Quantenmechanik I
Serie 5

HS 2009
Prof. Fröhlich

Exercise 5.1 Orthogonale Projektionen

Ein linearer Operator P ist eine *orthogonale Projektion*, falls $P^* = P$ und $P^2 = P$. Nehme an, $\mathcal{M}$ bezeichne das Bild des Operators P, d.h.

$$\mathcal{M} = \{\psi = P\phi | \phi \in \mathcal{D}(P) \subseteq \mathcal{H}\}. \tag{1}$$

Zeige, dass

$$\begin{aligned} P|_{\mathcal{M}} &= \mathbb{I}_{\mathcal{M}}, \\ P|_{\mathcal{M}^\perp} &= 0_{\mathcal{M}^\perp}, \end{aligned} \tag{2}$$

wobei

$$\mathcal{M}^\perp := \{\psi \in \mathcal{H} | \langle \psi, \phi \rangle = 0, \forall \phi \in \mathcal{M}\}. \tag{3}$$

Wegen $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp$ ist also jeder orthogonale Projektionsoperator beschränkt und $\|P\| = 1$, wenn $P \neq 0$.

Exercise 5.2 Gemischte Zustände

Die vorliegende Aufgabe dient dazu, den quantenmechanischen Zustandsbegriff besser kennen zu lernen. Zu diesem Zweck betrachten wir den endlich-dimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ mit zugehöriger Algebra der Observablen $M_2(\mathbb{C})$ (der Raum der (2×2)-Matrizen mit komplexen Einträgen).

a) Sei P_u die orthogonale Projektion auf $\mathbb{C}u$, $u \in \mathbb{C}^2$. Zeige, dass

$$\langle u, Au \rangle = \mathrm{tr}\,(P_u A) \tag{4}$$

für alle $A \in M_2(\mathbb{C})$.

b) Sei ω ein beliebiger allgemeiner Zustand auf der Algebra der Observablen $M_2(\mathbb{C})$. Zeige, dass ω immer in Form einer konvexen Linearkombination von reinen Zuständen geschrieben werden kann, d.h. es existieren Vektoren $u_1, u_2 \in \mathbb{C}^2$ und reelle Zahlen λ_1 und $\lambda_2 \in [0, 1]$ mit $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, so dass

$$\omega(A) = \lambda_1\, \omega_{u_1}(A) + \lambda_2\, \omega_{u_2}(A) \tag{5}$$

für alle $A \in M_2(\mathbb{C})$, wobei

$$\omega_{u_j}(A) = \langle u_j, Au_j \rangle \tag{6}$$

den zu $u_j \in \mathbb{C}^2$ gehörenden reinen Zustand bezeichnet ($j = 1, 2$).

Exercise 5.3 Verschränkung

Seien S_1 und S_2 zwei physikalische Systeme. Man nennt reine Zustände des zusammengesetzten Systems $S_1 \vee S_2$ *verschränkt*, falls die durch den Gesamtzustand induzierten Zustände der Teilsysteme S_1 und S_2 *gemischt* sind. Wie wir nun sehen werden, ist dies ein rein quantenmechanischer, in der klassischen Mechanik nicht auftretender Effekt.

a) Im Rahmen der klassischen Mechanik ist ein allgemeiner Zustand des zusammengesetzten Systems $S_1 \vee S_2$ ein Wahrscheinlichkeitsmass μ auf dem Phasenraum $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ des zusammengesetzten Systems. Der Zustand μ ist *rein*, falls μ ein Dirac-Mass ist, d.h. $\mu = \delta_{(x_1,x_2)}$

mit $(x_1, x_2) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$. Es bezeichne $\langle f \rangle_\mu$ den Erwartungswert einer beliebigen Observablen $f \in C^\infty(\Gamma_1 \times \Gamma_2)$ bzgl. dem Zustand μ. Zeige, dass für $j = 1, 2$

$$\langle f_j \rangle_{\delta_{x_1}\delta_{x_2}} = \langle f_j \rangle_{\delta_{x_j}} \tag{7}$$

für alle zum Teilsystem S_j assoziierten Observablen $f_j \in C^\infty(\Gamma_j)$ und für alle $(x_1, x_2) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$. Folglich gilt: Wenn der Zustand des Gesamtsystem rein ist, ist der zu einem Teilsystem assoziierte Zustand ebenfalls rein.

b) Wir betrachten nun ein Beispiel, das zeigt, dass die in der vorangegangene Teilaufgabe hergeleitete Beziehung zwischen den reine Zuständen des Gesamtsystems und den induzierten Zuständen von Teilsystemen in der Quantenmechanik nicht mehr allgemein gültig ist. Nehme an, S_1 und S_2 seien zwei quantenmechanische Systeme mit zugehörigen Hilberträumen $\mathcal{H}_j \cong \mathbb{C}^2$ und Algebren der Observablen $\mathcal{A}_j \cong M_2(\mathbb{C})$ $(j = 1, 2)$. Wir gehen davon aus, dass der Zustand von $S_1 \vee S_2$ ein reiner Zustand ist, der durch $\Psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ repräsentiert wird. Zeige, dass die durch Ψ induzierten Zustände ω_1 und ω_2 der Teilsysteme S_1 und S_2 genau dann rein sind, falls Vektoren $\Psi_1, \Psi_2 \in \mathbb{C}^2$ existieren, so dass $\Psi = \Psi_1 \otimes \Psi_2$ (in diesem Fall heisst Ψ *separierbar*).

Exercise 5.4 Der harmonische Oszillator

Ziel der vorliegenden Aufgabe ist die Bestimmung des Spektrums und aller Eigenvektoren resp. verallgemeinerten Eigenvektoren des Hamiltonoperators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{8}$$

des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

a) Definiere

$$a := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\kappa q + \frac{i}{\kappa} p \right). \tag{9}$$

Berechne a^* und zeige, dass $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{D}(a) \cap \mathcal{D}(a^*)$, wobei $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ den Schwartzschen Raum über $\mathbb{R}$ ist. Es zeigt sich, dass $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ invariant ist unter der Wirkung von a, a^*. Alle nun folgenden algebraischen Überlegungen sind demnach in $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ jedoch nicht in $L^2(\mathbb{R}, dx)$ wohldefiniert.

b) Berechne a^*. Zeige, dass $[a, a^*] = 1$, und dass für $\kappa = \sqrt{m\omega}$

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right), \tag{10}$$

wobei $N := a^* a$ den sog. *Zähloperator* bezeichnet. Eigenvektoren von N zum Eigenwert n werden wir im Folgenden mit ψ_n bezeichnen.

c) Zeige, dass $\lambda \geq 0$ für alle $\lambda \in \sigma(N)$, und benütze die Vertauschungsrelationen von a mit a^* um zu zeigen, dass[1]

$$\begin{aligned} a &: \mathrm{Eig}(N, j) \to \mathrm{Eig}(N, j-1) \\ a^* &: \mathrm{Eig}(N, j) \to \mathrm{Eig}(N, j+1). \end{aligned} \tag{11}$$

Begründe daraus die Existenz eines sog. *Vakuums* $\Omega \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ $(\Omega \neq 0)$ mit der Eigenschaft $a\Omega = 0$.

[1] Aus diesem Grund nennt man a und a^* *Vernichtungs-* resp. *Erzeugungsoperator*.

d) Zeige, dass

$$u_n := \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n \,\Omega \tag{12}$$

ein normierter Eigenvektor von H zum Eigenwert

$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{13}$$

ist.

e) Um die somit konstruierten Eigenvektoren angeben zu können, benötigt man den expliziten Ausdruck für die Wellenfunktion Ω. Bestimme diesen aus der definierenden Differenzialgleichung $a\Omega = 0$.

Zu guter Letzt bleibt zu zeigen, dass wir das Spektralproblem des harmonischen Oszillators vollständig gelöst haben, d.h., dass wir alle Elemente des Spektrums und alle Eigenfunktionen/verallgemeinerten Eigenfunktionen des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators gefunden haben. Zu diesem Zweck zeigen wir, dass

$$\mathrm{span}\{u_n | n \in \mathbb{N}_0\} = \mathcal{S}(\mathbb{R}), \tag{14}$$

resp.

$$\langle f, u_n\rangle = 0, \forall n \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow f \equiv 0. \tag{15}$$

f) Beweise die Behauptung

$$\langle f, u_n\rangle = 0, \forall n \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow \langle f, x^n e^{-x^2/2}\rangle = 0, \forall n \in \mathbb{N}_0 \tag{16}$$

per Induktion nach n.

g) Begründe, warum die Funktion

$$F(z) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dx\, f(x) e^{-x^2/2} e^{-izx} \tag{17}$$

für alle $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ eine ganze Funktion in $z \in \mathbb{C}$ ist. Nutze die Annahme $\langle f, u_n\rangle = 0, \forall n$, um zu zeigen, dass alle Koeffizienten in der Potenzreihen-Entwicklung der Funktion $F(z)$ Null sind. Dies führt auf $f \equiv 0$, was zu zeigen war.

Exercise 5.5 Debye-Waller Faktor

Wir betrachten einen einzelnen in ein Kristallgitter eingebauten Atomkern und nehmen im Rahmen eines einfachen Modells an, dass dieser Atomkern harmonisch an seinen Gitterpunkt gekoppelt ist. Des weiteren seien die Bewegungen des Atomkerns in x-, y- und z-Richtung entkoppelt, so dass es ausreichend ist, die Bewegung in x-Richtung zu studieren. Nehme an, bei einem Stoss mit dem Oszillator werde der Impuls p_0 übertragen[2], und dass sich der Kern vor dem Stoss im Grundzustand u_0 befindet. Ziel dieser Aufgabe ist die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit w_0, dass sich der Kern nach dem Stoss und einer Energiemessung immer noch im Grundzustand u_0 befindet.

a) Die Observablen "Ort" und "Impuls" lassen sich gemäss

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^*) \\ p &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\sqrt{\hbar m\omega}(a-a^*) \end{aligned} \tag{18}$$

[2] Im sog. *Mössbauer Effekt* geschieht dies dadurch, dass der angeregte Kern einen γ-Quant emittiert, dessen Impuls in x-Richtung $-p_0$ ist.

in Form des Erzeugungsoperators a^* und des Vernichtungsoperators a ausdrücken (siehe Aufgabe "Der harmonische Oszillator"). Zeige, dass der Operator

$$V_{p_0} := e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} = e^{\frac{i\alpha}{\sqrt{2}}(a+a^*)} \tag{19}$$

mit

$$\alpha := \frac{p_0}{\sqrt{m\omega\hbar}} \tag{20}$$

Wellenfunktionen im Impulsraum um p_0 translatiert.

b) Zeige, dass

$$w_0 = |\langle u_0, V_{p_0} u_0 \rangle|^2 \tag{21}$$

c) Berechne w_0 durch Benützung der folgenden Identität:

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}, \tag{22}$$

falls $[A, [A, B]] = 0$ und $[B, [A, B]] = 0$.