Quantenmechanik I

FSU Jena - SS 08

Serie 06 - Lösungen

Stilianos Louca

26. Mai 2008

Notationen:

- Für $z \in \mathbb{C}$ sei $\overline{z}$: komplex konjugierte.
- Für einen Endomorphismus F bezeichne $E_\lambda(F)$ den Eigenraum von F bzgl. des Eigenwertes λ.

Aufgabe 15

a) Beginnen mit der bekannten Ortsdarstellung von P und $V(\mathbf{R})$:

$$\langle \vec{r}| P |\psi\rangle = -i\hbar\nabla \langle \vec{r} |\psi\rangle = -i\hbar\nabla \langle \vec{r} |\psi\rangle \quad , \quad \langle \vec{r}| V(\mathbf{R}) |\psi\rangle = V(\vec{r}) \langle \vec{r} |\psi\rangle = V(\vec{r}) \langle \vec{r} |\psi\rangle$$

und gehen damit in die Schrödinger-Gleichung ein:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r}| i\hbar\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \langle \vec{r}| H |\psi(t)\rangle = \langle \vec{r}| \frac{1}{2m}P^2 + V |\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m} \langle \vec{r}| P^2 |\psi(t)\rangle + \langle \vec{r}| V |\psi(t)\rangle$$

$$\overset{*}{=} \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \underbrace{\nabla\nabla}_{\Delta} \langle \vec{r} |\psi(t)\rangle + V(\vec{r}) \langle \vec{r} |\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \langle \vec{r} |\psi(t)\rangle + V(\vec{r}) \langle \vec{r} |\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \quad \square$$

$(*)$: **Alternativ ist:** $\langle \vec{r}| P^2 |\psi\rangle = \langle \vec{r}| P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 |\psi\rangle = (-i\hbar)^2 \left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2\right) \langle \vec{r} |\psi\rangle = -\hbar^2\Delta \langle \vec{r} |\psi\rangle$

b) **Lemma 1**

Für differenzierbare Funktionen $\psi(t), \varphi(t)$ in einem Hilbertraum mit beliebigem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ gilt:

$$\partial_t \langle \psi(t), \varphi(t)\rangle = \langle \partial_t\psi(t), \varphi(t)\rangle + \langle \psi(t), \partial_t\varphi(t)\rangle$$

Beweis: Das Skalarprodukt ist bekanntlich stetig. Somit gilt:

$$\partial_t \langle \psi(t), \varphi(t)\rangle = \lim_{h\to 0} \frac{\langle \psi(t+h), \varphi(t+h)\rangle - \langle \psi(t), \varphi(t)\rangle}{h} = \lim_{h\to 0} \left\{ \left\langle \frac{\psi(t+h)}{\overline{h}}, \varphi(t+h) \right\rangle - \left\langle \psi(t), \frac{\varphi(t)}{h} \right\rangle \right\}$$

$$= \lim_{h\to 0} \left\{ \left\langle \frac{\psi(t+h)-\psi(t)}{\overline{h}}, \varphi(t+h) \right\rangle + \left\langle \frac{\psi(t)}{\overline{h}}, \varphi(t+h) \right\rangle - \left\langle \psi(t), \frac{\varphi(t)-\varphi(t+h)}{h} \right\rangle - \left\langle \psi(t), \frac{\varphi(t+h)}{h} \right\rangle \right\}$$

$$\overset{\text{Stetigkeit}}{=} \left\langle \lim_{h\to 0} \frac{\psi(t+h)-\psi(t)}{\overline{h}}, \varphi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t), \lim_{h\to 0} \frac{\varphi(t+h)-\varphi(t)}{h} \right\rangle + \lim_{h\to 0} \underbrace{\left\{ \frac{1}{h} \langle \psi(t), \varphi(t+h)\rangle - \frac{1}{h} \langle \psi(t), \varphi(t+h)\rangle \right\}}_{0}$$

$$= \langle \partial_t\psi(t), \varphi(t)\rangle + \langle \psi(t), \partial_t\varphi(t)\rangle \quad \square$$

Somit folgt Speziell in unserem Fall:

$$\partial_t \langle A \rangle = \partial_t \langle \psi(t) \, | A(t)\psi(t) \rangle = \langle \partial_t \psi(t) \, | A(t)\psi(t) \rangle + \langle \psi(t) \, | \partial_t (A\psi)(t) \rangle$$

$$= \langle \partial_t \psi(t) | \, A \, | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) \, | A \partial_t \psi(t) \rangle + \underbrace{\langle \psi(t) \, | (\partial_t A)\psi(t) \rangle}_{\langle \partial_t A \rangle}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \langle i\hbar \partial_t \psi(t) | \, A \, | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) \, | A i\hbar \partial_t \psi(t) \rangle + \langle \partial_t A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle H\psi(t) | \, A \, | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) \, | AH\psi(t) \rangle + \langle \partial_t A \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \, H^\dagger A \, | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \, AH \, | \psi(t) \rangle + \langle \partial_t A \rangle \overset{H=H^\dagger}{=} \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \, HA \, | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \, AH \, | \psi(t) \rangle + \langle \partial_t A \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \, HA - AH \, | \psi(t) \rangle + \langle \partial_t A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [HA] \rangle + \langle \partial_t A \rangle \quad \square$$

Bemerkungen:

- Für $\lambda \in \mathbb{C}$ und Operatoren A, B gilt:

$$\langle \lambda A + B \rangle = \langle \psi(t) | \, \lambda A + B \, | \psi(t) \rangle = \lambda \langle \psi(t) | \, A \, | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \, B \, | \psi(t) \rangle = \lambda \langle A \rangle + \langle B \rangle$$

  Somit ist $\langle \cdot \rangle$ eine lineare Abbildung. Insbesondere ist dann $\langle 0 \rangle = 0$.
- Für zeitunabhängige Operatoren A ($\partial_t A = 0$) ist also

$$\langle \partial_t A \rangle = \langle 0 \rangle = 0$$

c) **Annahme:** Die ψ erfüllen stets die Schrödingergleichung.
Aus Übungsserie (05) wissen wir:

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

Unter Verwendung des vorigen Ergebnisses schreiben wir also

$$\partial_t \langle X \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, X] \rangle + \underbrace{\langle \partial_t X \rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t X = 0}} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | - \frac{i\hbar}{m} P \, | \psi(t) \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | \, P \, | \psi(t) \rangle = \frac{1}{m} \langle P \rangle$$

$$\partial_t \langle P \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, P] \rangle + \underbrace{\langle \partial_t P \rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t P = 0}} = \frac{i}{\hbar} \left\langle i\hbar \frac{dV}{dx} \right\rangle \overset{*}{=} - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \overset{*}{=} - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

$(*)$: Linearität von $\langle \cdot \rangle$

Bemerkungen:

- Fassen wir $\frac{1}{m} \langle P \rangle$ als *erwartete* Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ und $\langle X \rangle$ als *erwarteten* Ort auf, so entspricht $\partial_t \langle X \rangle = \partial_t \langle v \rangle$ genau den Prinzipien der Kinetik.
- Unter Verwendung von $\partial_t \langle X \rangle = \frac{1}{m} \langle P \rangle$ bekommt man die Beziehung

$$\partial_t \langle P \rangle = m \cdot \partial_{t^2} \langle X \rangle$$

  Fasst man $\partial_{t^2} \langle X \rangle$ als die *Beschleunigung* des *erwarteten* Ortes auf, so entspricht oberes genau der Newtonschen Mechanik $\dot{p} = m\ddot{x}$.
- Fassen wir ferner $\langle \partial_x V \rangle$ als den erwarteten Gradienten der potentielle Energie auf, so entspricht

$$\partial_t \langle P \rangle = - \langle \partial_x V \rangle$$

  genau der klassischen Dynamik: $\dot{p} = F = -\operatorname{grad} V(\vec{r})$.

d) Aus Übungsserie (05) wissen wir

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

Unter Verwendung voriger Ergebnisse können wir also schreiben

$$\partial_t \langle XP \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, XP] \rangle + \underbrace{\langle \partial_t(XP) \rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t(PX)=0}} = \frac{i}{\hbar} \left\langle -\frac{i\hbar}{m}P^2 + i\hbar X\frac{dV}{dx} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle P^2 \rangle - \left\langle X\frac{dV}{dx} \right\rangle$$

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

Für stationäre Zustände $|\psi(t)\rangle$ gilt: $|\psi(t)\rangle$ sind Eigenvektoren des Hamilton-Operators zu reellen Eigenwerten (Energieeigenwerte):

$$H |\psi(t)\rangle = E |\psi(t)\rangle$$

und sie spannen den Raum aller stationären Zustände auf. Aus Übungsserie (05) wissen wir über Eigenzustände des Hamilton-Operators:

$$[H, A] = 0 \;\text{ für beliebigen Operator } A$$

Somit ist insbesondere für $A = XP$:

$$\partial_t \langle XP \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, XP] \rangle + \underbrace{\langle \partial_t(XP) \rangle}_{\substack{0 \\ \text{da } \partial_t(PX)=0}} = \frac{i}{\hbar} \langle 0 \rangle = 0$$

also ist

$$2\langle T \rangle = \langle X\nabla V \rangle$$

e) **Lemma 1**

Für eine n-homogene Funktion $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R},\; n \in \mathbb{Z}$ gilt: Alle partiellen Ableitungen von f sind $(n-1)$-homogen.

Beweis: Für $t \neq 0$ gilt:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(t \cdot \vec{r}) = \lim_{h\to 0} \frac{f(tx_1, ..., tx_i + h, ..., tx_n) - f(tx_1, ..., tx_n)}{h} = \lim_{h\to 0} \frac{f(tx_1, ..., tx_i + th, ..., tx_n) - f(tx_1, ..., tx_n)}{th}$$

$$= \lim_{h\to 0} t^n \cdot \frac{f(x_1, ..., x_i + h, ..., x_n) - f(x_1, ..., x_n)}{th} = t^{n-1} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, ..., x_n)$$

Für $t = 0$ gilt

$$\partial_i f(0\cdot\vec{r}) = \partial_i f(0) = \lim_{\pi h\to 0} \frac{f(0, ..., \pi h, ..., 0) - f(0)}{\pi h} = \lim_{\pi h\to 0} \frac{\pi^n f(0, ..., h, ..., 0)}{\pi h} = \pi^{n-1}\cdot \lim_{h\to 0} \frac{f(0, ..., h, ..., 0)}{h} = \pi^{n-1}\partial_i f(0)$$

also

$$\partial_i f(0 \cdot \vec{r}) = 0 = 0^n \cdot \partial_i f(\vec{r})$$

Lemma 2

Für eine n-homogene Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\; n \in \mathbb{Z}$ gilt: $\vec{r} \cdot \operatorname{grad} f(\vec{r}) = n \cdot f(\vec{r})$.

Beweis: Wegen n-homogenität ist klar dass: $f(0) = f(0 \cdot 0) = 0^n \cdot f(0) = 0$. Da $\partial_i f$ (n-1) homogen ist, ist $f' = \operatorname{grad} f$ auch (n-1) homogen. Nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung gilt somit:

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r}) - f(0) = \int_0^1 f'(t \cdot \vec{r})\vec{r} \cdot dt = \int_0^1 t^{n-1} f'(\vec{r})\vec{r} dt = f'(\vec{r})\vec{r} \int_0^1 t^{n-1} dt = f'(\vec{r})\vec{r} \cdot \frac{1}{n}$$

$$\Rightarrow\; \vec{r} f'(\vec{r}) = \vec{r} \cdot \operatorname{grad} f(\vec{r}) = n \cdot f(\vec{r}) \quad \square$$

Spezialfall:

In unserem Fall ist $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ n-homogen, so dass nach obigem Lemma gilt

$$x \cdot \partial_x V(x) = n \cdot V(x) \;\to\; X \operatorname{grad} V = nV$$

Wegen $2\langle T\rangle = \langle X \operatorname{grad} V\rangle$ folgt unmittelbar

$$2\langle T\rangle = \langle nV\rangle = n\langle V\rangle \quad \square$$

Aus Übungsserie (05) haben wir für Eigenzustände $|\psi\rangle$ des Hamilton Operators H mit dem Energieeigenwert E gesehen

$$\langle\psi(t)|\,\frac{P^2}{2m}\,|\psi(t)\rangle = \langle T\rangle = E\,\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\,V\,|\psi(t)\rangle = E\,\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle - \langle V\rangle$$

Speziell für n-homogene Potentiale V ist dann

$$\langle V\rangle = \frac{2}{n}\langle T\rangle \;\to\; \langle T\rangle = E\,\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle - \frac{2}{n}\langle T\rangle \;\to\; \langle T\rangle = \frac{nE}{n+2}\,\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle$$

Betrachten wir nur normierte Zustände, so ergibt sich allgemein

$$\boxed{\langle T\rangle = E - \langle V\rangle}$$

und für n-homogene Potentiale

$$\boxed{\langle T\rangle = \frac{nE}{n+2}}$$

Das Potential $V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2X^2$ ist offensichtlich 2-homogen, denn

$$V(\alpha X) = \frac{1}{2}m\omega^2(\alpha X)^2 = \alpha^2 V(X)$$

Somit ergibt sich nach obiger Überlegung

$$\langle T\rangle = \frac{2E}{2+2} = \frac{E}{2}$$

Analog ist das Potential $V(X) = -e^2X^{-1}$ (-1)-homogen, denn

$$\alpha \neq 0 : V(\alpha X) = -e^2(\alpha X)^{-1} = \frac{1}{\alpha}V(X)$$

Somit ergibt sich

$$\langle T\rangle = \frac{-E}{-1+2} = -E$$

Aufgabe 16

Das skalarprodukt ist auf $L^2[-a,a]$ gegeben durch

$$\langle f, g\rangle := \int_{-a}^{a} \overline{f(x)} \cdot g(x)\; dx$$

a) Es gilt:

$$(\Pi\Pi\psi)(x) = (\Pi(\Pi\psi))(x) = (\Pi\psi)(-x) = \psi(-(-x)) = \psi(x) \;\to\; \Pi\Pi\psi = \psi \;\to\; \Pi\Pi = \mathrm{Id} \;\to\; \Pi = \Pi^{-1}$$

und ferner für beliebige $f, g \in L^2[-a, a]$:

$$\langle \Pi f, g \rangle = \int\limits_{-a}^{a} \overline{(\Pi f)(x)} \cdot g(x)\ dx = \int\limits_{-a}^{a} \overline{f(-x)} g(x)\ dx \overset{\text{Sub:}u:=-x}{=} \int\limits_{a}^{-a} \overline{f(u)} g(-u)\ (-du)$$

$$= \int\limits_{-a}^{a} \overline{f(u)} g(-u)\ du = \int\limits_{-a}^{a} \overline{f(u)} (\Pi g)(u)\ du = \langle f, \Pi g \rangle \quad \rightarrow \quad \Pi = \Pi^\dagger \quad \square$$

b) Da Π selbstadjungiert ist, sind alle Eigenwerte von Π reell. Sei $\lambda \in \mathbb{R}$ ein beliebiger Eigenwert von π und $f \in E_\lambda(\Pi)$, das heißt $\Pi f = \lambda f$. Da $\Pi\Pi = \text{Id}$ ist, folgt

$$\lambda^2 f = \Pi(\lambda f) = \underbrace{\Pi\Pi}_{\text{Id}} f = f \ \rightarrow\ \lambda^2 = 1 \overset{\lambda \in \mathbb{R}}{\longrightarrow} \lambda = \pm 1 \quad \square$$

Umgekehrt sind sowohl gerade Funktionen f_g und ungerade Funktionen f_u Eigenfunktionen, denn

$$(\Pi f_g)(x) = f_g(-x) \overset{f_g \text{ gerade}}{=} f_g(x) \ \rightarrow\ f_g \in E_1(\Pi)$$

$$(\Pi f_u)(x) = f_u(-x) \overset{f_u \text{ ungerade}}{=} -f_u(x) \ \rightarrow\ f_u \in E_{-1}(\Pi)$$

c) Sei $f \in L^2[-a, a]$ beliebig. Dann gilt:

$$(\Pi_+ f)(x) = \frac{1}{2}\left(f(x) + (\Pi f)(x)\right) = \frac{1}{2}\left(f(x) + f(-x)\right)$$

$$\rightarrow\ (\Pi_+ f)(-x) = \frac{1}{2}\left(f(-x) + f(x)\right) = \frac{1}{2}\left(f(x) + f(-x)\right) = (\Pi_+ f)(x)$$

also ist $\Pi_+ f$ gerade. Analog wegen

$$(\Pi_- f)(x) = \frac{1}{2}\left(f(x) - (\Pi f)(x)\right) = \frac{1}{2}\left(f(x) - f(-x)\right)$$

$$\rightarrow\ (\Pi_- f)(-x) = \frac{1}{2}\left(f(-x) - f(x)\right) = -\frac{1}{2}\left(f(x) - f(-x)\right) = -(\Pi_- f)(x)$$

$\Pi_- f$ immer ungerade. Somit bilden Π_+, Π_- jeweils in die Eigenräume $E_1(\Pi)$ und $E_{-1}(\Pi)$ ab, das heißt

$$\operatorname{image} \Pi_\pm \subset E_{\pm 1}(\Pi)$$

Insbesondere gilt für beliebige gerade Funktion f bzw. ungerade Funktion g:

$$(\Pi_+ f)(x) = \frac{1}{2}(f(x) + \underbrace{f(-x)}_{f(x)}) = f(x) \ \rightarrow\ \Pi_+ f = f \ \rightarrow\ f \in \operatorname{image} \Pi_+ \ \wedge\ \Pi_+ |_{E_1(\Pi)} = \text{Id}$$

$$(\Pi_- g)(x) = \frac{1}{2}(g(x) - \underbrace{g(-x)}_{-g(x)}) = g(x) \ \rightarrow\ \Pi_- g = g \ \rightarrow\ g \in \operatorname{image} \Pi_- \ \wedge\ \Pi_- |_{E_{-1}(\Pi)} = \text{Id}$$

Somit ist auch $E_{\pm 1}(\Pi) \subset \operatorname{image} \Pi_\pm$. Also ist

$$E_{\pm 1}(\Pi) = \operatorname{image} \Pi_\pm$$

und ferner für beliebige f:

$$\Pi_+ \underbrace{\Pi_+ f}_{\in E_1(\Pi)} = f \quad , \quad \Pi_- \underbrace{\Pi_- f}_{\in E_{-1}(\Pi)} = f$$

das heißt die $\Pi_\pm$ sind idempotent. Somit sind sie definitionsgemäß Projektoren jeweils auf $E_{\pm 1}(\Pi)$.

d) Sei $f \in L^2[-a,a]$ beliebig. Dann gilt:

$$(\Pi X \underbrace{\Pi^{-1}}_{\Pi} f)(x) = (X\Pi f)(-x) = X(\Pi f)(-x) = -x(\Pi f)(-x) = -xf(-(-x)) = -xf(x)$$

$$\rightarrow\ \Pi X \underbrace{\Pi^{-1}}_{\Pi} f = -Xf\ \rightarrow\ \Pi X \underbrace{\Pi^{-1}}_{\Pi} = -X$$

das heißt X ist ungerade. Betrachten nun beliebige differenzierbare Funktion g. Setzen

$$u(x) := -x \text{ und } f(x) := g(u(x)) = g(-x)$$

Dann folgt:

$$\frac{df}{dx}(x) = \frac{dg}{du}(u(x)) \underbrace{\frac{du}{dx}}_{-1}(x) = -\frac{dg}{du}(-x) \cong -\frac{dg}{dx}(-x)$$

Somit ist:

$$(\Pi f)(x) := f(-x)\ \rightarrow\ \frac{d(\Pi f)}{dx}(x) = -\frac{df}{dx}(-x)$$

$$\rightarrow\ (P\Pi f)(x) = P(\Pi f)(x) = -i\hbar\frac{d(\Pi f)}{dx}(x) = i\hbar\frac{df}{dx}(-x)$$

$$\rightarrow\ (\Pi P \Pi^{-1} f)(x) = \Pi(P\Pi f)(x) = (P\Pi f)(-x) = i\hbar\frac{df}{dx}(x) = -(Pf)(x)$$

$$\rightarrow\ \Pi P \Pi^{-1} f = -Pf\ \rightarrow\ \Pi P \Pi^{-1} = -P$$

das heißt P ist auch ungerade. $\square$

e) Sei $\lambda \in \{-1, 1\}$ der gemeinsame Eigenwert von ψ_1, ψ_2 und A ein ungerader Operator auf $\mathcal{H}$. Da A ungerade ist gilt insbesondere

$$-A\psi_2 = \Pi A \Pi^{-1}\psi_2 = \Pi A \Pi \psi_2 = \lambda \Pi A \psi_2 \quad (*)$$

Da $\Pi\Pi = \mathrm{Id}$ ist, folgt:

$$\langle\psi_1|\, A\, |\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\, \Pi\Pi A\, |\psi_2\rangle = \left\langle \Pi^\dagger \psi_1 \,|\Pi A \psi_2\right\rangle \overset{\Pi = \Pi^\dagger}{=} \langle \Pi\psi_1 \,|\Pi A\psi_2\rangle$$

$$= \langle \lambda\psi_1 \,|\Pi A \psi_2\rangle = \overline{\lambda}\,\langle\psi_1|\, \Pi A\, |\psi_2\rangle \overset{\lambda = \overline{\lambda}}{=} \langle\psi_1 \,|\lambda \Pi A \psi_2\rangle \overset{*}{=} -\langle\psi_1|\, A\, |\psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow\ \langle\psi_1|\, A\, |\psi_2\rangle = 0 \quad \square$$