1. Tutorium - Quantentheorie I - 12.10.2012 - Lösung

1. Gegeben sei ein Teilchen, welches durch die Wellenfunktion ($b > 0$ und $\phi \in R$)
$$\psi(x) = A \cdot e^{-b|x|} sin(x) e^{i\phi x}$$
beschrieben wird.
   a) Bestimmen Sie A so, dass die Wellenfunktion $\psi(x)$ normiert ist.
   b) Wie wahrscheinlich ist es, das Teilchen im Intervall $[-\pi, \pi]$ anzutreffen?

2. Gegeben sei ein eindimensionaler Stab der Länge L, dessen Temperatur T als Funktion des Ortes $x \in [0, L]$ und der Zeit $t \in (0, \infty)$ untersucht werden soll. Lösen Sie dazu die Wärmeleitungsgleichung
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial^2 x^2}$$
Wobei κ der Temperatur-Leitwert ist (dieser bestimmt die Zeit, die zum Temperaturausgleich benötigt wird). Verwenden Sie zur Lösung obiger Differentialgleichung folgende Randbedingungen:
$$T(0,t) = 0 \qquad und \qquad \frac{\partial T}{\partial x}(L,t) = 0$$
für alle Zeiten $t > 0$
   a) Vergleichen Sie obige Wärmeleitungsgleichung mit der Schrödinger-Gleichung bzw. der Wellengleichung und diskutieren Sie die Unterschiede bzw. Gemeinsamkeiten in der Struktur dieser Gleichungen.
   b) Lösen Sie das Randwertporblem mittels Separation. Welche physikalischen Bedeutungen haben die Randbedingungen?
   c) Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei der ganze Stab auf konstanter Temperatur $T = 1$. Passen Sie die aus Punkt (b) hervorgehende Lösung diesen Anfangswert an.
   d) Diskutieren Sie, wie das Verhalten von $T(x,t)$ vom Temperatur-Leitwert κ abhängt und stellen Sie den Verlauf von $T(x,t)$ mit Hilfe des Computers graphisch dar. Interpretieren Sie Ihre Ergebnisse physikalisch.

3. Gegeben Sei die Matrix
$$A = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 1 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$
   a) Ist A hermitsch(=selbstadjungiert)? Ist A unitär? Welche Eigenschaften erfüllen Eigenwerte und Eigenvektoren einer hermiteschen bzw. einer unitären Matrix?
   b) Berechnen Sie die Eigenwerte sowie die normierten Eigenvektoren von A.
   c) Zeigen Sie explizit, dass die Eigenvektoren eine vollständige orthogonale Basis bilden.

Zu kreuzen: 1, 2ab, 2cd, 3

1. a) Normierbedingung:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \overset{!}{=} 1$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \underbrace{A\ e^{-b|x|} sin(x) e^{i\phi x}}_{\psi(x)} \cdot \underbrace{A\ e^{-b|x|} sin(x) e^{-i\phi x}}_{\psi^*(x)} dx =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty} A^2\ e^{-b|x|-b|x|} \cdot sin^2(x)\ \underbrace{e^{+i\phi x - i\phi x}}_{e^0=1} dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} A^2\ e^{-2b|x|} \cdot sin^2(x) =$$

$$= \underbrace{A^2 \cdot \Big(\int\limits_{-\infty}^{0} e^{2bx} \cdot sin^2(-x)\ dx + \int\limits_{0}^{\infty} e^{-2bx} \cdot sin^2(x)\ dx \Big)}_{\text{Integral auftrennen}}$$

$$\int\limits_{0}^{\infty} e^{-2bx} sin^2(x)\ dx = \int\limits_{-\infty}^{0} e^{2bx} sin^2(-x)\ dx = \ldots = \frac{1}{4b^3 + 4b}$$

einsetzen:

$$A^2 \cdot \Big(\int\limits_{-\infty}^{0} e^{2bx} \cdot sin^2(-x)\ dx + \int\limits_{0}^{\infty} e^{-2bx} \cdot sin^2(x)\ dx \Big) = A^2 \cdot \Big(\frac{1}{4b^3 + 4b} + \frac{1}{4b^3 + 4b} \Big) = 1$$

$$A^2 \Big(\frac{2}{4b(b^2+1)} \Big) = 1 \qquad \longrightarrow \qquad A = \sqrt{2b(b^2+1)}$$

b)

$$\psi(x) = A \cdot e^{-b|x|} \cdot sin(x) e^{i\phi x}$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Intervall $[-\pi, \pi]$ anzutreffen ist gegeben durch:

$$W_{[-\pi,\pi]} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \psi\ \psi^*\ dx =$$

$$\int\limits_{-\pi}^{\pi} A\ e^{-b|x|} sin(x) e^{i\phi x} \cdot A\ e^{-b|x|} sin(x) e^{-i\phi x}\ dx = \ldots = 1 - e^{-2\pi b}$$

2. a)

b) **Separation:**

Separationsansatz: $T(x,t) = T(t) \cdot X(x)$

$$\dot{T}(t) \cdot X(x) = \kappa \cdot X''(x) \cdot T(t) \qquad \Big/ \cdot \frac{1}{T(t) \cdot X(x)}$$

$$\underbrace{\frac{\dot{T}}{T}}_{1} = \underbrace{\frac{X''}{X}}_{2} \cdot \kappa$$

Gleichung 1:

$$\frac{\dot{T}}{T} = -\lambda \quad \longrightarrow \quad \dot{T} + \lambda T = 0$$

Ansatz: $T(t) = B \cdot e^{-\lambda t} \qquad \longrightarrow \qquad \dot{T} = -B \cdot e^{-\lambda t} \cdot \lambda$

In die Gleichung einsetzen:

$$-B\ \lambda\ e^{-\lambda t} + \lambda\ Be^{-\lambda t} = 0 \qquad \Big/ : B \cdot e^{-\lambda t}$$

$$T(t) = B\ e^{-\lambda t}$$

Gleichung 2:

$$\kappa\ \frac{X''}{X} = -\lambda \quad \longrightarrow \quad \kappa\ X'' + \lambda\ X = 0$$

Ansatz: $X(x) = A \cdot e^{-\omega x}$

$$\left.\begin{aligned} X(x) &= A \cdot e^{-\omega x} \\ X''(x) &= A \cdot \omega^2 \cdot e^{-\omega x} \end{aligned}\right\} \kappa \cdot A\ \omega^2\ e^{-\omega x} + \lambda\ A\ e^{-\omega x} = 0 \qquad \Big/ : A\ e^{-\omega x}$$

$$\longrightarrow\ \omega = i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}} \quad \longrightarrow \quad A_1\ e^{-i\frac{\lambda}{\kappa}} + A_2\ e^{i\frac{\lambda}{\kappa}}$$

Allgemein gilt:

$$T(x,t) = X(x) \cdot T(t) = \underbrace{\left[A_1\ e^{-i\frac{\lambda}{\kappa}x} + A_2\ e^{i\frac{\lambda}{\kappa}x}\right]}_{X(x)} \cdot \underbrace{B\ e^{-\lambda t}}_{T(t)}$$

Randbedingungen:

$$T(0,t) = B\ e^{-\lambda t}\ (A_1 + A_2) = 0 \quad \longrightarrow \quad A_1 = -A_2$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = B\, e^{-\lambda t} \cdot \Big[A_1 \cdot \Big(-i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\Big) \cdot e^{-i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}x} + A_2 \cdot \Big(i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\Big) \cdot e^{i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}x}\Big] \overbrace{=}^{A_1 = -A_2}$$

$$= 2\; A_2\; B \cdot \sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; i\; e^{-\lambda t} \cdot \underbrace{\frac{\Big(e^{-i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}x} + e^{i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}x}\Big)}{2}}_{=cos(...)} = 2\; i\; A_2\; B\; \sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; e^{-\lambda t} \cdot cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x\Big) \overbrace{=}^{x=L}$$

$$= 2\; i\; A_2\; B\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}} \cdot e^{-\lambda t} \cdot cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x\Big)$$

Damit $\frac{\partial T}{\partial x}(L,t) \stackrel{!}{=} 0$ gilt muss $cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x\Big) = 0$ gelten!

$$\longrightarrow \qquad cos\Big(\frac{\pi\; (2n+1)}{2}\Big) = 0 \qquad \forall n \in \mathbb{N}_0$$

damit gilt $cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; L\Big) = 0$ muss gelten:

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}} L = \frac{(2n+1)\; \pi}{2} \qquad \longrightarrow \qquad \lambda = \frac{\pi^2\; (2n+1)^2}{4L^2}$$

Allgemeine Lösung:

$$A_2 \cdot \Big(-e^{-i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x} + e^{i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x}\Big) \cdot B\; e^{-\lambda t} \qquad \text{mit } A_1 = -A_2$$

$$2\; i\; A_2\; B \cdot \frac{\Big(-e^{-i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x} + e^{i\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x}\Big)}{2\; i} \cdot e^{-\lambda t} = \underbrace{2\; i\; A_2\; B}_{c_n} \cdot \underbrace{sin\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x\Big) \cdot e^{-\lambda t}}_{\psi_n(x,t)} =$$

$$= c_n \cdot \psi_n(x,t)$$

$\psi(x,t)\ldots$ Temperatur an Stelle x, t
$\frac{\partial \psi}{\partial t}\ldots$ Änderung der Temp. an der Stelle

$$T(x,t) = c_n \cdot \psi_n(x,t) \qquad \text{jedes n löst die Gleichung!}(\lambda \to \lambda_n)$$

lineare DGL $\rightarrow$ Superposition ist auch wieder eine Lösung!

$$\longrightarrow \quad T(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \psi_n(x,t)$$

c) RB: $t = 0 \ldots$ gesamter Stab: $T = 1$ (const.) $\quad \rightarrow \quad T(x,0) \overset{!}{=} 1$

$$\longrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \psi_n(x,0) \overset{!}{=} 1 \qquad \Big/ \cdot \int \psi_m(x,0)\, dx$$

wobei $\phi_m(x,0)$ eine beliebige Lösung sei. Da die ψ_n und ψ_m aufeinander orthogonal sind gilt:

$$\int \psi_n(x,0) \cdot \psi_m(x,0)\, dx = N^2\, \delta_{nm}$$

$$\int \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \psi_n(x,0) \cdot \psi_m(x,0)\, dx = \int \psi_m(x,0)\, dx =$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \underbrace{\int \psi_n(x,0) \cdot \psi_m(x,0)\, dx}_{=N^2\, \delta_{nm}} = \int \psi_m(x,0)\, dx =$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n\, \delta_{nm}\, N^2 = \int \psi_m(x,0)\, dx$$

δ_{nm} wählt aus der Summe das Element c_m aus! Alle anderen Einträge sind Null.

$$\longrightarrow \qquad \int \psi_m(x,0)\, dx = c_m \cdot N^2$$

$$\frac{1}{N^2 \cdot c_m} \int \psi_m(x,0)\, dx = \frac{1}{N^2 \cdot c_m} \int_0^L sin\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}} x\Big) =$$

$$= \frac{1}{N^2 \cdot c_m} \cdot \Big[-cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}} x\Big)\Big] \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}}\ \Big|_{x=0}^{L} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}} \cdot \frac{1}{N^2 \cdot c_m} \cdot \Big[-cos\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\ L\Big) + 1\Big] = 1$$

$$\text{Einsetzen von:} \qquad \lambda = \frac{\pi^2\ (2n+1)^2}{4L^2} \kappa$$

$$N^2 \cdot c_m = \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}} \cdot \Big(-cos\Big(\sqrt{\frac{L^2}{\kappa} \cdot \frac{\pi^2\ (2n+1)^2}{4L^2} \kappa}\Big) + 1\Big) = \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}} \cdot \Big[\underbrace{-cos\Big(\frac{\pi\ (2n+1)}{2}\Big)}_{=0} + 1\Big]$$

$$\longrightarrow N^2\ c_m = \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}}$$

$$\text{Normierung:} \qquad \int \psi_n \cdot \psi_n\, dx = N_n^2 = \int \Big[sin\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\ x\Big) \cdot e^{-\lambda t}\Big]^2\, dx =$$

unter Vernachlässigung des Phasenfaktors folgt:

$$= \int_0^L sin^2\Big(\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; x\Big)\; dx = \frac{L}{2} - \frac{sin(2 \cdot \sqrt{\frac{\lambda_n}{\kappa}}\; L)}{4\; \sqrt{\frac{\lambda_n}{\kappa}}} = N_n^2$$

$$\text{mit} \quad \lambda = \frac{\pi^2\; (2n+1)^2}{4L^2}\kappa$$

$$c_n = \frac{1}{N_m^2} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}}$$

$$N_m^2 = \frac{L}{2} - \frac{sin(2\; \sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}\; L)}{4\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}} = \frac{L}{2} - \frac{sin(\pi\; (2n+1))}{4\sqrt{\frac{\lambda}{\kappa}}} = \frac{L}{2}$$

$$N_m^2\; c_m = \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}} \quad \longrightarrow \quad c_m = \frac{2}{L} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda}}$$

$$T(x,t) = \sum_m c_m\; \psi_m = \sum_{m=0}^{\infty}\; \frac{2}{L} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{\lambda_m}} \cdot sin\Big(\sqrt{\frac{\lambda_m}{\kappa}}\; x\Big) \cdot e^{-\lambda_m t}$$

$$\text{mit } \lambda_m = \frac{\pi^2\; (2m+1)^2}{4L^2}\kappa$$

d)

3. a) hermitesch: $A^\dagger = (A^T)^*$ EW sind reel

unitär: $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$ $|\text{EW}| = 1$

$$A^T = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 1 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \qquad (A^T)^* = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 1 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \text{A ist hermitsch}$$

$$A^\dagger A \neq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \text{A ist nicht unitär}$$

b) **Eigenwerte:**

$$det(A - \lambda 1) = 0$$

$$det \begin{pmatrix} -\lambda & i & 0 \\ -i & 1-\lambda & i \\ 0 & -i & -\lambda \end{pmatrix} = (\lambda^2)(1-\lambda) + \lambda + \lambda = \lambda^2 - \lambda^3 + 2\lambda$$

$$EW : \lambda_i = \begin{cases} \lambda_1 = 0 \\ \lambda_2 = 2 \\ \lambda_3 = -1 \end{cases}$$

Eigenvektoren:

$$(A - \lambda_i 1)\vec{x} = 0 < 6$$

$\lambda = 0:$

$$(A - 01)\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 1 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \vec{x} = 0$$

$i\, x_2 = 0 \quad \rightarrow \quad x_2 = 0$

$i\, x_1 + x_2 + i\, x_3 = 0$

z.B.: $x_1 = 1$

$$\rightarrow x_1 = x_3 \quad \longrightarrow \quad EV_{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\lambda = 2:$

$$\begin{pmatrix} -2 & i & 0 \\ -i & -1 & i \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$-2\,x_1 + i\,x_2 = 0$$
$$-i\,x_1 - x_2 + i\,x_3 = 0$$
$$-i\,x_2 - 2\,x_3 = 0$$

$$x_3 = -x_1$$

$$\text{z.B.: } x_3 = 1 \qquad \longrightarrow \qquad EV_{(2)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2\,i \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\lambda = -1$:

$$\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 2 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x_1 + i\,x_2 = 0$$
$$x\,x_2 - i\,x_1 + i\,x_3 = 0$$
$$-i\,x_2 + x_3 = 0$$

z.B. : $x_3 = 1$:

$$EV_{(-1)} = \begin{pmatrix} -1 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}$$

c)

$$Basis \qquad \longrightarrow \qquad EV_i \cdot EV_j = \begin{cases} 0 & \forall \quad i \neq j \\ 1 & \forall \quad i = j \end{cases}$$