Einführung in die Quantentheorie

Leibniz Universität Hannover, Sommer 2021

Till Bargheer, Klemens Hammerer

Präsenzübungen

Inhaltsverzeichnis

1.1. Fouriertransformation

Die Fourier-Transformation ist ein Funktional, welches eine Funktion $f(x)$ auf ihre Fouriertransformierte

$$\tilde{f}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x \tag{1.1}$$

abbildet. In Kurzform schreiben wir $\tilde{f}(k) = \mathcal{F}[f(x)]$. Die inverse Transformation ist gegeben durch

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}k\ . \tag{1.2}$$

a) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften:

$$\tilde{f}(k-k_0) = \mathcal{F}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x} f(x)]\,, \tag{1.3}$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx_0}\tilde{f}(k) = \mathcal{F}[f(x-x_0)]\,, \tag{1.4}$$

$$\mathcal{F}[f(cx)] = \frac{1}{|c|}\,\tilde{f}(k/c)\,, \tag{1.5}$$

$$\big(\tilde{f}(k)\big)^* = \pm\tilde{f}(-k) \qquad \text{falls } f(x) \text{ reell/imaginär}\,, \tag{1.6}$$

$$\mathcal{F}\left[\frac{\partial^n}{\partial x^n}\, f(x)\right] = (ik)^n\,\tilde{f}(k)\,, \tag{1.7}$$

$$\mathcal{F}[(f_1 * f_2)(x)] = \sqrt{2\pi}\,\tilde{f}_1(k)\tilde{f}_2(k)\,, \tag{1.8}$$

wobei $(f_1 * f_2)(x)$ die *Faltung* der Funktionen $f_1(x)$ und $f_2(x)$ ist:

$$(f_1 * f_2)(x) := \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y) f_2(x-y)\, \mathrm{d}y\ . \tag{1.9}$$

b) Zeigen Sie die Parseval–Plancherel Identität

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2\, \mathrm{d}k\ . \tag{1.10}$$

1.2. Dirac-Delta-Distribution

Die Dirac-Delta-Distribution $\delta(x)$ hat die definierende Eigenschaft

$$\int_a^b \delta(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = f(0) \tag{1.11}$$

für $a < 0 < b$ und alle stetigen Funktionen $f(x)$. $\delta(x)$ ist keine Funktion, lässt sich aber durch eine beliebige Funktionenfolge $\delta_n(x)$, $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ annähern, für die gilt

$$\lim_{n\to\infty} \delta_n(x) = 0 \quad \text{für } x \neq 0 \qquad \text{und} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x)\, \mathrm{d}x = 1 \quad \text{für alle } n\,. \tag{1.12}$$

Man kann zeigen, dass jede solche Folge gegen $\delta(x)$ konvergiert in dem Sinne, dass

$$\lim_{n\to\infty} \int_a^b \delta_n(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = f(0) \tag{1.13}$$

für alle stetigen Funktionen $f(x)$ und $a < 0 < b$.

a) Zeigen Sie, dass die durch $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ parametrisierten Funktionenfolgen

$$\delta_{1,n} = \begin{cases} n & \text{falls } -\frac{1}{2n} < x < \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad \text{und} \qquad \delta_{2,n} = \frac{1}{\pi} \frac{n}{(nx)^2 + 1} \tag{1.14}$$

jeweils die Bedingungen (1.12) und die Eigenschaft (1.13) erfüllen.

b) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften von $\delta(x)$:

$$\delta(-x) = \delta(x)\,, \tag{1.15}$$

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\,\delta(x)\,, \tag{1.16}$$

$$x\delta(x) = 0\,, \tag{1.17}$$

$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0)\,, \tag{1.18}$$

sowie

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(y - x)\delta(y - z)\,\mathrm{d}y = \delta(x - z)\,. \tag{1.19}$$

c) Sei $g(x)$ eine Funktion, die einfache Nullstellen bei $x = x_j$, $j \in J$, aber keine höheren (mehrfachen) Nullstellen hat. Zeigen Sie, dass

$$\delta(g(x)) = \sum_{j \in J} \frac{1}{|g'(x_j)|}\,\delta(x - x_j)\,. \tag{1.20}$$

2.1. Unendlich hoher Potentialtopf

In dieser Übung möchten wir eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung bestimmen und untersuchen. Wir betrachten dazu ein Teilchen der Masse m in einem unendlich hohen Potentialtopf der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & \text{sonst}\,, \end{cases} \tag{2.1}$$

mit $a > 0$.

a) Bestimmen Sie die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung. Fordern Sie dazu, dass die Wellenfunktion stetig ist und im Bereich mit unendlich hohem Potential verschwindet.

b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x)$, den Mittelwert $\langle x \rangle$ und die Standardabweichung Δx. Diskutieren Sie, wie diese Größen zu interpretieren sind.

2.2. De Broglie-Wellenlänge

Die de Broglie-Wellenlänge für Materieteilchen mit Impuls p ist definiert als $\lambda = h/p$.

a) Nehmen Sie an, dass p den Betrag der räumlichen Komponenten des relativistischen Viererimpules bezeichnet, also

$$p = \gamma m v\,, \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\,, \tag{2.2}$$

und drücken Sie λ nur durch die kinetische Energie und Ruhemasse m des Teilchens aus.

Hinweis: Benutzen Sie die relativistische Formel für die kinetische Energie.

b) Berechnen Sie mittels der Formel von Teil a) die de Broglie-Wellenlänge eines

- Elektrons der kin. Energie 1 eV,
- Elektrons der kin. Energie 100 MeV,
- Protons mit kin. Energie 14 TeV,
- Thermischen Neutrons mit kin. $E \approx k_B T$ und $T = 300\,\mathrm{K}$.

⟶

2.3. Gaußsches Wellenpaket

Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei der Zustand eines freien Teilchens in einer Dimension als Gaußsches Wellenpaket präpariert:

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{a^2\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x - x^2/a^2} . \tag{2.3}$$

a) Prüfen Sie, ob der Zustand die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi(x,0) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\psi(x,0) = E\,\psi(x,0)\,, \qquad E = \text{konstant} \tag{2.4}$$

erfüllt. Interpretieren Sie das Ergebnis.

Für viele Potentiale $V(x)$, insbesondere für $V(x) = 0$ (so wie hier) lässt sich die Zeitabhängigkeit von $\psi(x,t)$ am besten bestimmen, indem man die Schrödingergleichung mit Hilfe der Fourier-Transformation in den Impulsraum überführt:

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\varphi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\,\varphi(p,t)\,. \tag{2.5}$$

Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung, also leicht zu lösen. Das Ergebnis überführt man dann mittels inverser Fourier-Transformation zurück in den Ortsraum. Das Ergebnis ist aus der Vorlesung bekannt (Hausübung):

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0 x - \varphi)}}{(1+\gamma^2 t^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2(1+\mathrm{i}\gamma t)}\right] \tag{2.6}$$

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m}\,, \qquad \gamma = \frac{2\hbar}{a^2 m}\,, \qquad \varphi = \theta + k_0 v_0\,\frac{t}{2}\,, \qquad \tan(2\theta) = \gamma t\,. \tag{2.7}$$

Wir wollen einige Eigenschaften dieses Zustands untersuchen.

b) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$, die Erwartungswerte $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ und die Standardabweichung Δx.

Hinweis: Die Erwartungswerte können mit einem Trick berechnet werden. Nutzen Sie aus, dass $\int |\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1$ ist.

c) Bestimmen Sie ebenso die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\varphi(p,t)|^2$, Erwartungswerte $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$ und die Standardabweichung Δp für die zugehörige zeitabhängige Impulswellenfunktion

$$\varphi(p,t) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{a^2}{4\hbar^2}\,(p-p_0)^2 - \mathrm{i}\,\frac{p^2}{2m\hbar}\,t\right], \tag{2.8}$$

und schließlich die *Unschärfe* $\Delta p \cdot \Delta x$.

d) Diskutieren Sie die Eigenschaften von $\psi(x,t)$ und $\varphi(p,t)$: Wie verhalten sich die Orts- und Impulsverteilungen im Laufe der Zeit? Betrachten Sie den Fall $a \gg 1$ (scharfe Impulsverteilung). Motivieren Sie, warum für $a \to \infty$ der Zustand $\psi(x,t)$ durch eine ebene Welle

$$\psi_{p_0}(x,t) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p_0\,x - \frac{p_0^2}{2m}\,t\right)\right] \tag{2.9}$$

mit festem Impuls p_0 approximiert werden kann.

3.1. Delta-Potentialschwelle: Streuzustände

Wir betrachten die Bewegung eines Teilchens der Masse m in einer Dimension mit einem Potential

$$V(x) = \alpha\delta(x) \tag{3.1}$$

mit $\alpha > 0$ oder $\alpha < 0$. Dies kann als ein Potential der Breite L und Höhe V_0 im Grenzfall $L \to 0$ und $V_0 \to \infty$ angesehen werden, wobei $LV_0 = \alpha > 0$ konstant gehalten wird. Es sollen die Eigenzustände und Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$H\psi(x) = E\psi(x)\,, \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{3.2}$$

für $E > 0$ gefunden werden.

a) Zeigen Sie, dass die Ableitung $\psi'(x)$ der Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$ einen Sprung besitzt. Bestimmen Sie die Höhe des Sprungs als Funktion von α, m und $\psi(0)$. Integrieren Sie dazu die Eigenwertgleichung $H\psi(x) = E\psi(x)$ über $x \in [-\varepsilon, +\varepsilon]$ und betrachten Sie den Limes $\varepsilon \to 0$. Argumentieren Sie, warum die Wellenfunktion $\psi(x)$ für alle x stetig ist (insbesondere auch für $x = 0$).

b) Finden Sie die Eigenzustände zu einer gegebenen Energie $E > 0$. Bestimmen Sie die Streumatrix, die zwischen einlaufenden und auslaufenden Wellenanteilen vermittelt.

c) Für welche Parameter hat die Streumatrix einen Pol, und was bedeutet er?

d) Betrachten Sie jetzt den Spezialfall einer nur von links einlaufenden Welle. Berechen Sie die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten. Diskutieren Sie deren Abhängigkeit von der Energie. Welches Verhalten erwarten Sie klassisch?

4.1. Oszillatorbasis in $L^2(\mathbb{R})$

Für den Vektorraum $L^2(\mathbb{R})$ der quadratintegrablen Funktionen auf $\mathbb{R}$ gibt es viele mögliche (und sinnvolle) Basen. Eine Basis wird von den Eigenzuständen des harmonischen Oszillators gebildet:

$$\phi_n(x) = N_n\, H_n(x)\, \mathrm{e}^{-x^2/2}\ , \qquad N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4}, \qquad n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\,. \tag{4.1}$$

Hierbei sind die Funktionen H_n die Hermiteschen Polynome:

$$H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\, \mathrm{e}^{-x^2}\,. \tag{4.2}$$

a) Berechnen Sie $\phi_n(x)$ für die ersten paar $n \geq 0$. Welchen Grad hat das Polynom $H_n(x)$?

b) Zeigen Sie, dass der Satz von Eigenfunktionen $\{\phi_n(x)\,|\,n \geq 0\}$ bezüglich des Skalarprodukts auf $L^2(\mathbb{R})$ orthonormal ist.

c) Entwickeln Sie den $L^2(\mathbb{R})$ Zustand

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\, \mathrm{e}^{-(x-a)^2/2} \tag{4.3}$$

in den Basisfunktionen $\phi_n(x)$.

d) Zeigen Sie, dass $\phi_n(x)$ Eigenfunktionen der Fouriertransformation sind.

Besprechung der Hausübungen von Blatt 3/4.

5.1. Platzhalter

Platzhalter

6.1. Kommutierende Operatoren

Wir betrachten ein System mit dem Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^3 \qquad \text{mit Skalarprodukt} \qquad (\psi, \phi) = \sum_{i=1}^{3} \psi_i^* \phi_i \,, \tag{6.1}$$

wobei ψ_i und ϕ_i die Komponenten der Vektoren $\psi, \phi \in \mathbb{C}^3$ in einer Basis bezeichnen.

a) Sei $A \in L(\mathcal{H})$ ein linearer Operator. Wie erhält man für dieses System den adjungierten Operator $A^\dagger$?

b) Sei $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle)$ eine fest gewählte Basis dieses Hilbertraums. In dieser Basis seien zwei Operatoren H und B gegeben durch

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \,, \tag{6.2}$$

wobei $\omega_0, b \in \mathbb{R}$. Sind H und B selbstadjungierte Operatoren?

c) Zeigen Sie, dass H und B miteinander kommutieren.

d) Geben Sie eine gemeinsame Eigenbasis von H und B an.

Eine Menge $\{A_1, A_2, ..., A_n\}$ von selbstadjungierten Operatoren bildet einen *vollständigen Satz kommutierender Observablen* falls *(i)* die Operatoren paarweise kommutieren und *(ii)* eine Spezifikation der Eigenwerte aller Operatoren A_i genügt, um einen gemeinsamen Eigenzustand bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutig festzulegen.

e) Welche der folgenden Mengen bilden einen vollständigen Satz kommutierender Observablen für $\mathcal{H}$ wie in (6.1) gewählt?

1. $\{H\}$
2. $\{B\}$
3. $\{H, B\}$
4. $\{H^2, B\}$

7.1. Orts- und Impulsdarstellung des harmonischen Oszillators

Orts- und Impulsoperator lassen sich natürlicherweise durch ihre Spektraldarstellungen in der Orts- und Impulsbasis ausdrücken. In Dirac-Notation lauten diese:

$$\hat{x} = \int \mathrm{d}x\, x|x\rangle\langle x| \qquad \text{und} \qquad \hat{p} = \int \mathrm{d}p\, p|p\rangle\langle p|\,. \tag{7.1}$$

Oft ist es nützlich, den Ortsoperator in der Impulsbasis auszudrücken:

$$\hat{x} = \int \mathrm{d}p \int \mathrm{d}p'\, |p\rangle\langle p|\hat{x}|p'\rangle\langle p'|\,. \tag{7.2}$$

a) Zeigen Sie, dass

$$\langle p|\hat{x}|p'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\, \frac{\partial}{\partial p'}\, \delta(p-p')\,. \tag{7.3}$$

Hinweis: Benutzen Sie unter anderem die Relation $\langle x|p\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$.

b) Bestimmen Sie den Grundzustand des harmonischen Oszillators in Impulsdarstellung. Multiplizieren Sie dafür die Relation

$$a|\psi_0\rangle = 0 \tag{7.4}$$

von links mit $\langle p|$ und lösen Sie die entstehende Differentialgleichung.

c) Zeigen Sie mit Hilfe von

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^\dagger)^n|\psi_0\rangle \tag{7.5}$$

dass die Impulsdarstellung $\varphi_n(p) = \langle p|\psi_n\rangle$ der angeregten Zustände gegeben ist durch

$$\varphi_n(p) = (-\mathrm{i})^n \left(\frac{1}{\pi\hbar\omega m}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\, \mathrm{e}^{-\sigma^2/2} H_n(\sigma)\,, \tag{7.6}$$

wobei $\sigma = p/\sqrt{\hbar\omega m}$ eine dimensionslose Impulskoordinate ist.

d) Zeigen Sie, dass aus der Eigenwertgleichung $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ des kohärenten Zustands

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, |\psi_n\rangle\,, \qquad \alpha \in \mathbb{C} \tag{7.7}$$

folgt, dass die Ortsdarstellung von $|\alpha\rangle$ einem Gaußschen Wellenpaket entspricht. Siehe hierzu auch Aufgabe 4.1 c).

8.1. Zweidimensionaler harmonischer Oszillator

Ein Teilchen der Masse m bewegt sich in einem zweidimensionalen harmonischen Potential. Der Hamiltonoperator ist

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,\vec{x}^{\,2}\,, \tag{8.1}$$

mit $\vec{p} = (p_1, p_2)$, $\vec{x} = (x_1, x_2)$ und $[x_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\,\delta_{ij}$.

a) Definieren Sie für $i = 1, 2$ die Absteigeoperatoren

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x_i + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{\hbar m\omega}}\,p_i\right) \tag{8.2}$$

und beweisen Sie die Kommutatorrelationen

1. $[a_i, a_j] = 0$, $[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$, $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$,
2. $[a_i, (a_j^\dagger)^n] = n\,\delta_{ij}(a_j^\dagger)^{n-1}$ für $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$.

b) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator durch die Absteigeoperatoren als

$$H = \hbar\omega\Big(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1\Big) \tag{8.3}$$

ausgedrückt werden kann.

c) Zeigen Sie, dass der Zustand $|0,0\rangle$ mit $a_i|0,0\rangle$ für $i = 1, 2$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators ist. Wie lautet der zugehörige Energieeigenwert?

d) Zeigen Sie, dass die Eigenzustände des Hamiltonoperators zu höheren Energien durch

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}}\,(a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}|0,0\rangle \tag{8.4}$$

gegeben sind. Wie lauten die zugehörigen Energieeigenwerte?

e) Zeigen Sie, dass

1. $a_1|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1}\,|n_1 - 1, n_2\rangle$,
2. $a_1^\dagger|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1 + 1}\,|n_1 + 1, n_2\rangle$,
3. $a_i^\dagger a_i|n_1, n_2\rangle = n_i|n_1, n_2\rangle$.

f) Geben Sie jeweils die Zustände an, die eine Energie $\hbar\omega$, $2\hbar\omega$ bzw. $3\hbar\omega$ besitzen.

g) Allgemein sind die Energieeigenwerte ganzzahlige Vielfache von $\hbar\omega$, also $E_n = \hbar\omega(n+1)$. Geben Sie eine Formel für die Entartung des n-ten Energieeigenwertes E_n an.

h) Zeigen Sie, dass die Operatoren H und $H_1 = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + 1/2)$ einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren (VSKO) bilden. Der Zustand eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ist also eindeutig festgelegt durch die Quantenzahlen n und n_1, welche die Gesamtenergie E_n und die Energie E_{1,n_1} der Bewegung in der x_1-Richtung festlegen.

9.1. Messungen am zweidimensionalen Oszillator

Ein zweidimensionaler Oszillator befindet sich im Zustand

$$|\phi\rangle = N_\phi\Big(2|0,0\rangle + \sqrt{2}\,|1,0\rangle + 2\mathrm{i}|0,1\rangle + \sqrt{3}\,(|2,0\rangle - |0,2\rangle)\Big) \tag{9.1}$$

mit den Zuständen $|n_1, n_2\rangle$ wie in Präsenzübung 8.1.

a) Auf welchen Wert muss N_ϕ gesetzt werden, damit $|\phi\rangle$ ein normierter Zustand ist?

b) Am System im Zustand $|\phi\rangle$ wird die Gesamtenergie des Oszillators gemessen. Welche Messergebnisse treten mit welcher Wahrscheinlichkeit auf?

c) In welchem Zustand befindet sich das System nach der Energiemessung? Geben Sie den Zustand für alle möglichen Messergebnisse an.

9.2. Verallgemeinerte Unschärferelation und freie Zeitentwicklung

a) Für zwei quantenmechanische Messgrößen A und B gilt für alle Zustände $|\psi\rangle$ die Robertson–Schrödinger Unschärferelation

$$\Delta A\,\Delta B \geq \sqrt{\sigma_{AB}^2 + \frac{1}{4}\,|\langle[A,B]\rangle|^2} \tag{9.2}$$

mit der quantenmechanischen Kovarianz $\sigma_{AB} = \frac{1}{2}\,\langle AB + BA\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$. Diese Ungleichung ist strenger als die in der Vorlesung bewiesene Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle[A,B]\rangle|. \tag{9.3}$$

Beweisen Sie (9.2) ähnlich wie in der Vorlesung, indem Sie $\tilde{A} = A - \langle A\rangle$, $\tilde{B} = B - \langle B\rangle$ und $C = a\tilde{A} + b\tilde{B}$ definieren und verwenden, dass $\|C|\psi\rangle\|^2 \geq 0$ für alle $a, b \in \mathbb{C}$.

Hinweis: Schreiben Sie $\langle\tilde{A}\tilde{B}\rangle$ als $(\langle\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}\rangle + \langle\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}\rangle)/2$.

b) Wir betrachten im Folgenden den Fall eines freien Teilchens mit Hamiltonoperator $H = p^2/2m$. Geben Sie die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Ort und Impuls an und lösen Sie sie.

c) Zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ befinde sich das Teilchen in einem Zustand minimaler Unschärfe,

$$\Delta x(0)\,\Delta p(0) = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{9.4}$$

Was schließen Sie daraus für die Kovarianz $\sigma_{xp}(0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$?

10.1. Generatoren und Kommutatoren von Drehungen

a) Wir betrachten die Drehmatrix

$$D(\varphi, \vec{e}_3) := \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{10.1}$$

um die z-Achse des $\mathbb{R}^3$. Bestimmen Sie den Generator M_3 dieser Drehung. Der Generator ist diejenige Matrix, für die in der Entwicklung um $\varphi = 0$ gilt

$$D(\varphi, \vec{e}_3) = \mathbf{1} + M_3\,\varphi + \mathcal{O}(\varphi^2)\,. \tag{10.2}$$

b) Bestimmen Sie analog die Generatoren M_1 und M_2 von Drehungen um die x-Achse und um die y-Achse.

c) Zeigen Sie damit für eine allgemeine Drehung um eine Achse $\vec{m} \in \mathbb{R}^3$, dass

$$D(\varphi, \vec{m}) = \mathbf{1} + M\varphi + \mathcal{O}(\varphi^2) \qquad \text{mit} \qquad M = \sum_{i=1}^{3} m_i M_i\,,$$

wobei m_i die Komponenten des normierten Vektors $\vec{m} = (m_1, m_2, m_3)$ in der Basis $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ bezeichnen.

d) Zeigen Sie, dass für alle Vektoren $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ gilt:

$$M\vec{r} = \vec{m} \times \vec{r}\,.$$

e) Berechnen Sie die Kommutatoren

$$[M_1, M_2]\,, \qquad [M_2, M_3]\,, \qquad [M_3, M_1]\,,$$

und vergleichen Sie diese mit den aus der Vorlesung bekannten Kommutatorrelationen des Drehimpulsoperators.

10.2. Drehimpulsoperator in Kugelkoordinaten

Seien die Bahndrehimpulsoperatoren $\vec{L}^2$, L_z und $L_\pm$ wie in der Vorlesung definiert.

a) Berechnen Sie $\vec{L}^2$, L_z und $L_\pm$ in Kugelkoordinaten.

b) Zeigen Sie, dass in Kugelkoordinaten für den Laplaceoperator Δ gilt:

$$\Delta = \frac{1}{r}\,\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\,\vec{L}^2\,.$$

Diese Gleichung ist wichtig, um die Schrödingergleichung eines Teilchens in einem Zentralpotential (z. B. des Elektrons im Wasserstoffatom) zu lösen.

11.1. Tensorprodukthilbertraum

Gegeben sei ein System mit Tensorprodukthilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} . \tag{11.1}$$

Die Tensorproduktbasis in $\mathcal{H}$ ist

$$\{|e_n^{(1)}\rangle \otimes |e_k^{(2)}\rangle\} , \tag{11.2}$$

wobei $\{|e_n^{(1)}\rangle\}$ und $\{|e_n^{(2)}\rangle\}$ die Basen von $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ sind. Ein allgemeiner Zustand im System ist gegeben durch

$$|\psi\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k}\, |e_n^{(1)}\rangle \otimes |e_k^{(2)}\rangle \tag{11.3}$$

a) Wir betrachten eine Messung am Subsystem 1. Die Messobservable sei $A^{(1)}$, ein linearer Operator auf $\mathcal{H}^{(1)}$ mit Eigenwertgleichung

$$A^{(1)}|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle \tag{11.4}$$

mit $|\varphi_a\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$. Was ist die Wahrscheinlichkeit P_a, bei Messung von $A^{(1)}$ am Gesamtsystem im Zustand $|\psi\rangle$ das Resultat a zu erhalten?

b) Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit P_a in der Form

$$P_a = \mathrm{tr}_1(\mathbf{P}_a^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}) \equiv \sum_n \langle e_n^{(1)}|\mathbf{P}_a^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}|e_n^{(1)}\rangle \tag{11.5}$$

geschrieben werden kann, wobei tr_1 die Spur über System 1 bezeichnet, $\mathbf{P}_a^{(1)}$ den Projektor auf den Zustand φ_a im System 1 und $\hat{\rho}^{(1)}$ ein linearer Operator ist, der sogenannte „Dichteoperator“, der den Zustand des Subsystems 1 charakterisiert.

c) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\rho}^{(1)} = \mathrm{tr}_2\{|\psi\rangle\langle\psi|\} \equiv \sum_k \langle e_k^{(2)}|\psi\rangle\langle\psi|e_k^{(2)}\rangle . \tag{11.6}$$

Man beachte, dass $|\psi\rangle\langle\psi|$ ein Operator auf dem gesamten System $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ ist und tr_2 eine „partielle Spur“ über Subsystem 2 bezeichnet, d. h. $\mathrm{tr}_2\big(|\psi\rangle\langle\psi|\big)$ ist noch immer ein Operator auf Subsystem 1.

d) Zeigen Sie, dass für einen reinen Tensorproduktzustand $|\psi\rangle = |\chi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle$ gilt:

$$\hat{\rho}^{(1)} = \mathrm{tr}_2\big(|\psi\rangle\langle\psi|\big) = |\chi^{(1)}\rangle\langle\chi^{(1)}| . \tag{11.7}$$

Der Dichteoperator $\hat{\rho}^{(1)}$ ist dann also ein Projektor, d. h. $\big(\hat{\rho}^{(1)}\big)^2 = \hat{\rho}^{(1)}$. Umgekehrt gilt: Falls $\big(\hat{\rho}^{(1)}\big)^2 \neq \hat{\rho}^{(1)}$, dann ist $|\psi\rangle$ kein reiner Tensorproduktzustand.