Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 04 - Lösungen

Stilianos Louca

13. 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.
- Für Matrix A über $\mathbb{C}$ bezeichne $A^H := \overline{A^T}$. Für deren Elemente analog $\left(A^i_j\right)^H = \overline{A^j_i}$
- Es bezeichne I die Identität (bzw. Einheitsmatrix).

Aufgabe 10

a) $[A, B] = AB - BA = -(BA - AB) = -[B, A]$

b) $[A, B + C] = A(B + C) - (B + C)A = AB + AC - BA - CA = [A, B] + [A, C]$
Ferner: Für $\lambda \in \mathbb{C}$: $[A, \lambda B] = A\lambda B - \lambda BA = \lambda(AB - BA) = \lambda[A, B]$.
Somit ist $[\cdot, \cdot]$ bilinear.

c) $[A, B]C + B[A, C] = (AB - BA)C + B(AC - CA) = ABC - BAC + BAC - BCA = ABC - BCA = [A, BC]$

d) Unter Verwendung der vorigen Rechenregeln folgt:

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = [A, BC - CB] + [B, CA - AC] + [C, AB - BA]$$

$$= [A, BC] - [A, CB] + [B, CA] - [B, AC] + [C, AB] - [C, BA]$$

$$= ABC - BCA - ACB + CBA + BCA - CAB - BAC + ACB + CAB - ABC - CBA + BAC = 0$$

e) $[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger \overset{*}{=} (AB)^\dagger - (BA)^\dagger \overset{*}{=} B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = \left[B^\dagger, A^\dagger\right]$
(*) Rechenregeln für †.

□

Aufgabe 11

Sei λ_n der Eigenwert zum Eigenzustand $|\varphi_n\rangle$, also $H|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle$.

a) Unter Verwendung der Rechenregeln schreiben wir:

$$\langle\varphi_j\,|U(m,n)\varphi_i\rangle \cong \langle\varphi_j|\,U(m,n)\,|\varphi_i\rangle = \langle\varphi_j\,|\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_n\,|\varphi_i\rangle = \langle\varphi_n\,|\varphi_i\rangle\,\langle\varphi_j\,|\varphi_m\rangle = \overline{\langle\varphi_i\,|\varphi_n\rangle}\cdot\overline{\langle\varphi_m\,|\varphi_j\rangle}$$

$$= \overline{\langle\varphi_i\,|\varphi_n\rangle\,\langle\varphi_m\,|\varphi_j\rangle} = \overline{\langle\varphi_i|\,U(n,m)\,|\varphi_j\rangle} \cong \overline{\langle\varphi_i\,|U(n,m)\varphi_j\rangle} = \langle U(n,m)\varphi_j\,|\varphi_i\rangle$$

$$\Rightarrow\; U^\dagger(m,n) = U(n,m)$$

b) Das Verhalten eines Operators ist vollständig beschrieben durch seine Werte auf der Basis (Satz der linearen Fortsetzung). Beginnen also mit der Definition von $[\cdot,\cdot]$ und schreiben

$$[H,U(m,n)]\,|\varphi_i\rangle = HU(m,n)\,|\varphi_i\rangle - U(m,n)H\,|\varphi_i\rangle = H\,|\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_n\,|\varphi_i\rangle - |\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_n|\,\lambda_i\,|\varphi_i\rangle$$

$$= \lambda_m\,|\varphi_m\rangle\underbrace{\langle\varphi_n\,|\varphi_i\rangle}_{\delta_{ni}} - \lambda_i\,|\varphi_m\rangle\underbrace{\langle\varphi_n\,|\varphi_i\rangle}_{\delta_{ni}} = \delta_{ni}(\lambda_m-\lambda_i)\,|\varphi_m\rangle = \delta_{ni}(\lambda_m-\lambda_n)\,|\varphi_m\rangle = (\lambda_m-\lambda_n)\,|\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_n|$$

$$\Rightarrow\; [H,U(m,n)] = (\lambda_m-\lambda_n)\cdot U(m,n)$$

c) Unter Verwendung von Teil (a) und der Rechenregeln erhalten wir

$$U(m,n)U^\dagger(p,q) \overset{(a)}{=} U(m,n)U(q,p) = |\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_n|\,|\varphi_q\rangle\,\langle\varphi_p| = |\varphi_m\rangle\underbrace{\langle\varphi_n\,|\varphi_q\rangle}_{\delta_{nq}}\langle\varphi_p| = \delta_{nq}\,|\varphi_m\rangle\,\langle\varphi_q| = \delta_{nq}U(m,p)$$

d) Beginnen mit der Definition von trace und schreiben

$$\operatorname{trace}\{U(m,n)\} = \sum_{j\in\mathbb{N}}\langle\varphi_j|\,U(m,n)\,|\varphi_j\rangle = \sum_{j\in\mathbb{N}}\underbrace{\langle\varphi_j\,|\varphi_m\rangle}_{\delta_{jm}}\underbrace{\langle\varphi_n\,|\varphi_j\rangle}_{\delta_{nj}} = \sum_{j\in\mathbb{N}}\delta_{jm}\delta_{jn} = \delta_{nm}$$

e) Seien $A,B,C:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ Operatoren im Hilbertraum $\mathscr{H}$. Seien $\{|\varphi_n\rangle\}_n$, $\{|\psi_m\rangle\}_m$ orthonormale abzählbare Basen in $\mathscr{H}$. Die Basen seien verknüpft durch $|\psi_m\rangle = \psi_m^n\cdot|\varphi_n\rangle$ wobei $\psi = (\psi_m^n)$ eine unitäre (*) Matrix ist (da Basiswechselmatrix zwischen orthonormalen Basen), das heißt $\psi\cdot\psi^H = I$. Dann ist

$$\sum_m\langle\psi_m|\,A\,|\psi_m\rangle = \sum_m\langle\psi_m^n\varphi_n|\,A\,\left|\psi_m^k\varphi_k\right\rangle = \sum_m\overline{\psi_m^n}\psi_m^k\,\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_n\sum_k\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_k\rangle\sum_m\psi_m^k\overline{\psi_m^n} = \sum_n\sum_k\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_k\rangle\sum_m\psi_m^k\,(\psi_n^m)^H$$

$$= \sum_n\sum_k\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_k\rangle\,(\underbrace{\psi\cdot\psi^H}_{I})_n^k \overset{*}{=} \sum_n\sum_k\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_k\rangle\,\delta_{nk} = \sum_n\langle\varphi_n|\,A\,|\varphi_n\rangle$$

Somit ist trace$\{A\}$ unabhängig von der Basis eindeutig bestimmt. Seien $A_{ij} = \langle\varphi_i|\,A\,|\varphi_j\rangle$, $\langle\varphi_i|\,B\,|\varphi_j\rangle$ die Matrizenelemente von A und B bzgl. der orthonormalbasis $\{|\varphi_n\rangle\}_n$. Dann ist bekannt aus der Vorlesung

$$(AB)_{ij} = \langle\varphi_i|\,AB\,|\varphi_j\rangle = \sum_k A_{ik}B_{kj}$$

woraus folgt

$$\operatorname{trace}AB = \sum_n\langle\varphi_n|\,AB\,|\varphi_n\rangle = \sum_n(AB)_{nn} = \sum_n\sum_k A_{nk}B_{kn}$$

$$= \sum_k\sum_n B_{kn}A_{nk} = \sum_k(BA)_{kk} = \sum_k\langle\varphi_k|\,BA\,|\varphi_k\rangle = \operatorname{trace}BA$$

Ersetzen wir nun B mit BC so folgt sofort

$$\operatorname{trace} ABC = \operatorname{trace} A(BC) = \operatorname{trace}(BC)A = \operatorname{trace} BCA$$

Analog:

$$\operatorname{trace} BCA = \operatorname{trace} B(CA) = \operatorname{trace}(CA)B = \operatorname{trace} CAB$$

Beweisvariante für ersten Teil: Seien $\{|\psi_i\rangle\}, \{|\varphi_i\rangle\}$ beliebige abzählbare, orthonormale Basen in $\mathcal{H}$ und F ein Endomorphismus auf $\mathcal{H}$. Dann existiert eine (invertierbare) Basistransformationsmatrix U so dass für die Matrizen $A, \tilde{A}$ von F bzgl. der jeweiligen Basen gilt:

$$\tilde{A} = U^{-1}AU \ , \ A_{ij} = \langle\psi_i| F |\psi_j\rangle \ , \ \tilde{A}_{ij} = \langle\varphi_i| F |\varphi_j\rangle$$

das heißt U ist die Matrix der Identität bzgl. $\{|\varphi\rangle_i\}$ nach $\{|\psi\rangle_i\}$. Unter Verwendung des vorigen Ergebnisses hat man dann:

$$\sum_n \langle\varphi_n| F |\varphi_n\rangle = \operatorname{trace} \tilde{A} = \operatorname{trace}\left(U^{-1}AU\right) = \operatorname{trace}\left(AUU^{-1}\right) = \operatorname{trace} A = \sum_n \langle\psi_n| F |\psi_n\rangle$$

f) Das Verhalten eines Operators ist eindeutig festgelegt durch sein Verhalten auf einer Basis. Und es ist:

$$\forall\ k : \left\{\sum_{m,n} A_{mn}U(m,n)\right\}|\varphi_k\rangle = \left\{\sum_{m,n} \langle\varphi_m| A |\varphi_n\rangle |\varphi_m\rangle \langle\varphi_n|\right\}|\varphi_k\rangle = \sum_{m,n} \langle\varphi_m| A |\varphi_n\rangle |\varphi_m\rangle \underbrace{\langle\varphi_n |\varphi_k\rangle}_{\delta_{nk}}$$

$$= \sum_m \langle\varphi_m| A |\varphi_k\rangle |\varphi_m\rangle = \sum_m \langle\varphi_m |A\varphi_k\rangle |\varphi_m\rangle \overset{\{\varphi_k\}\ \text{Vollständig}}{=} |A\varphi_k\rangle = A|\varphi_k\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{m,n} A_{mn}U(m,n) = A$$

g) Es gilt:

$$U(i,j)U(n,m) = |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_j |\varphi_n\rangle}_{\delta_{jn}} \langle\varphi_m| = \delta_{jn}U(i,m)$$

$$\operatorname{trace} AU^\dagger(m,n) \overset{(a)}{=} \operatorname{trace} AU(n,m) = \sum_k \langle\varphi_k| AU(n,m) |\varphi_k\rangle \overset{(f)}{=} \sum_k \langle\varphi_k| \sum_{i,j} A_{ij}U(i,j)U(n,m) |\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_k \sum_{i,j} A_{ij} \langle\varphi_k| U(i,j)U(n,m) |\varphi_k\rangle = \sum_k \sum_{i,j} A_{ij}\delta_{jn} \langle\varphi_k| U(i,m) |\varphi_k\rangle = \sum_k \sum_i A_{in} \langle\varphi_k| U(i,m) |\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_i A_{in} \underbrace{\sum_k \langle\varphi_k| U(i,m) |\varphi_k\rangle}_{\operatorname{trace} U(i,m) = \delta_{im}} = \sum_i A_{in}\delta_{im} = A_{mn}$$

□

Aufgabe 12

Bezeichnungen:

- Für einen Unterraum $U \subset \mathcal{H} : U^\perp := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi \perp \varphi\ \forall\ \varphi \in U\}$. Bemerke dass $U^\perp$ auch wieder ein Unterraum von $\mathcal{H}$ ist und für $V \subset U$ ist $U^\perp \subset V^\perp$.
- Werden an den meisten Stellen ψ an Stelle von $|\psi\rangle$ verwenden.

Vorbetrachtung

Ein Orthogonalprojektor P auf einem (abgeschlossenem) Unterraum $U \subset \mathcal{H}$ ist eine lineare Abbildung $P : \mathcal{H} \to U$ die erfüllt:

$$\forall\ \psi \in U : \psi - P\psi \perp U$$

Unter anderem folgen dann direkt die Eigenschaften:

a) Für $\psi \perp U$ gilt: $P\psi = 0$. Das heißt $P\ |_{U^\perp} \equiv 0$
Beweis: Sei $\psi \perp U$. Dann gilt:

$$0 \overset{*}{=} \langle P\psi, \psi - P\psi\rangle = \langle P\psi, \psi\rangle - \langle P\psi, P\psi\rangle \overset{**}{=} -\langle P\psi, P\psi\rangle \xrightarrow{\text{positiv definit}} P\psi = 0$$

(*) $\psi - P\psi \perp U \ni P\psi$
(**) $P\psi \in U \perp \psi$

b) Ist $P\psi = 0$ so ist $\psi \perp U$. Somit ist kernel $P = U^\perp$
Beweis: Es ist $v = v - P\psi \perp U$.

c) P ist idempotent, das heißt $P \circ P = P$.
Beweis: Für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}$ ist

$$P(P(\psi)) = P(\psi - (\psi - P(\psi))) = P(\psi) - P(\underbrace{\psi - P(\psi)}_{\perp U}) \overset{(a)}{=} P(\psi)$$

d) Für $\psi \in U$ ist $P\psi = \psi$. Das heißt $P\ |_U \equiv Id$.
Beweis: Sei $\psi \in U$. Dann ist $\psi - P\psi \perp U$. Doch außerdem ist $\underbrace{\psi}_{\in U} - \underbrace{P\psi}_{\in U} \in U$ also

$$\langle \psi - P\psi, \psi - P\psi\rangle = 0 \xrightarrow{\text{positiv definit}} \psi - P\psi = 0 \ \to\ P\psi = \psi$$

e) Ist $P\psi = \psi$, so ist $\psi \in U$.
Beweis: Angenommen $\psi \neq U$, so wäre wegen $P\psi \in U$ insbesondere $\psi \neq P\psi$. Doch dies ist ein Widerspruch.

f) P ist eindeutig bestimmt.
Beweis: Seien P^1, P^2 Orthogonalprojektoren auf $U \subset \mathcal{H}$. Dann gilt für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}$:

$$0 \overset{*}{=} P^2\left(\psi - P^1(\psi)\right) = P^2\psi - P^2(\underbrace{P^1(\psi)}_{\in U}) \overset{(c)}{=} P^2\psi - P^1\psi \ \to\ P^1\psi = P^2\psi$$

(*) $\psi - P^1\psi \perp U$ und (a).

g) Für einen abgeschlossenen Unterraum $U \subset \mathcal{H}$ kann jeder Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ eindeutig geschrieben werden als

$$\psi = \psi_1 + \psi_2,\ \ \psi_1 \in U, \psi_2 \in U^\perp$$

Dies ist ein grundlegender Satz der Hilbertraumtheorie.

h) Ist also ein Vektor $\psi = \psi_1 + \psi_2,\ \psi_1 \in U,\ \psi_2 \in U^\perp$ so gilt: $\psi_1 = P\psi$.
Beweis: Durch $\psi_1 := P\psi \in U,\ \psi_2 := \psi - P\psi \in U^\perp$ ist die Darstellung erfüllt. Und zwar eindeutig (wegen (g)).

i) P ist ein selbstadjungierter Operator.
Beweis: Seien $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ mit $\psi = \psi_1 + \psi_2, \varphi = \varphi_1 + \varphi_2,\ \psi_1, \varphi_1 \in U,\ \psi_2, \varphi_2 \in U^\perp$. Dann folgt:

$$\langle \psi, P\varphi\rangle = \langle \psi_1 + \psi_2, \varphi_1\rangle = \langle \psi_1, \varphi_1\rangle + \underbrace{\langle \psi_2, \varphi_1\rangle}_{=0 \text{ da } \psi_2 \perp \varphi_1} = \langle \psi_1, \varphi_1\rangle$$

$$= \langle \psi_1, \varphi_1\rangle + \underbrace{\langle \psi_1, \varphi_2\rangle}_{=0 \text{ da } \varphi_2 \perp \psi_1} = \langle \psi_1, \varphi_1 + \varphi_2\rangle = \langle P\psi, \varphi\rangle$$

j) Ist $\mathcal{H}$ separabel und $\{\psi_i\}_{i\in I}$ ein abzählbare Orthonormalbasis von $\mathcal{H}$ mit $U = \operatorname{span}\{\psi_i \mid i \in I_1\}$, $I_1 \subset I$, so ist der Projektor P auf U darstellbar als

$$P = \sum_{i\in I_1} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Beweis: Es gilt natürlich $U^\perp = \operatorname{span}\{|\psi_i\rangle \mid i \in I \setminus I_1\}$. Für $\psi = \sum_{i\in I} a_i |\psi_i\rangle$ ist somit

$$\psi - P\psi = \sum_{j\in I} a_j |\psi_j\rangle - \sum_{i\in I_1}\sum_{j\in I} a_j |\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_i|\psi_j\rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_{j\in I} a_j |\psi_j\rangle - \sum_{i\in I_1} a_i |\psi_i\rangle = \sum_{j\in I\setminus I_1} a_j |\psi_j\rangle \in U^\perp$$

Außerdem folgt aus der Darstellung von P dass $P : \mathcal{H} \to U$ ist. Alle Axiome an den Projektor sind somit erfüllt.

Seien nun P_1, P_2 Orthogonalprojektoren jeweils auf den Unterräumen $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}$.

Notwendigkeit

Sei $P := P_1 \circ P_2$ ebenfalls ein Orthogonalprojektor auf einen abgeschlossenem Unterraum $U \subset \mathcal{H}$. Zeigen: P_1, P_2 kommutieren. Nach Punkt (i) P ist selbstadjungiert. Also

$$P_1P_2 = P \overset{(i)}{=} P^\dagger = (P_1P_2)^\dagger \overset{*}{=} P_2^\dagger P_1^\dagger \overset{**}{=} P_2P_1$$

(*) Rechenregeln für adjungierte Operatoren.
(**) Da insbesondere auch P_1, P_2 Orthogonalprojektoren sind.
Somit müssen P_1, P_2 kommutieren. Wegen

$$\operatorname{image} P = \operatorname{image} P_1P_2 \subset \operatorname{image} P_1 = \mathcal{H}_1$$

und

$$\operatorname{image} P = \operatorname{image} P_2P_1 \subset \operatorname{image} P_2 = \mathcal{H}_2$$

ist $\operatorname{image} P \subset \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$. Es liegt nahe anzunehmen dass $U := \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$ der entsprechende Unterraum ist. Für einen Beweis siehe unten.

Hinreichende

Sei $P_1 \circ P_2 = P_2 \circ P_1 =: P$. Müssen zeigen: P erfüllt die oben genannten Axiome für Orthogonalprojektoren.
Betrachten dazu die Menge $U := \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$.

- Aus der linearen Algebra weis man: U ist ebenfalls ein Unterraum von $\mathcal{H}$. Endliche Schnitte abgeschlossener Mengen sind ebenfalls abgeschlossen. Somit ist U insbesondere ein abgeschlossener Unterraum und es macht Sinn von einem Projektor zu sprechen.

- Verkettung linearer Abbildungen ist auch wieder linear. Also ist P linear.

- Wegen der Definition von P_1 und P_2 ist für jedes $\psi \in \mathcal{H}$ jeweils $P\psi = P_1(P_2(\psi) \in \mathcal{H}_1$ und $P\psi = P_2(P_1(\psi)) \in \mathcal{H}_2$ also ist $P\psi \in \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2 = U$. Somit ist $P : \mathcal{H} \to U$.

- Wegen der Definition von P_1 ist für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}$:

$$P_2\psi - \underbrace{P_1P_2}_{P}\psi = (P_2\psi) - P_1(P_2\psi) \perp \mathcal{H}_1 \;\rightarrow\; (*) : P_2\psi - P\psi \perp U \subset \mathcal{H}_1$$

  Ferner folgt aus der Definition von P_2 dass für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}$:

$$\psi - P_2\psi \perp \mathcal{H}_2 \;\rightarrow\; (**) : \psi - P_2\psi \perp U \subset \mathcal{H}_2$$

Also gilt für beliebige $\psi \in \mathcal{H},\ \varphi \in U$:

$$\langle \varphi, \psi - P\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle - \langle \varphi, P\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle - \underbrace{\langle \varphi, \psi - P_2\psi \rangle}_{\substack{=0 \\ \text{wegen } (**)}} - \langle \varphi, P\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle - \langle \varphi, \psi \rangle + \langle \varphi, P_2\psi \rangle - \langle \varphi, P\psi \rangle$$

$$= \langle \varphi, P_2\psi \rangle - \langle \varphi, P\psi \rangle = \underbrace{\langle \varphi, P_2\psi - P\psi \rangle}_{\substack{=0 \\ \text{wegen } (*)}} = 0$$

$$\Rightarrow \ \psi - P\psi \perp U$$

Somit erfüllt $P = P_1 \circ P_2$ alle Axiome für eine Orthogonalprojektion und damit auch alle in der Vorbetrachtung genannten Eigenschaften. Der entsprechende Unterraum ist dabei genau $U = \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$. $\square$