# Lösung zur 5. Übung zur Quantentheorie I

22. November 2013

## 10. Operatoren in Bra-Ket-Schreibweise

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= 3\,|1\rangle - 2i\,|2\rangle + \sqrt{3}\,|3\rangle\,, && (1)\\
\hat{H} &= \hbar\omega\left(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - i\,|1\rangle\langle 3| + i\,|3\rangle\langle 1|\right). && (2)
\end{aligned}
$$

a) Man verwendet die Eigenschaft, dass $\langle\psi\,|\,\psi\rangle = 1$

$$
\begin{aligned}
\langle\psi\,|\,\psi\rangle &= \left(3\,\langle 1| + 2i\,\langle 2| + \sqrt{3}\,\langle 3|\right)\left(3\,|1\rangle - 2i\,|2\rangle + \sqrt{3}\,|3\rangle\right)\\
&= 9+4+3\\
&= 16, && (3)
\end{aligned}
$$

woraus ergibt sich

$$
|\psi\rangle = \frac{1}{4}\left(3\,|1\rangle - 2i\,|2\rangle + \sqrt{3}\,|3\rangle\right). \quad (4)
$$

Zwei Zustände sind dann orthonormal, wenn gilt $\langle\phi\,|\,\psi\rangle = 0$. Sei $\langle\phi| = a\,\langle 1| + b\,\langle 2| + c\,\langle 3|$. Aus der Orthonormalität folgt

$$
\begin{aligned}
\langle\phi\,|\,\psi\rangle &= 3a - 2ib + \sqrt{3}c\\
&= 0. && (5)
\end{aligned}
$$

Die letzte Gleichung ist unbestimmt, also kann man zwei variable frei wählen. Zwei Möglichkeiten sind $a = 2,\ c = 0$ und $c = -\sqrt{3},\ b = 0$

$$
\begin{aligned}
|\phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{13}}\left(2\,|1\rangle + 3i\,|2\rangle\right), && (6)\\
|\phi_2\rangle &= \frac{1}{2}\left(|1\rangle - \sqrt{3}\,|3\rangle\right). && (7)
\end{aligned}
$$

b) Aus $H = \sum_{m,n} |m\rangle \underbrace{\langle m|\,H\,|n\rangle}_{H_{m,n}} \langle n| = \sum_{m,n} |m\rangle\, H_{m,n}\,\langle n|$ folgt

$$
H = \hbar\omega\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i\\ 0 & 1 & 0\\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8)
$$

Der Operator ist hermitesch aber nicht unitär.

c) Man kann entweder die Matrixdarstellung oder die *Dirac*-Notation verwenden

$$\begin{aligned}
\langle\psi| H |\psi\rangle &= \frac{\hbar\omega}{16}\left(3\langle 1| + 2i\langle 2| + \sqrt{3}\langle 3|\right)\left(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - i|1\rangle\langle 3| + i|3\rangle\langle 1|\right)\times \\
&\quad \times\left(3|1\rangle - 2i|2\rangle + \sqrt{3}|3\rangle\right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{16}\left(9+4+3-3i\sqrt{3}+3i\sqrt{3}\right) \\
&= \hbar\omega. \qquad (9)
\end{aligned}$$

Da schon die normierte Wellenfunktion berücksichtigt wurde, aus $\langle\psi\,|\,\psi\rangle = 1$ folgt

$$\frac{\langle\psi| H |\psi\rangle}{\langle\psi\,|\,\psi\rangle} = \hbar\omega. \qquad (10)$$

d) Aus Gleichung (8) folgt für die Eigenwerte und die entsprechenden normierten Eigenvektoren von $H$

$$\lambda_1 = 0 \Rightarrow |v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \hbar\omega \Rightarrow |v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = 2\hbar\omega \Rightarrow |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}, \qquad (11)$$

oder umgeschrieben in der $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$-Basis

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|3\rangle), \quad |v_2\rangle = (|2\rangle), \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|3\rangle). \qquad (12)$$

Jetzt kann man einfach die unitäre Transformation aus Gleichung (12) ablesen ("eleganter" gesagt ist $U$ die Matrix der Eigenvektoren (normierten) in dieser Basis $U = (|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle)$)

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \qquad (13)$$

woraus folgt

$$U^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & -i \end{pmatrix}. \qquad (14)$$

In *Dirac*-Notation lautet die unitäre Transformation (in beiden Basen)

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle\langle 1| + \sqrt{2}|2\rangle\langle 2| + i|3\rangle\langle 3| - i|1\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|\right), \qquad (15) \\
&= |v_1\rangle\langle 1| + |v_2\rangle\langle 2| + |v_3\rangle\langle 3|, \qquad (16)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
U^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle\langle 1| + \sqrt{2}|2\rangle\langle 2| - i|3\rangle\langle 3| + i|1\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|\right), \qquad (17) \\
&= |1\rangle\langle v_1| + |2\rangle\langle v_2| + |3\rangle\langle v_3|, \qquad (18)
\end{aligned}$$

wobei eine Transformation von der Basis $\{a_i\}$ in die Basis $\{b_i\}$ als Formel $U = \sum |b_i\rangle\langle a_i|$ geschrieben ist.

e) Aus $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n \,|\, \psi\rangle$ folgt

$$|\psi\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\left(3+i\sqrt{3}\right)|v_1\rangle - 2i\sqrt{2}\,|v_2\rangle + \left(3-i\sqrt{3}\right)|v_3\rangle\right). \tag{19}$$

f) Die möglichen Energiemesswerte sind die Eigenwerte des *Hamilton*-Operators, bzw. $0, \hbar\omega, 2\hbar\omega$. Die Wahrscheinlichkeit für eine Messung für eine Möglichkeit ist gegeben durch

$$P_n = |\langle n \,|\, \psi\rangle|^2 . \tag{20}$$

Aus der obigen Formel ergibt sich

$$\begin{aligned} P_0 &= |\langle v_1 \,|\, \psi\rangle| \\ &= \left|\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(3+i\sqrt{3}\right)\right|^2 \\ &= \frac{3}{8}, \end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned} P_2 &= |\langle v_2 \,|\, \psi\rangle| \\ &= \left|\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(-2i\sqrt{2}\right)\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}, \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} P_3 &= |\langle v_3 \,|\, \psi\rangle| \\ &= \left|\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(3-i\sqrt{3}\right)\right|^2 \\ &= \frac{3}{8}. \end{aligned} \tag{23}$$

Kontrolle

$$\begin{aligned} P_0 + P_1 + P_2 &= \frac{3}{8} + \frac{1}{4} + \frac{3}{8} \\ &= 1. \end{aligned} \tag{24}$$

# 11. *Schrödinger*gleichung im Impulsraum

$$V(x) = x^n, \quad n \in \mathbb{N}, \tag{25}$$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + (i\hbar)^n \frac{d^n}{dp^n}\right]\psi(p) = E\psi(p). \tag{26}$$

a) Multipliziert man die basisunabhängige *Schrödinger*gleichung (in einer Dimension) mit $\langle p|$ von links und fügt eine vollständige 1 auf der rechten Seite der Gleichung

$$\begin{aligned} \langle p| H |\psi\rangle &= \int dp' \, \langle p \,|\, H \,|\, p'\rangle \langle p' \,|\, \psi\rangle \\ &= E\psi(p) \,. \end{aligned} \tag{27}$$

Für den *Hamilton*-Operator in der Impulsdarstellung gilt

$$\int dp' \, \langle p \,|\, H \,|\, p'\rangle \langle p' \,|\, \psi\rangle = \int dp' \, \left\langle p \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| p' \right\rangle \langle p' \,|\, \psi\rangle \,, \tag{28}$$

wobei folgt sofort aus $\langle p \,|\, \hat{p} \,|\, p'\rangle = p\delta(p - p')$

$$\left\langle p \left| \frac{p^2}{2m} \right| p' \right\rangle = \frac{p^2}{2m} \delta(p - p') \,. \tag{29}$$

Für das Potential fügt man noch zwei vollständige 1 und verwendet $\langle x \,|\, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ ($\langle p \,|\, x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$) und $\langle x \,|\, V(x) \,|\, x'\rangle = V(x') \delta(x - x')$

$$\begin{aligned} \int dx \, dx' \, \langle p \,|\, x\rangle \langle x \,|\, V(x) \,|\, x'\rangle \langle x' \,|\, p'\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \, dx' \, e^{-ipx/\hbar} V(x') \delta(x - x') \, e^{ip'x'/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \, e^{i(p'-p)x/\hbar} \, x^n \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{d^n}{dp^n} \int dx \, e^{i(p'-p)x/\hbar} \left( \frac{\hbar}{-i} \right)^n \\ &= \frac{(i\hbar)^n}{\hbar} \frac{d^n}{dp^n} \delta\left( \frac{p' - p}{\hbar} \right) \\ &= (i\hbar)^n \, \frac{d^n}{dp^n} \delta(p' - p) \,. \end{aligned} \tag{30}$$

Wenn man in das Integral einsetzt, führt das zu

$$\begin{aligned} E\psi(p) &= \int dp' \, \left[ \frac{p^2}{2m} \delta(p - p') + (i\hbar)^n \, \frac{d^n}{dp^n} \delta(p' - p) \right] \psi(p') \\ & \left[ \frac{p^2}{2m} + (i\hbar)^n \, \frac{d^n}{dp^n} \right] \psi(p) \,. \end{aligned} \tag{31}$$

b) Die Schrödingergleichung lautet jetzt (für $V(x) = \gamma x$)

$$E\psi(p) = \left[ \frac{p^2}{2m} + i\hbar\gamma \frac{d}{dp} \right] \psi(p) \,. \tag{32}$$

Umformung liefert

$$\frac{1}{\psi(p)} \frac{d}{dp} \psi(p) = \frac{i}{\hbar\gamma} \left( \frac{p^2}{2m} - E \right) . \tag{33}$$

Nach Integration über $dp$

$$\ln\left(\psi\left(p\right)\right) = \frac{i}{\hbar\gamma}\left(\frac{p^3}{6m} - E\,p\right) + \tilde{C}, \tag{34}$$

was ist äquivalent mit

$$\psi\left(p\right) = C\exp\left[\frac{i}{\hbar\gamma}\left(\frac{p^3}{6m} - E\,p\right)\right], \tag{35}$$

wobei $C = e^{\tilde{C}}$.

c) Man verwendet die Definition der Delta-Funktion $\delta\left(E - E'\right) = {}^1/_{(2\pi\hbar)}\int dp\,\exp\left[{}^{(ip(E-E'))}/_{\hbar}\right]$. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\psi_E^*\left(p\right)\psi_{E'}\left(p\right) &= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\exp\left[\frac{-i}{\hbar\gamma}\left(\frac{p^3}{6m} - E\,p\right)\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar\gamma}\left(\frac{p^3}{6m} - E'\,p\right)\right] \\
&= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\exp\left[\frac{ip}{\hbar\gamma}\left(E - E'\right)\right] \\
&\overset{\frac{p}{\gamma}\to p}{=} \gamma\,|C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\exp\left[\frac{ip}{\hbar}\left(E - E'\right)\right] \\
&\overset{!}{=} \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\exp\left[\frac{ip}{\hbar}\left(E - E'\right)\right].
\end{aligned} \tag{36}$$

Aus der letzten Gleichung folgt $|C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\gamma}}$.

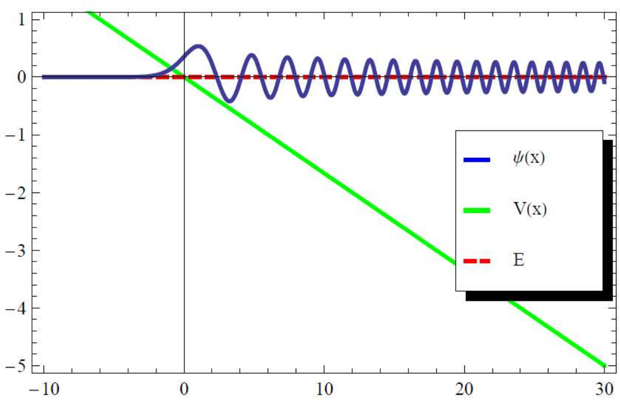


Abbildung 1: Wellenfunktion $\psi(x)$ im Rampenpotential $V(x) = -\gamma x$, $E = 0$.

# 12. Hermitizität, Zeitentwicklungsoperator

a) Man verwendet $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

- $e^{\lambda\hat{A}}$

$$\begin{aligned} e^{\lambda\hat{A}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\hat{A}^n}{n!} \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\left(\hat{A}^n\right)^\dagger}{n!}. \end{aligned} \tag{37}$$

Es gilt $\left(\hat{A}\cdot\hat{A}\cdot\ldots\cdot\hat{A}\right)^\dagger = \hat{A}^\dagger\cdot\hat{A}^\dagger\cdot\ldots\cdot\hat{A}^\dagger = \hat{A}\cdot\hat{A}\cdot\ldots\cdot\hat{A}$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} (37) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\hat{A}^n}{n!} \\ &= e^{\lambda\hat{A}}. \end{aligned} \tag{38}$$

$e^{\lambda\hat{A}}$ ist hermitesch und nicht unitär.

- $e^{i\lambda\hat{A}}$

$$\begin{aligned} e^{\lambda\hat{A}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\left(i\hat{A}\right)^n}{n!} \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\left(\left(i\hat{A}\right)^n\right)^\dagger}{n!}. \end{aligned} \tag{39}$$

Es gilt $\left(i\hat{A}\cdot i\hat{A}\cdot\ldots\cdot i\hat{A}\right)^\dagger = \left(-i\hat{A}^\dagger\right)\cdot\left(-i\hat{A}^\dagger\right)\cdot\ldots\cdot\left(-i\hat{A}^\dagger\right) = \left(-i\hat{A}\right)\cdot\left(-i\hat{A}\right)\cdot\ldots\cdot\left(-i\hat{A}\right)$.
Daraus folgt

$$\begin{aligned} (39) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\left(-i\hat{A}^\dagger\right)^n}{n!} \\ &= e^{-i\lambda\hat{A}}. \end{aligned} \tag{40}$$

$e^{i\lambda\hat{A}}$ ist nicht hermitesch und unitär.

- $i\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$

$$\begin{aligned} i\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right| &\stackrel{!}{=} \left(i\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|\right)^\dagger \\ &= -i\left(\left\langle\psi\right|\right)^\dagger\left(\left|\psi\right\rangle\right)^\dagger \\ &= -i\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|. \end{aligned} \tag{41}$$

$i\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$ ist antihermitesch und nicht unitär.

- $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$

$$\begin{aligned} \left[\hat{A},\hat{B}\right] &= \left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right) \\ &\stackrel{!}{=} \left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)^\dagger \\ &= \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger-\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger \\ &= -\left[\hat{A},\hat{B}\right]. \end{aligned} \tag{42}$$

$\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ ist antihermitesch und nicht unitär.

- $\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}$

$$\begin{aligned}\left\{\hat{A},\hat{B}\right\} &= \left(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}\right) \\ &\stackrel{!}{=} \left(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}\right)^{\dagger} \\ &= \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}+\hat{A}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger} \\ &= \left\{\hat{A},\hat{B}\right\}. \end{aligned} \tag{43}$$

$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}$ ist hermitesch und nicht unitär.

b) Man fügt eine vollständige 1, $\sum_n |n\rangle\langle n|$ in den Zeitentwicklungsoperator ein, wobei $|n\rangle$ die Eigenfunktionen von $\hat{H}$ sind

$$\begin{aligned}\hat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle\langle n| \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle\langle n|. \end{aligned} \tag{44}$$

Für die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle = |0\rangle + i\,|1\rangle - 2\,|2\rangle$ erhält man

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)\,|\psi\rangle \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle\langle n|\,|\psi\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|0\rangle + ie^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|1\rangle - 2e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|2\rangle. \end{aligned} \tag{45}$$