung $\langle e_i, e_j\rangle = \delta_{ij}$ ist nicht ohne Grund! Denn: Betrachten die Sesquilinearform $b : \mathbb{C}^4 \times \mathbb{C}^4 \to \mathbb{C}$ definiert als

$$b_{ij} = b(e_i, e_j) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Zu erkennen ist, dass b positiv definit (da die Signatur von b nur positive Einträge enthält) und hermitesch ist. Somit ist b ein Skalarprodukt auf $\mathbb{C}^4$. Doch für $v := e_1,\ w := e_2$ gilt:

$$b\,(Av, w) = \frac{1}{2}b\,((3, i, -i, 1), (0, 1, 0, 0)) = -\frac{i}{2}$$

$$b(v, Aw) = \frac{1}{2}b\,((1, 0, 0, 0), (-i, 3, 1, i)) = -i$$

Orthogonalisierung

Sei nun $A := 2 \cdot M$. Dann gilt: $\lambda \in \mathbb{C}$ ist genau dann ein Eigenwert von M, wenn 2λ ein Eigenwert von A ist. Alle Eigenvektoren von M sind auch Eigenvektoren von A und umgekehrt.
Das charakteristische Polynom $p_M \in \mathbb{C}[X]$ der Matrix A ist gegeben durch

$$p_A(X) = \det(XI - A) = \det \begin{pmatrix} X-3 & i & -i & -1 \\ -i & X-3 & -1 & i \\ i & -1 & X-3 & -i \\ -1 & -i & i & X-3 \end{pmatrix}$$

$$\overset{*}{=} (X-3) \det \begin{pmatrix} X-3 & -1 & i \\ -1 & X-3 & -i \\ -i & i & X-3 \end{pmatrix} + i \det \begin{pmatrix} i & -i & -1 \\ -1 & X-3 & -i \\ -i & i & X-3 \end{pmatrix}$$

$$+ i \det \begin{pmatrix} i & -i & -1 \\ X-3 & -1 & i \\ -i & i & X-3 \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} i & -i & -1 \\ X-3 & -1 & i \\ -1 & X-3 & -i \end{pmatrix}$$

$$\overset{**}{=} X^4 - 12X^3 + 48X^2 - 64X = X(X^3 - 12X^2 + 48X - 64) = X(X-4)^3$$

$(*)$ Entwicklung nach der 1. Spalte

$(**)$ Rechenregeln der linearen Algebra

woraus man die Eigenwerte (Nullstellen von A) $\lambda_1^A = 0,\ \lambda_2^A = 4$ erkennen kann. Somit sind die Eigenwerte von M genau $\lambda_1 = 0,\ \lambda_2 = 2$.

Durch scharfes hinsehen erkennt man dass die Summe der 1. und 4. Spalte von M genau $(2,0,0,2)$ ergibt. Somit ist $v_1 := (1,0,0,1)$ ein Eigenvektor von M bzgl. λ_2. Ebenso durch scharfes hinsehen erkennt man: die 2. und 3. Spalte haben die Summe $(0,2,2,0)$. Somit ist auch $v_2 := (0,1,1,0)$ ein Eigenvektor von M bzgl. λ_2. Nach noch schärferem hinsehen erkennt man: $v_3 := (0,1,0,i)$ ist ebenfalls ein Eigenvektor zu λ_2, denn die Summe der 2. und i-mal die 4. Spalte ist $(0,2,0,2i)$. Eine anschließende Probe bestätigt das Ergebnis!
Bemerkung: Falls Hingucken nicht funktioniert, ergibt die Lösung des linearen Gleichungssystems (z.B. mittels Gauss-Jordan Verfahrens)

$$(A - \lambda I) \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} 3-\lambda & -i & i & 1 \\ i & 3-\lambda & 1 & -i \\ -i & 1 & 3-\lambda & i \\ 1 & i & -i & 3-\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \vec{0}$$

immer die Gesamtheit der Eigenvektoren $\vec{x}$ zu λ.
Brauchen jetzt nur noch einen Eigenvektor zu $\lambda_1 = 0$, und wenden diesmal das oben genannte Verfahren an, lösen also das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 3 & -i & i & 1 \\ i & 3 & 1 & -i \\ -i & 1 & 3 & i \\ 1 & i & -i & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \vec{0}$$

und erhalten den Lösungsraum als $\operatorname{span}\{(-1, i, -i, 1)\}$. Somit ist $b_4 := (-1, i, -i, 1)$ ein Eigenvektor zu λ_1. Die Vektoren v_1, v_2, v_3, b_4 sind linear unabhängig, denn

$$\det \underbrace{\begin{pmatrix} - & v_1 & - \\ - & v_2 & - \\ - & v_3 & - \\ - & b_4 & - \end{pmatrix}}_{B} = -4 \neq 0 \ \rightarrow\ \operatorname{rang} B = 4$$

Es gilt: $b_4 \perp v_i,\ i = 1,2,3$ also $b_4 \perp \underbrace{\text{span}\{v_1, v_2, v_3\}}_{=E_2(M)}$. Somit können wir das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren <u>innerhalb</u> des Eigenraumes $E_2(M) \subset \mathbb{C}^4$ anwenden, um eine orthogonale Basis b_1, b_2, b_3 innerhalb von $E_2(M)$ zu finden. Da $E_2(M)$ ein Unterraum von $\mathbb{C}^4$ ist, sind auch alle sich ergebenden Vektoren wieder in $E_2(M)$, das heißt wieder Eigenvektoren von M und ferner senkrecht zu b_4. Dabei betrachten wir grundsätzlich das Standardskalarprodukt, das heißt für Vektoren $v = v^i e_i,\ w = w^j e_j$ ist

$$\langle v, w\rangle = \overline{v^i} w^j \delta_{ij} = \sum_i \overline{v^i} w^i$$

Insbesondere also:

$$\langle v, v\rangle = \sum_i \overline{v^i} v^i = \sum_i \left|v^i\right|^2$$

Legen also los:

$$b_1 := v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$b_2 = v_2 - \frac{\overbrace{\langle b_1, v_2\rangle}^{0}}{\langle b_1, b_1\rangle} \cdot b_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$b_3 = v_3 - \frac{\overbrace{\langle b_1, v_3\rangle}^{i}}{\underbrace{\langle b_1, b_1\rangle}_{2}} \cdot b_1 - \frac{\overbrace{\langle b_2, v_3\rangle}^{1}}{\underbrace{\langle b_2, b_2\rangle}_{2}} \cdot b_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ -1 \\ i \end{pmatrix}$$

und erhalten so die Orthogonalbasis b_1, b_2, b_3 in $E_2(M)$. Somit bildet

$$\boxed{b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},\ b_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ b_3 = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ -1 \\ i \end{pmatrix},\ b_4 = \begin{pmatrix} -1 \\ i \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}}$$

eine Orthogonalbasis aus Eigenvektoren in $\mathbb{C}^4$. Um ferner eine Orthonormalbasis b_1', b_2', b_3', b_4' zu erhalten, setzen wir

$$b_i' := \frac{1}{\sqrt{\langle b_i, b_i\rangle}} \cdot b_i$$

wobei dabei die Eigenschaft eines Vektors b_i Eigenvektor zu sein erhalten bleibt. Erhalten also die Orthonormalbasis aus Eigenvektoren:

$$\boxed{\frac{b_1}{\sqrt{2}},\ \frac{b_2}{\sqrt{2}},\ \frac{b_3}{2},\ \frac{b_4}{2}}$$

Aufgabe 09

Sei $|e_1\rangle, .., |e_n\rangle$ eine Orthonormalbasis des n-dimensionalen Hilbertraums $\mathcal{H}$ und $|\psi\rangle = \psi^i\,|e_i\rangle,\ \psi^i \in \mathbb{C}$ ein beliebiger Vektor in $\mathcal{H}$. Dann ist wegen

$$\langle \psi, \psi\rangle \cong \langle \psi\,|\psi\rangle = \left(\overline{\psi^i}\,\langle e_i|\right)\left(\psi^j\,|e_j\rangle\right) = \overline{\psi^i}\psi^j\,\langle e_i\,|e_j\rangle = \overline{\psi^i}\psi^j\delta_{ij} = \sum_i \overline{\psi^i}\psi^i = \sum_i \left|\psi^i\right|^2$$

der Vektor $|\psi\rangle$ genau dann normiert, wenn $\sum_i \left|\psi^i\right|^2 = 1$ ist.

Speziell in unserem Fall: Es ist

$$\langle\psi\,|\psi\rangle = \sum_i \left|\psi^i\right|^2 = \frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{2} = 1 \quad , \quad \langle\chi\,|\chi\rangle = \sum_i \left|\chi^i\right|^2 = \frac{1}{3}+\frac{1}{3} = \frac{2}{3}$$

Somit ist $|\psi\rangle$ zwar normiert, jedoch $|\chi\rangle$ nicht. Betrachten nun den Projektor

$$P_\varphi = \frac{1}{\langle\varphi\,|\varphi\rangle}\,|\varphi\rangle\,\langle\varphi| : \mathcal{H} \to \operatorname{span}\{|\varphi\rangle\}$$

eines beliebigen Vektors $|\varphi\rangle = \varphi^i\,|e_i\rangle\,,\ \varphi^i \in \mathbb{C}$ im n-dimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}$. Bilden die $|e_i\rangle$ eine Orthonormalbasis in $\mathcal{H}$, so bilden die $\langle e_i| : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ genau die dazugehörige Dualbasis, denn

$$\langle e_i\,|e_j\rangle = \langle e_i, e_j\rangle = \delta_{ij} : \text{Definition der dualen Basis}$$

Somit ergibt sich die Matrix der linearen Abbildung P_φ bzgl. der Basis $\{|e_i\rangle\}$ als

$$(P_\varphi)_{ij} = \langle e_i|\,P_\varphi\,|e_j\rangle = \langle e_i|\left(\frac{1}{\langle\varphi\,|\varphi\rangle}\,|\varphi\rangle\,\langle\varphi\,|e_j\rangle\right) \overset{\text{Linearität}}{=} \frac{1}{\langle\varphi\,|\varphi\rangle}\,\langle\varphi\,|e_j\rangle\cdot\langle e_i\,|\varphi\rangle \overset{\text{Sesquilinerität}}{=} \frac{1}{\langle\varphi\,|\varphi\rangle}\cdot\overline{\langle e_j\,|\varphi\rangle}\cdot\langle e_i\,|\varphi\rangle \overset{\text{Dualbasis}}{=} \frac{\overline{\varphi^j}\cdot\varphi^i}{\langle\varphi\,|\varphi\rangle}$$

Speziell in unserem Fall also eingesetzt:

$$(P_\psi)_{ij} = \overline{\psi^j}\cdot\psi^i \cong \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{i}{4} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{i}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{i}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$(P_\chi)_{ij} = \overline{\chi^j}\cdot\chi^i \cong \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$