Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 05 - Lösungen

Stilianos Louca

18. 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.
- Es bezeichne I die Identität (bzw. Einheitsmatrix).
- Für eine Matrix A bezeichne $E_\lambda(A)$ den Eigenraum von A bzgl. des Eigenwertes λ.

Aufgabe 13

Da H ein Hamilton-Operator ist, ist er insbesondere hermitesch und hat nur reelle Eigenwerte, das heißt $E_n \in \mathbb{R}$. Somit folgt:

$$\langle \varphi_n | [A, H] | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | AH - HA | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | AH | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | HA | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | A | E_n \varphi_n \rangle - \left\langle H^\dagger \varphi_n \middle| A | \varphi_n \right\rangle$$

$$\overset{H=H^\dagger}{=} E_n \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle - \langle H\varphi_n | A | \varphi_n \rangle = E_n \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle - \langle E_n \varphi_n | A | \varphi_n \rangle = E_n \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle - \underbrace{\overline{E_n}}_{\substack{E_n \\ \text{da } E_n \in \mathbb{R}}} \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle = 0$$

Bemerkungen:

(i) Für skalare Funktion $V : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ deuten wir den Operator $\psi \overset{V}{\mapsto} V\psi$ als

$$(V\psi)(x) := V(x) \cdot \psi(x)$$

(ii) Für skalare Funktionen $V, U : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ ist somit $VU = UV$, denn $VU\psi = V \cdot U \cdot \psi = U \cdot V \cdot \psi = UV\psi$.

(iii) Für den Operator P

$$P\psi = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}$$

gilt:

$$P^n\psi = P^{n-1}P\psi = -i\hbar P^{n-1}\frac{d\psi}{dx} = (...) = (-i\hbar)^n \frac{d^n\psi}{dx^n}$$

(iv) Für skalare Funktion $\varphi(x, t)$ schreiben wir gelegentlich $\varphi(x)$.

Unter Beachtung oberer Stichpunkte, legen wir los:

a)
- Wegen

$$(PV\psi)(x) = -i\hbar\left(\frac{d}{dx}(V\psi)\right)(x) = -i\hbar\left(\psi\frac{dV}{dx} + V\frac{d\psi}{dx}\right)(x) = -i\hbar\psi(x)\frac{dV(x)}{dx} - i\hbar V(x)\frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$= -i\hbar\psi(x)\frac{dV(x)}{dx} + V(x)\cdot\left[-i\hbar\left(\frac{d}{dx}\psi\right)(x)\right] = -i\hbar\psi(x)\frac{dV(x)}{dx} + (VP\psi)(x)$$

ist $PV = -i\hbar\frac{dV}{dx} + VP$, woraus folgt

$$[H,P] = HP - PH = \left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right]P - P\left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right]$$

$$= \frac{1}{2m}P^3 + VP - \frac{1}{2m}P^3 - PV = VP - PV$$

$$\Rightarrow\ [H,P]\psi = VP\psi - PV\psi = VP\psi - \left[-i\hbar\psi\frac{dV}{dx} + VP\psi\right] = i\hbar\frac{dV}{dx}\cdot\psi \quad\Rightarrow\quad [H,P] = i\hbar\frac{dV}{dx}$$

- Wegen

$$[XV\psi](x) = [X(V\psi)](x) = xV(x)\psi(x) = V(x)x\psi(x) = [V(X\psi)](x)$$

ist $XV = VX$, also

$$[H,X] = HX - XH = \left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right]X - X\left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right]$$

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

Weiterrechnen ergibt

$$[H,X]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}X - X\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\frac{d\psi}{dx} + X\frac{d^2\psi}{dx^2} - X\frac{d^2\psi}{dx^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{d}{dx}\psi = -\frac{i\hbar}{m}\cdot\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi = -\frac{i\hbar}{m}P\psi$$

das heißt

$$[H,X] = -\frac{i\hbar}{m}P$$

- Wegen

$$\left(P^2XP - XP^3\right)\psi = P^2XP\psi - XP^3\psi = P^2X\left[-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right] - X(-i\hbar)^3\frac{d^3\psi}{dx^3}$$

$$= -i\hbar P^2\left[x\frac{d\psi}{dx}\right] - i\hbar^3X\frac{d^3\psi}{dx^3} = -i\hbar\cdot(-i\hbar)^2\frac{d^2}{dx^2}\left(x\frac{d\psi}{dx}\right) - i\hbar^3X\frac{d^3\psi}{dx^3}$$

$$= i\hbar^3\left(2\frac{d^2\psi}{dx^2} + X\frac{d^3\psi}{dx^3}\right) - i\hbar^3X\frac{d^3\psi}{dx^3} = 2i\hbar^3\frac{d^2\psi}{dx^2} = -2i\hbar P^2\psi$$

ist $P^2XP - XP^3 = -2i\hbar P^2$. Wegen

$$(VXP - XPV)\psi = VXP\psi - XPV\psi = -i\hbar VX\frac{d\psi}{dx} - XP(V\cdot\psi) = -i\hbar VX\frac{d\psi}{dx} + i\hbar X\frac{d}{dx}V\psi$$

$$= -i\hbar VX\frac{d\psi}{dx} + i\hbar\underbrace{XV}_{VX}\frac{d\psi}{dx} + i\hbar X\psi\frac{dV}{dx} = i\hbar X\frac{dV}{dx}\psi$$

ist $VXP - XPV = i\hbar X\dfrac{dV}{dx}$, woraus folgt:

$$[H, XP] = HXP - XPH = \left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right] XP - XP\left[\frac{1}{2m}P^2 + V\right] = \frac{1}{2m}\left[P^2XP - XP^3\right] + VXP - XPV$$

$$= -\frac{2i\hbar}{2m}P^2 + i\hbar X\frac{dV}{dx} = -\frac{i\hbar}{m}P^2 + i\hbar X\frac{dV}{dx} \cong \frac{i\hbar^3}{m}\frac{d^2}{dx^2} + i\hbar X\frac{dV}{dx}$$

b) Betrachten den Operator $[H, X] = -\dfrac{i\hbar}{m}P$. In der Vorbetrachtung wurde gezeigt dass

$$\langle\varphi_n|\,[H, A]\,|\varphi_n\rangle = -\langle\varphi_n|\,[A, H]\,|\varphi_n\rangle = 0$$

ist, für beliebigen Operator A. Insbesondere gilt dies dann auch für $A = X$, also

$$0 = \langle\varphi_n|\,[H, X]\,|\varphi_n\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\langle\varphi_n|\,P\,|\varphi_n\rangle \;\rightarrow\; \langle\varphi_n|\,P\,|\varphi_n\rangle = 0$$

c)
- Aus Teil (a) wissen wir

$$[H, XP] = -\frac{i\hbar}{m}P^2 + i\hbar X\frac{dV}{dx}$$

  Aus der Vorbetrachtung wissen wir ferner

$$\langle\varphi_n|\,[H, XP]\,|\varphi_n\rangle = 0$$

  so dass wir schreiben

$$0 = \langle\varphi_n| - \frac{i\hbar}{m}P^2 + i\hbar X\frac{dV}{dx}\,|\varphi_n\rangle = -2i\hbar\,\langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle + i\hbar\,\langle\varphi_n|\,X\frac{dV}{dx}\,|\varphi_n\rangle$$

$$\Rightarrow\; \langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_n|\,X\frac{dV}{dx}\,|\varphi_n\rangle$$

- Nennen:

$$\overline{T}_n := \langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle \;\;,\;\; \overline{U}_n := \langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle$$

  die Erwartungswerte jeweils für die kinetische und die potentielle Energie.
- Speziell für $V = V_0X^k$ ist dann

$$\overline{T}_n = \langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_n|\,kXV_0X^{k-1}\,|\varphi_n\rangle = \frac{k}{2}\langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle = \frac{k}{2}\cdot\overline{U}_n$$

  Bemerke: Dieses Ergebnis entspricht genau dem Virialsatz der klassischen Mechanik:

$$\overline{T} = \frac{k}{2}\cdot\overline{U}$$

  in Systemen mit einem k-homogenen Potential, wie zum Beispiel hier der Fall ist!
- Da $H\varphi_n = E_n\varphi_n$ ist, gilt

$$\frac{1}{2m}P^2\varphi_n = H\varphi_n - V\varphi_n = [E_n - V]\,\varphi_n$$

  so dass wir schreiben können

$$\langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\,E_n - V\,|\varphi_n\rangle = E_n\,\langle\varphi_n\,|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle = E_n\,\langle\varphi_n\,|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle$$

  Unter Verwendung des vorigen Ergebnisses erhalten wir somit für den Spezialfall $V = V_0X^k$:

$$\frac{k}{2}\langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle = E_n\,\langle\varphi_n\,|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle \;\Rightarrow\; \langle\varphi_n|\,V\,|\varphi_n\rangle = \frac{2}{k+2}\cdot\langle\varphi_n\,|\varphi_n\rangle\cdot E_n$$

  und somit auch

$$\langle\varphi_n|\,\frac{P^2}{2m}\,|\varphi_n\rangle = \frac{k}{k+2}\cdot\langle\varphi_n\,|\varphi_n\rangle\cdot E_n$$

- Sind die $|\varphi_n\rangle$ ferner Normiert, so folgt für $V = V_0 X^k$:

$$\boxed{\overline{T}_n = \frac{k}{k+2} \cdot E_n \ , \ \overline{U}_n = \frac{2}{k+2} \cdot E_n \ , \ \overline{T}_n = \frac{k}{2} \cdot \overline{U}_n \ , \ \overline{T}_n + \overline{U}_n = E_n}$$

Aufgabe 14

Kommutativität

Durch direktes Ausrechnen zeigt sich

$$(A_{ij})(B_{ij}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = (B_{ij})(A_{ij})$$

das heißt die Matrizen $(A_{ij}), (B_{ij})$ kommutieren. Aus der linearen Algebra weis man: kommutieren die Matrizen von zwei Endomorphismen bzgl. einer Basis $e_1, .., e_n$ im endlich dimensionalen Raum V, so kommutieren auch die Endomorphismen, denn für $v = v^i e_i \in V$ ist

$$ABv = (AB)v^i e_i = v^i (AB)_i^k e_k = v^i (BA)_i^k e_k = (BA)v^i e_i = BAv$$

Eigenwerte

Bemerke: Rechnen kurzzeitig mit den Matrizen $A' := 2A, B' := 2B$. λ ist dann genau dann ein Eigenwert von A wenn 2λ ein Eigenwert von A' ist. Analoges auch für B.
Die charakteristischen Polynome $p_{A'}, p_{B'}$ der beiden Matrizen A', B' sind gegeben durch

$$p_{A'}(X) = \det(XI - A') = \det \begin{pmatrix} X-2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X-1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & X-1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X-2 \end{pmatrix} = (X-2)\det \begin{pmatrix} X-1 & -1 & 0 \\ -1 & X-1 & 0 \\ 0 & 0 & X-2 \end{pmatrix}$$

$$= (X-2)^2 \left[(X-1)^2 - 1 \right] = X(X-2)^3$$

$$p_{B'}(X) = \det(XI - B') = \det \begin{pmatrix} X & -1 & -1 & 0 \\ -1 & X & 0 & -1 \\ -1 & 0 & X & -1 \\ 0 & -1 & -1 & X \end{pmatrix}$$

$$= X \det \begin{pmatrix} X & 0 & -1 \\ 0 & X & -1 \\ -1 & -1 & X \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & X & -1 \\ -1 & -1 & X \end{pmatrix} - \det \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ X & 0 & -1 \\ -1 & -1 & X \end{pmatrix}$$

$$= X^4 - 4X^2 = X^2(X-2)(X+2)$$

woraus man sofort jeweils die Eigenwerte $\lambda_1' = 0, \lambda_2' = 2$ von A' und $\mu_1' = 0, \mu_2' = -2, \mu_3' = 2$ von B' ablesen kann. Somit ergeben sich die Eigenwerte von A bzw. B als $\lambda_1 = 0,\ \lambda_2 = 1$ bzw. $\mu_1 = 0,\ \mu_2 = -1,\ \mu_3 = 1$.

Eigenvektoren

Mittels Gauss-Jordan Verfahrens, das heißt lösen des linearen Geichungssystems

$$(A - \lambda I) \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} 2-\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_4 \end{pmatrix} = \vec{0}$$

erhält man jeweils den Eigenraum zu λ. So ergibt sich der Eigenvektor $v_1 = (0, -1, 1, 0)$ zu $\lambda_1 = 0$ und die linear unabhängigen Eigenvektoren

$$v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; v_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; v_4 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

zu $\lambda_2 = 1$. Analog geht man auch für B vor, und erhält zu $\mu_1 = 0$ die linear unabhängigen Eigenvektoren

$$u_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und zu $\mu_2 = -1,\ \mu_3 = 1$ jeweils die Eigenvektoren

$$u_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; u_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Wir sehen dass

$$b_1 := v_3 = u_4 \;,\; b_2 := v_4 = u_1 \;,\; b_3 := v_1 = u_2$$

schonmal linear unabhängig sind und alles Eigenvektoren von A bzw. B sind. *Unbenutzt* bleiben jedoch noch v_2 und u_3. Zum Glück ist

$$E_{-1}(B) \ni u_3 = 2v_2 - v_3 \in E_1(A)$$

Setzen also $b_4 := u_3$ so dass

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

alles Eigenvektoren von A und B sind, und ferner linear unabhängig sind, da

$$\det \begin{pmatrix} - & b_1 & - \\ - & b_2 & - \\ - & b_3 & - \\ - & b_4 & - \end{pmatrix} = 8 \neq 0$$

Somit bilden $\{b_i\}$ eine Basis von $\mathbb{C}^4$. Um diese ferner zu normieren, setzen wir

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

und erhalten so eine normierte Basis aus Eigenvektoren von A bzw. B:

$$\boxed{b_1' = |1,1\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; b_2' = |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; b_3' = |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \;,\; b_4' = |1,-1\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

Zu erkennen ist: die $\{b_i\}$ sind eindeutig durch ihre entsprechenden Eigenwerte bzgl. A und B gegeben.

Entartung der gemeinsamen Eigenvektoren

Ein System $\{A_1, .., A_m\}$ erfüllt die gestellte Bedingung genau dann <u>nicht</u>, wenn es mindestens 2 Vektoren $0 \neq v, w \in V$ gibt, die jeweils zu A_i den (gemeinsamen) Eigenwert a_i haben, und doch linear unabhängig sind. Das heißt

$$v, w \in E_{a_i}(A_i)\ \forall\ i = 1, .., m \quad \wedge\ v, w \text{ linear unabhängig}$$

für irgendwelche $a_1, .., a_m$, was genau dann der Fall ist wenn

$$\dim \left\{ \bigcap_{i=1}^{m} E_{a_i}(A_i) \right\} \geq 2$$

ist. Anders formuliert: Das System $\{A_1, .., A_m\}$, wobei A_j jeweils die Eigenwerte $\lambda_j^1, .., \lambda_j^{r_j}$ besitzt, erfüllt die Bedingung genau dann, wenn für alle

$$\vec{S} = (S_1, .., S_m) \in \{1, .., r_1\} \times \{1, .., r_2\} \times \cdots \times \{1, .., r_m\}$$

gilt:

$$\dim \bigcap_{i=1}^{m} E_{\lambda_i^{S_i}}(A_i) \leq 1$$

Legen also los:

- Die Eigenvektoren von A sind teilweise Entartet, das heißt $\dim E_1(A) = 3$, denn die linear unabhängigen Eigenvektoren v_2, v_3, v_4 gehören alle zu dem Eigenwert $\lambda_2 = 1$. Somit erfüllt $\{A\}$ nicht diese Bedingung.
- Analoges gilt auch für B, da die linear unabhängigen Eigenvektoren u_1, u_2 beide zu dem Eigenwert $\mu_1 = 0$ von B gehören. Somit erfüllt auch $\{B\}$ nicht diese Bedingung.
- Das System $\{A, B\}$ erfüllt die gestellte Bedingung.

  Beweis durch Widerspruch: Seien $v, w \in V$ zwei, zu A und B gemeinsame, Eigenvektoren, beide mit dem Eigenwert a bzgl. A und dem Eigenwert b bzgl. B, und so dass sie kein Vielfaches von einander sind.

  Dann muss wegen $\dim E_1(B) = 1$ gelten: $b \neq 1$, denn sonst würden $v, w \in E_1(B)$ linear abhängig von einander sein. Analog, muss wegen $\dim E_{-1}(B) = 1$ auch $b \neq -1$ sein. Somit muss $b = 0$ sein, das heißt $v, w \in E_0(B)$.

  Mit der gleichen Argumentation, ergibt sich dass wegen $\dim E_0(A) = 1$ auch $a \neq 0$ also $a = 1$ gelten muss. Also muss $(a, b) = (1, 0)$ sein. Somit müsste nach obiger Vorüberlegung gelten: $\dim \{E_1(A) \cap E_0(B)\} \geq 2$.

  Suchen also eine Darstellung für $E_1(A) \cap E_0(B)$. Setzen dafür $z \in E_1(A) \cap E_0(B)$, schreiben also:

  $$z = \underbrace{x_1 v_2 + x_2 v_3 + x_3 v_4}_{\in E_1(A)} = \underbrace{y_1 \overbrace{u_1}^{v_4} + y_2 u_2}_{\in E_0(B)}$$

  $$\Rightarrow \quad x_1 v_2 + x_2 v_3 + (x_3 - y_1) v_4 - y_2 u_2 = 0$$

  Doch die Vektoren v_2, v_3, v_4, u_2 sind linear unabhängig, denn

  $$\det \begin{pmatrix} - & v_2 & - \\ - & v_3 & - \\ - & v_4 & - \\ - & u_2 & - \end{pmatrix} = 4 \neq 0$$

  so dass $x_1 = x_2 = y_2 = x_3 - y_1 = 0$ sein muss, also $z = x_3 v_4$. Somit ist zwangsmäßig $\dim \overbrace{E_1(A) \cap E_0(B)}^{\mathrm{span}\{v_4\}} = 1$ was ein Widerspruch zur Annahme ist. $\square$