6. Übung zur Quantenmechanik I, Lösungen

Wintersemester 2011/2012

TUTORIUM: Freitag, 18.11.2011.

11. Operatoren in Bra-Ket-Schreibweise

1+1+1+1=4 Punkte

Es sei ein Vektorraum mit den beiden orthonormierten Basiszuständen $|1\rangle$ und $|2\rangle$ gegeben, sowie der Zustand $|\psi\rangle = 5|1\rangle \;+\; i|2\rangle$.

a) Normieren Sie den Zustand $|\psi\rangle$ und finden sie einen normierten Zustand, der orthogonal zu $|\psi\rangle$ ist

$$\|\psi\| = \langle\psi|\psi\rangle \stackrel{!}{=} 1$$

$$\langle\psi|\psi\rangle \Leftrightarrow 25\langle 1|1\rangle + 1\langle 2|2\rangle = 26 \;\Rightarrow\; |\psi\rangle_{norm} = \frac{1}{\sqrt{26}}\left(5|1\rangle + \; i|2\rangle\right)$$

Orthogonalität: Zwei Kets $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ sind orthogonal, wenn gilt $\langle\psi|\phi\rangle = 0$.
D.h. $|\phi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$ allgemein ansetzen und Koeffizienten über $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ bestimmen:

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0 = \alpha * 5\langle 1|1\rangle - \beta * i\langle 2|2\rangle \;\Rightarrow\; \beta = -i * \alpha * 5$$

Gleichungssystem unterbestimmt, z.B. $\alpha = i$ setzen, folgt $\beta = 5$, nach Normierung:

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{26}}\left(i|1\rangle + 5|2\rangle\right)$$

Anm.: Da es sich um einen 2-d Vektorraum handelt, kann man den Orthogonalvektor auch einfach durch ersetzen von $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix} -y* \\ x* \end{pmatrix}$ erhalten.

b) Es sei der Operator

$$H = |1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| - i|1\rangle\langle 2| + i|2\rangle\langle 1|$$

gegeben. Geben Sie die Matrixdarstellung dieses Operators in der Basis $|1\rangle$, $|2\rangle$ an. Ist dieser Operator hermitesch?

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}$$

H ist hermitesch.

c) Berechnen Sie $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$. Dies ist der Erwartungswert des Operators H im Zustand $|\psi\rangle$

Mit $|\psi\rangle = 5|1\rangle + i|2\rangle$:

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= 6|1\rangle + i4|2\rangle \\ \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} &= \frac{34}{26} = \frac{17}{13} \end{aligned}$$

d) Geben Sie die unitäre Transformation U (d.h. $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$) in Dirac-Notation von der Basis $|1\rangle$, $|2\rangle$ in die Eigenbasis von H an.

Eigenwerte & Eigenvektoren von H berechnen:

$$\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{2}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \gamma \begin{pmatrix} 1+\sqrt{2} \\ i \end{pmatrix} \;\Rightarrow\; |b_1\rangle = \gamma\left[(1+\sqrt{2})|1\rangle + i|2\rangle\right] \\ \mathbf{b}_2 &= \gamma \begin{pmatrix} i \\ 1+\sqrt{2} \end{pmatrix} \;\Rightarrow\; |b_2\rangle = \gamma\left[i|1\rangle + (1+\sqrt{2})|2\rangle\right] \text{ mit } \gamma = \tfrac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}} \end{aligned}$$

Die unitäre Transformation von der Eigenbasis in $|1\rangle$, $|2\rangle$ ist gerade die Matrix der normierten Eigenvektoren in dieser Basis, d.h.

$$\begin{aligned} U^\dagger = (\mathbf{b}_1,\, \mathbf{b}_2) &= \gamma \begin{pmatrix} 1+\sqrt{2} & i \\ i & 1+\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ \hookrightarrow U &= \gamma \begin{pmatrix} 1+\sqrt{2} & -i \\ -i & 1+\sqrt{2} \end{pmatrix} \text{ mit } \gamma = \tfrac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}} \end{aligned}$$

Bzw. in Dirac-Notation:

$$\begin{aligned} U^\dagger &= |b_1\rangle\langle 1| + |b_2\rangle\langle 2| \\ \hookrightarrow U &= |1\rangle\langle b_1| + |2\rangle\langle b_2| \\ &\text{bzw.} \\ U &= \gamma\left[(1+\sqrt{2})(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) - i(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)\right] \end{aligned}$$

12. Schrödinger-Gleichung in Impuls-Darstellung *3+1+2=6 Punkte*

a) Lösen Sie die Schrödinger-Gleichung in Impuls-Darstellung für das Potential $V(x) = -\varepsilon x$ mit $\varepsilon > 0$.

Mit $\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p' |p'\rangle\langle p'|$, $\langle p|\hat{P}|p'\rangle = p\,\delta(p-p')$, $\langle p|\hat{X}|p'\rangle = +i\hbar\partial_p\,\delta(p-p')$, $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$

$$\left[\frac{\hat{P}^2}{2m} - \varepsilon\,\hat{X}\right]|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p' |p'\rangle\langle p'|\psi\rangle$ und von links mit $\langle p|$ multiplizieren liefert:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p' \left[\tfrac{1}{2m}\langle p|\hat{P}^2|p'\rangle - \varepsilon\langle p|\hat{X}|p'\rangle\right]\langle p'|\psi\rangle &= E\langle p|\psi\rangle \\
\hookrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p' \left[\frac{p^2}{2m}\,\delta(p-p') - \varepsilon i\hbar\partial_p\,\delta(p-p')\right]\psi_E(p') &= E\psi_E(p) \\
\hookrightarrow \left[\frac{p^2}{2m} - i\varepsilon\hbar\partial_p\right]\psi_E(p) &= E\psi_E(p)
\end{aligned}
$$

Lösen dieser homogenen GDL 1.Ordnung liefert:

$$\psi_E(p) = A\exp\left(-\tfrac{i}{\hbar\varepsilon}\left(\tfrac{p^3}{6m} - Ep\right)\right)$$

Anm.: $+i\hbar\partial_p\,\delta(p-p') \Leftrightarrow -i\hbar\partial_{p'}\,\delta(p-p')$, da die Ableitung der Delta-Funktion ungerade ist.

b) Normieren Sie die Lösungen $\psi_E(p)$ der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung zur Energie E, gemäß

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\ \psi_E^*(p)\psi_{E'}(p) = \delta(E-E')$$

Mit $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k e^{i(x-x')k} = 2\pi\,\delta(x-x')$ folgt $|A| = 1/\sqrt{2\pi\,\hbar\varepsilon}$

c) Zeigen Sie, dass die Eigenfunktion im Ortsraum folgende Form hat:

$$\psi_E(x) = \tfrac{\alpha}{\sqrt{\pi\varepsilon}}\mathrm{Ai}\left[-\alpha(x+\tfrac{E}{\varepsilon})\right]$$

mit der Airy funktion

$$\mathrm{Ai}(y) = \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\ \cos\left(\frac{t^3}{3} + ty\right)$$

$\psi_E(x)$ ist die Fourier-Transformierte von $\psi_E(p)$:

$$
\begin{aligned}
\psi_E(x) = \langle x|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\ \psi_E(p)e^{ixp/\hbar} \\
&= \frac{1}{2\pi\sqrt{\hbar\varepsilon}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\ \exp\left(-\tfrac{i}{\hbar}\left(\tfrac{p^3}{6m\varepsilon} - (x+\tfrac{E}{\varepsilon})p\right)\right)
\end{aligned}
$$

Durch Variablensubstitution $p = \sqrt[3]{2m\hbar\varepsilon}\cdot t$ erhält man für $\alpha = \sqrt[3]{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$.

Sieht man sich nun Real- und Imaginärteil an, sieht man, dass $\mathrm{Im}\left[\psi_E(x)\right] = 0$ ist, da Integrand eine ungerade Funktion. Der Realteil ist nun identisch mit $\psi_E(x)$, wobei noch

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,g\,(t) = 2\cdot\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\,g\,(t)\ \text{ , mit } g(t)\ldots\text{gerade Funktion}$$

ersetzt wird.

$\square$

Eine weitere Möglichkeit zu zeigen, dass $\psi_E(x)$ eine Lösung ist, ist direkt in die Schrödinger-Glg einzusetzen, wobei man hier die Eigenschaft der Airy-Funktion ausnutzen muss, dass gilt:

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Ai}(y)}{\mathrm{d}y^2} - y\mathrm{Ai}(y) = 0$$

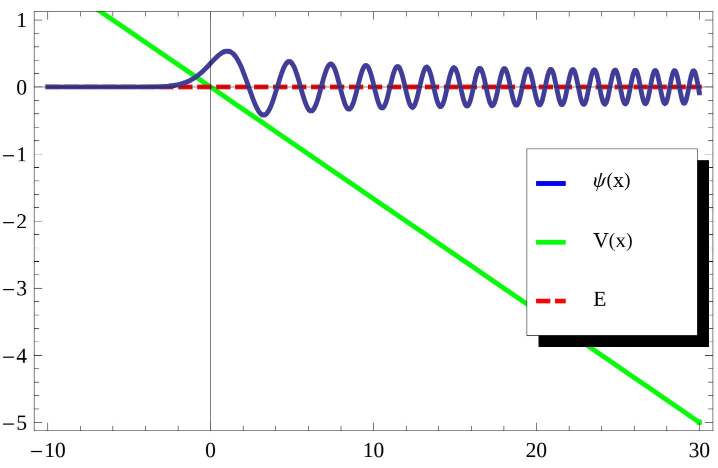

Abbildung 1: Wellenfunktion $\psi_E(x)$ im Rampenpotential $V(x) = -\varepsilon \cdot x$, mit $\varepsilon > 0$ für $\alpha = 1$, $\varepsilon = 1/7$, $E = 0$

Man kann diese Identität durch den Vergleich der zweimaligen Ableitung von Ai nach y mit yAi (wobei man den Integranden als Differenz aus einer Ableitung nach t und einem Differenzterm darstellt, s.u.) beweisen, es tritt jedoch ein divergenter (oszillierender) Randterm auf, der durch Einführung einer exponentiellen Dämpfung $e^{-\varepsilon t}$ und anschließend $\varepsilon \to 0$ entfernt werden muss. (Den Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$ setzt man unten auf 1)

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Ai}(y)}{\mathrm{d}y^2} = -\int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^2 \cos\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right)$$

$$y\mathrm{Ai}(y) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, y \cos\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right) \Leftrightarrow \int_0^\infty \mathrm{d}t\,(y + t^2) \cos\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right) - \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^2 \cos\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right)$$

$$= \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{d}\sin\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right)}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Ai}(y)}{\mathrm{d}y^2} = \sin\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right)\Big|_{t=0}^{\infty} + \frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Ai}(y)}{\mathrm{d}y^2}$$

$$\hookrightarrow \frac{\mathrm{d}^2\mathrm{Ai}(y)}{\mathrm{d}y^2} - y\mathrm{Ai} = -\sin\left(\tfrac{t^3}{3} + yt\right)\Big|_{t=0}^{\infty}$$

Um dieses Problem zu beheben schreibt man die Airy-Funktion um:

$$\mathrm{Ai}(y) = \lim_{\varepsilon \to 0} \mathrm{Re}\left\{\int_0^\infty \mathrm{d}t\, e^{-i\left(\frac{t^3}{3} + yt\right)} e^{-\varepsilon t}\right\}$$

Geht man nun analog zu oben vor, verschwindet nun der Randterm und die Identität ist bewiesen.