Technische Universität Wien

Prof. Dr. K. Held
Dr. G. Sangiovanni, Dr. A. Toschi, Dr. A. Toth, D. I. G. Rohringer

1. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2011/2012

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 03.12.2011.

15. Vollst. Satz kommutierender Observable

6 Punkte

a) Hermitizität, Kommutativität

Aus der Basisdarstellung der Operatoren in $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$:

$$H^{\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar\omega_0 \end{pmatrix}$$

$$O^{\{|1\rangle,|2\rangle\,|3\rangle\}} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix}$$

ergeben sich durch Einsetzen beide Eigenschaften.

b) Gemeinsame Eigenbasis

Eigenwerte von H: $h_1 = \hbar\omega_0$ (nicht entartet), $h_2 = h_3 = -\hbar\omega_0$ (zweifach entartet)[1]
Eigenvektoren von H: $|h_1\rangle = |1\rangle, |h_2\rangle = |2\rangle, |h_3\rangle = |3\rangle$
Eigenwerte von O: , $o_1 = -b$ (nicht entartet) $o_2 = o_3 = b$ (zweifach entartet)
Eigenvektoren von O: $|o_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle), |o_2\rangle = |1\rangle, |o_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$
Gemeinsames System von Eigenvektoren von H und O (siehe auch Bsp. 1.24 der Übungssammlung von Dr. Grau, `http://www.dietrich-grau.at/`): Zuerst wird H diagonalisiert (ist in diesem Fall bereits diagonal). Der Eigenvektor zum Eigenwert h_1, also $|1\rangle$ muss ein Eigenvektor der gemeinsamen Basis sein, weil der Eigenwert nicht entartet ist. $h_{2,3}$ ist aber entartet, d.h. die Eigenvektoren sind nicht eindeutig bestimmt. Wählt man willkürlich zwei orthonormierte Vektoren aus dem zweidimensionalen Eigenraum von $h_{2,3}$, so ist H diagonal, aber O nicht (siehe a)). Man kann aber den übrigen, nicht-diagonalen Unterraum von O ebenfalls diagonalisieren. Die Eigenvektoren dieses Unterraums sind Linearkombinationen der ursprünglichen Eigenvektoren von H.
Ein gemeinsames System von Eigenvektoren von H und O lautet daher: $|g_1\rangle = |1\rangle, |g_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle), |g_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$.

c) Vollständiges System kommutierender Observable

Die Operatoren H und O besitzen nicht eindimensionale Eigenräume (siehe b)) und sind daher kein vollständiger Satz kommutierender Observable. H^2 liefert eine dreifache Entartung, die

[1] Anmerkung: Die Matrix H braucht nicht diagonalisiert zu werden - sie ist bereits diagonal!

durch den Operator O nicht aufgehoben werden kann. Einzig die Kombination der Messwerte von H und O zu einem Paar (h, o) (z.B. $\{\hbar\omega_0, b\}$) liefert eine eindeutige Zuweisung zu einem Zustand (aus $\{|g_1\rangle, |g_2\rangle, |g_3\rangle\}$).

d) Freies Teilchen

Die Lösung der stationären Schrödingergleichung für ein freies Teilchen (Differentialgleichung 2. Ordnung):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

ergibt sich aus der Superposition von ebenen Wellen:

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px}.$$

Eine Messung der Energie allein würde für jeweils zwei Lösungen der Schrödingergleichung das selbe Ergebnis liefern (nach pos. bzw. nach neg. x-Richtung laufende Welle mit Impuls p im eindimensionalen Fall). Um einer bestimmten Energie eindeutig eine Eigenlösung zuordnen zu können, benötigt man eine Messung, die das Vorzeichen von p bestimmt. Daher liefert das Paar $\{H, p\}$ einen vollständigen Satz kommutierender Observable. Auch p alleine würde bereits diesen Satz liefern, weil ebene Wellen Eigenfunktionen des Impulsoperators sind (Differentialgleichung 1. Ordnung):

$$\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi_{\text{ebene Welle}}(x) = p\psi_{\text{ebene Welle}}(x).$$

Ein weiterer möglicher Operator, der mit H einen solchen Satz liefert, ist der Paritätsoperator.

16. Reelle Wellenfunktionen *4 Punkte*

a) Kommutator mit H und Eigenwerte von $\mathcal{C}$

Das Potential V sei rein reell und der Impulsoperator in Ortsdarstellung lautet $p = \frac{\hbar}{i}\partial_x$:

$$\mathcal{C}H = \mathcal{C}\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) = \left(\frac{p*^2}{2m} + V^*\right)\mathcal{C} = \left(\frac{p*^2}{2m} + V^*\right)\mathcal{C} = H\mathcal{C}$$

Achtung: $\mathcal{C}$ ist ein nicht-linearer Operator, weil für $c \in \mathbb{C}$ gilt:

$$\mathcal{C}c\psi = c^*\mathcal{C}\psi.$$

Damit haben ψ und $e^{i\phi}\psi$ unterschiedliche Eigenwerte. Durch zweifache Anwendung des Operators $\mathcal{C}$ erhält man für eine Eigenfunktionψ_c von $\mathcal{C}$ mit Eigenwert c:

$$\psi_c = (\psi_c^*)^* = \mathcal{C}^2\psi_c = \mathcal{C}c\psi_c = c^*c\psi_c,$$

womit $cc^* = |c|^2 = 1$ und damit $c = e^{i\phi}$ folgt. Betrachtet man wiederum $e^{i\phi/2}\psi_c$, so ist dies eine Eigenfunktion mit Eigenwert 1.

b) Reelle Wellenfunktionen

Nicht-entartete Eigenfunktionen von H (ψ) bzw. (deren konjugiert Komplexe $\psi^* = \mathcal{C}\psi$) müssen die Schrödingergleichung zum selben Energieeigenwert E erfüllen:

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi = E\psi$$
$$i\hbar\partial_t(\mathcal{C}\psi) = H(\mathcal{C}\psi) = \mathcal{C}H\psi = \mathcal{C}E\psi = E\mathcal{C}\psi = E\psi^*.$$

Teilt man die Wellenfunktionen in Real- und Imaginärteile

$$i\hbar\partial_t(Re(\psi) + iIm(\psi)) = E(Re(\psi) + iIm(\psi))$$
$$i\hbar\partial_t(Re(\psi) - iIm(\psi)) = E(Re(\psi) - iIm(\psi))$$

und addiert beide Gleichungen ergibt sich

$$i\hbar\partial_t Re(\psi) = ERe(\psi)$$

und damit aus der Nichtentartung der Energieeigenwerte (bis auf einen Phasenfaktor wie bei jedem Eigenwertproblem)

$$Re(\psi) \sim \psi \sim \psi^*.$$

c) Gegenbeispiele

Die Eigenschaft b) ist in dieser allgemeinen Form nur für nicht-entartete Energieeigenwerte erfüllbar. Die Kommutativität a) kann bei einem Hamiltonoperator verloren gehen, in welchem beispielsweise der Impulsoperator in erster Potenz vorkommt. Eine wichtige Anwendung davon ist die sog. *Spin-Bahn Kopplung* ($\vec{L}\vec{S}$-Kopplung, `http://de.wikipedia.org/wiki/Spin-Bahn-Kopplung`), die die Wechselwirkung zweier drehimpulsartigen Größen (Spin und Bahndrehimpuls) beschreibt: $H \sim \hat{L}\hat{S}$ mit $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dr} = -\hat{p}^*$. Daraus folgt, dass der obige Kommutator nicht mehr verschwindet!

Man kann (für Sonderfälle!) auch andere Beispiele finden (siehe bspw. `http://www-pha.physik.hu-berlin.d`