Gesamtpunktzahl: **20 Punkte**

Übungsbetreuung: Stefan Liebler (stefan.liebler@kit.edu)

Aufgabe 1: Vollständiger Satz kommutierender Observablen **2+2+2 = 6 Punkte**

Ein dreidimensionaler reeller Hilbert-Raum werde durch die Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ aufgespannt. In dieser Basis seien die zwei Operatoren

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = b \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{definiert.}$$

(a) Sind H und B hermitesch? Bestimmen Sie die Eigenwerte von H und B.
Hinweis: ω und b seien reell.

(b) Zeigen Sie, dass H und B vertauschen. Es existiert somit ein gemeinsamer Satz von Eigenvektoren. Ermitteln Sie drei Vektoren, die sowohl zu H als auch zu B Eigenvektoren sind. Ist $\{H, B\}$ ein vollständiger Satz kommutierender Observablen?

(c) Zusätzlich sei

$$B' = b \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

definiert. Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von B'. Bilden $\{H, B'\}$ einen vollständigen Satz kommutierender Observablen?

Lösung der Aufgabe 1

(a) Offenbar ist an der Form der Matrizen schon erkennbar, dass $H^\dagger = H$ und $B^\dagger = B$ gilt, sofern ω und b reell gewählt werden. In diesem Falle sind beide hermitesch. Wir bestimmen nun die Eigenwerte von H durch die charakteristische Gleichung

$$\det(H - \lambda^H \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} \hbar\omega - \lambda^H & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda^H & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega - \lambda^H \end{pmatrix} = -\lambda^H (\hbar\omega - \lambda^H)^2 = 0\,.$$

Daraus folgen der Eigenwert $\lambda_1^H = 0$ und der entartete Eigenwert $\lambda_{2,3}^H = \hbar\omega$. Analog folgt für B

$$\det(B - \lambda^B \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda^B & 0 & b \\ 0 & b - \lambda^B & 0 \\ b & 0 & -\lambda^B \end{pmatrix} = (\lambda^{B2} - b^2)(b - \lambda^B) = 0\,.$$

Daraus folgen der entartete Eigenwert $\lambda_{1,2}^B = b$ und der Eigenwert $\lambda_3^B = -b$.

(b) Zuerst sei der Kommutator von H und B berechnet

$$[H,B] = HB - BH = \hbar\omega b \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = 0\,.$$

Also vertauschen H und B. Wir bestimmen das Eigensystem von H durch

$$(H - \lambda_1^H \mathbb{I}) x_1^H = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \hbar\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11}^H \\ x_{12}^H \\ x_{13}^H \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1^H = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(H - \lambda_{2,3}^H \mathbb{I}) x_{2,3}^H = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2,31}^H \\ x_{2,32}^H \\ x_{2,33}^H \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_2^H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_3^H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Die Vektoren x_2^H und x_3^H sind orthogonal gewählt. Wieder verfahren wir analog für B und erhalten

$$(B - \lambda_3^B \mathbb{I}) x_3^B = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{31}^B \\ x_{32}^B \\ x_{33}^B \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_3^B = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$(B - \lambda_{1,2}^B \mathbb{I}) x_{1,2}^B = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,21}^B \\ x_{1,22}^B \\ x_{1,23}^B \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1^B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_2^B = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Auch hier ist wieder x_1^B und x_2^B orthogonal gewählt. Da offenbar $x_i^B = x_i^H$ für alle drei Eigenvektoren gilt, haben H und B ein System gemeinsamer Eigenvektoren. Sie bilden ein vollständigen Satz von Observablen, da durch die Angabe der Eigenwerte die Entartung aufgehoben wird

$$\begin{aligned} \left|x_1^B\right\rangle &= \left|x_1^H\right\rangle = |0, b\rangle \\ \left|x_2^B\right\rangle &= \left|x_2^H\right\rangle = |\hbar\omega, b\rangle \\ \left|x_3^B\right\rangle &= \left|x_3^H\right\rangle = |\hbar\omega, -b\rangle\ . \end{aligned}$$

(c) Auch hier soll wieder das Eigensystem berechnet werden. Es folgt

$$\det(B' - \lambda^{B'} \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda^{B'} & 0 & 0 \\ 0 & b - \lambda^{B'} & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda^{B'} \end{pmatrix} = \lambda^{B'2}(b - \lambda^{B'}) = 0\,.$$

Daraus folgen der entartete Eigenwert $\lambda_{1,2}^{B'} = 0$ und der Eigenwert $\lambda_3^{B'} = b$. Für den entarteten Eigenwert folgt als Eigensystem

$$(B' - \lambda_{1,2}^{B'} \mathbb{I}) x_{1,2}^{B'} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,21}^{B'} \\ x_{1,22}^{B'} \\ x_{1,23}^{B'} \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1^{B'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_2^{B'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Daher bilden $\{H, B'\}$ offenbar keinen vollständigen Satz von Observablen, da mindestens zwei der gemeinsamen Eigenvektoren zu jeweils entarteten Eigenwerten gehören. Die Entartung kann nicht aufgehoben werden.

Aufgabe 2: Quadrierte Operatoren $\boxed{\textbf{2+1+2 = 5 Punkte}}$

Ein dreidimensionaler reeller Hilbert-Raum werde wieder durch die Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ aufgespannt. In dieser Basis seien die zwei Operatoren L_z und S definiert durch

$$
\begin{aligned}
L_z|1\rangle &= |1\rangle\ , \qquad & L_z|2\rangle &= 0\,, \qquad & L_z|3\rangle &= -|3\rangle\ ,\\
S|1\rangle &= |3\rangle\ , \qquad & S|2\rangle &= |2\rangle\ , \qquad & S|3\rangle &= |1\rangle\ .
\end{aligned}
$$

(a) Geben Sie die Matrizen an, die die Operatoren L_z, L_z^2, S und S^2 in der angegebenen Basis repräsentieren. Sind die Operatoren Observablen?

(b) Geben Sie die allgemeinste Form einer Matrix an, die mit L_z^2 kommutiert.

(c) Bilden L_z^2 und S einen vollständigen Satz kommutierender Observablen? Geben Sie eine Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren an.

Lösung der Aufgabe 2

(a) Zuerst ordnen wir den Operatoren in der angegebenen Basis die folgenden Matrizen zu

$$
L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\ , \qquad S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ ,
$$
$$
L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\ , \qquad S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\ .
$$

Alle Matrizen sind reell und symmetrisch und daher hermitesch. Sie können diagonalisiert werden und stellen somit potentielle Observablen dar.

(b) Die allgemeinste Matrix N, die mit L_z^2 vertauscht, ist von der Form

$$
N = \begin{pmatrix} n_{11} & 0 & n_{13} \\ 0 & n_{22} & 0 \\ n_{31} & 0 & n_{33} \end{pmatrix}\ ,
$$

da die Matrix eine beliebige Mischung im Raum zwischen den Elementen $\{|1\rangle, |3\rangle\}$ induzieren kann. Damit ist auch klar, dass L_z^2 mit allen anderen angegebenen Matrizen vertauscht.

(c) Zuerst halten wir fest, dass L_z^2 schon diagonal ist mit einem entarteten Eigenwert $\lambda_{1,3}^{L_z^2} = 1$ und einem Eigenwert $\lambda_2^{L_z^2} = 0$. Somit bildet L_z^2 alleine keinen vollständigen Satz kommutierender Observablen. Wir betrachten des Weiteren dann S. Offenbar haben beide Operatoren den Eigenvektor $|2\rangle$ zum Eigenwert $\lambda_2^{L_z^2} = 0$ und $\lambda_2^S = 1$. Im verbleibenden Unterraum aus $\{|1\rangle, |3\rangle\}$ nimmt S die Form

$$
\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}
$$

an und hat somit die weiteren Eigenwerte $\lambda_1^S = 1$ und $\lambda_3^S = -1$ aus der charakteristischen Gleichung $\lambda^2 - 1 = 0$. Erster Eigenwert ist auch entartet, da schon $\lambda_2^S = 1$ war.

Die zugehörigen Eigenvektoren sind ohne weitere Rechnung $\left|x_1^S\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + |3\rangle\right)$ und $\left|x_3^S\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |3\rangle\right)$. Beide dieser Eigenvektoren sind auch Eigenvektoren zu L_z^2 mit Eigenwert $\lambda_{1,3}^{L_z^2} = 1$. Somit ist die Entartung aufgehoben und es handelt sich um einen vollständigen Satz kommutierender Observablen. Wir charakterisieren die Eigenvektoren wieder durch die Eigenwerte $\left|\lambda_i^{L_z^2}, \lambda_i^S\right\rangle$ und schreiben

$$\begin{aligned}
\left|x_1^{L_z^2}\right\rangle &= \left|x_1^S\right\rangle = |1, 1\rangle \\
\left|x_2^{L_z^2}\right\rangle &= \left|x_2^S\right\rangle = |0, 1\rangle \\
\left|x_3^{L_z^2}\right\rangle &= \left|x_3^S\right\rangle = |1, -1\rangle \ .
\end{aligned}$$

Aufgabe 3: Impulsraumdarstellung **2+2 = 4 Punkte**

Üblicherweise wird die Schrödingergleichung im Ortsraum mit x als freier Variable diskutiert. Wir können aber genauso im Impulsraum mit p als freier Variable arbeiten.

(a) Leiten Sie die Darstellung des Ortsoperators X im Impulsraum ab. *Hinweis:* Gehen Sie wie in Vorlesung 12 bei der Ableitung des Impulsoperators im Ortsraum vor.

(b) Wie lautet die eindimensionale Schrödingergleichung mit dem Potential $V(x)$ in der Impulsraumdarstellung? Spezialisieren Sie das Ergebnis auf das Potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

Lösung der Aufgabe 3

(a) Zwischen den Wellenfunktionen im Orts- und Impulsraum lässt sich mittels Fouriertransformation wechseln, gemäß

$$\tilde{\psi}(p,t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x,t) \, .$$

Für den Erwartungswert des Ortsoperators X gilt daher

$$\begin{aligned}
\langle \psi(x,t) | X | \psi(x,t) \rangle = \int dx \psi(x,t)^* x \psi(x,t) &= \int dx \psi^*(x,t) \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\psi}(p,t) \underbrace{x e^{\frac{i}{\hbar}px}}_{=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p} e^{ipx/\hbar}} \\
&= \int dp \tilde{\psi}(p,t) \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right) \underbrace{\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \int dx \psi^*(x,t) e^{\frac{i}{\hbar}px}}_{=\tilde{\psi}(p,t)^*} \\
&= \frac{\hbar}{i} \int dp \tilde{\psi}(p,t) \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p,t)^* \\
&= \frac{\hbar}{i} \left. \tilde{\psi}(p,t)^* \tilde{\psi}(p,t) \right|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i} \int dp \tilde{\psi}(p,t)^* \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p,t) \\
&= \int dp \tilde{\psi}(p,t)^* i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p,t) \, .
\end{aligned}$$

Somit ist der Ortsoperator im Impulsraum durch $X = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ gegeben. Es wurde angenommen, dass die Wellenfunktion im Unendlichen verschwindet.

(b) Die stationäre Schrödingergleichung ist bekanntermaßen im Ortsraum von der Form

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t) \qquad \Rightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)\,.$$

Dabei entspricht $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$ mit dem Impulsoperator $P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ im Ortsraum. Im Impulsraum ist nun $P = p$ und der Ortsoperator gemäß (a) $X = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$, so dass folgt

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\right)\tilde{\psi}(p,t)\,.$$

Insbesondere folgt für das angegebene Potential

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t) = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\tilde{\psi}(p,t)\,.$$

Aufgabe 4: Impulsoperator und Impulseigenzustände **2+2+1 = 5 Punkte**

Betrachten Sie ein quantenmechanisches Teilchen, welches sich frei entlang einer Raumrichtung der Länge $2L$ bewegen kann.

(a) Unter welchen Randbedingungen an die Orstraumwellenfunktion ist der Impulsoperator P_x im Ortsraum hermitesch?
Hinweis: Schreiben Sie $\langle\psi|P_x|\phi\rangle = \int_{-L}^{L} dx\psi^*\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi$ und integrieren Sie partiell. Welcher Teil des Resultats muss entfallen, damit Hermitizität vorliegt?

(b) Betrachten Sie nun die Eigenwertgleichung für den Impulsoperator $P_x\,|p\rangle = p\,|p\rangle$ im Ortsraum. Bestimmen Sie unter Berücksichtigung der in (a) gefundenen Randbedingungen das Eigenwertspektrum und die normierten Eigenfunktionen $|p\rangle$ bzw. $\psi_p(x)$.
Hinweis: Die Randbedingungen aus (a) führen auf $|\psi_p(L)|^2 = |\psi_p(-L)|^2$, wobei $\psi_p(x)$ die Wellenfunktion von $|p\rangle$ im Ortsraum darstellt. Sie sollten $\psi_p^n(x) = Ne^{i/\hbar p_n x}$ mit $p_n = \frac{n\pi\hbar}{L}, n \in \mathbb{Z}$ erhalten.

(c) Untersuchen Sie den Grenzfall $L \to \infty$. Was passiert mit dem diskreten Spektrum der Impulseigenwerte für $L \to \infty$? Normieren Sie die Eigenfunktionen auf die δ-Funktion $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$.
Hinweis: Berechnen Sie zuerst $\langle p|p'\rangle$ für den endlichen Fall. Sie erhalten einen Zusammenhang, welcher die Normierung auf die δ-Funktion rechtfertigt.

Lösung der Aufgabe 4

(a) Der angegebene Erwartungswert ist im Orstraum gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle\psi|P_x|\phi\rangle &= \int_{-L}^{L} dx\psi^*\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi = \frac{\hbar}{i}\psi^*\phi\Big|_{-L}^{L} - \int_{-L}^{L} dx\left(\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi^*\right)\phi \\ &= \frac{\hbar}{i}\psi^*\phi\Big|_{-L}^{L} + \int_{-L}^{L} dx\left(\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi\right)^*\phi = \frac{\hbar}{i}\psi^*\phi\Big|_{-L}^{L} + \langle P_x\psi|\phi\rangle = \frac{\hbar}{i}\psi^*\phi\Big|_{-L}^{L} + \langle\phi|P_x|\psi\rangle^*\,.\end{aligned}$$

Somit ist P_x hermitesch, falls $\frac{\hbar}{i}\psi^*\phi\big|_{-L}^{L} = 0$, also $\psi^*(L)\phi(L) = \psi^*(-L)\phi(-L)$. Insbesondere ist dies erfüllt für normierbare Wellenfunktionen im Limes $L \to \infty$.

(b) Offensichtlich ist ein Spezialfall aus (a) die Randbedingung für die Wellenfunktion des Impulsoperators $|\psi_p(L)|^2 = |\psi_p(-L)|^2$. Als Eigenwertgleichung für den Impulsoperator im Ortsraum ergibt sich

$$P_x\psi_p(x) = p\psi_p(x) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial}{\partial x}\psi_p(x) = \frac{i}{\hbar}p\psi_p(x)\,.$$

Damit sind die Eigenfunktionen von der angegebenen Form $\psi_p(x) = Ne^{\frac{i}{\hbar}px}$. Um die angegebene Gleichung aus a) für beliebige Wellenfunktionen zu erfüllen, muss sogar allgemein $\psi_p(L) = \psi_p(-L)$ gelten. Dies führt auf

$$Ne^{ip_nL/\hbar} = Ne^{-ip_nL/\hbar} \qquad \Rightarrow \qquad e^{ip_n 2L/\hbar} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{2p_nL}{\hbar} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}\,.$$

Also gilt für die Impulseigenfunktionen im Ortsraum

$$\psi_p^n(x) = Ne^{i/\hbar p_n x} \qquad \text{mit} \qquad p_n = \frac{n\pi\hbar}{L}, n \in \mathbb{Z}\,.$$

Zuletzt ist noch die Normierung N zu ermitteln. Dazu berechnen wir im Hinblick auf Teilaufgabe (c) bereits $\langle p|p'\rangle$. Hierfür folgt

$$\begin{aligned}\langle p|p'\rangle &= \int_{-L}^{L} dx|N|^2e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = |N|^2\frac{\hbar i}{p-p'}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\Big|_{-L}^{L} = |N|^2\frac{\hbar i}{p-p'}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')L} - e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')L}\right)\\ &= |N|^2\frac{2\hbar}{p-p'}\sin\left(\frac{1}{\hbar}(p-p')L\right) = |N|^2 2\hbar\frac{\sin\left(\frac{1}{\hbar}(p-p')L\right)}{p-p'}\,.\end{aligned}$$

Im Limes $p \to p'$ folgt nach l'Hopital

$$\lim_{x\to 0}\frac{\sin(\alpha x)}{x} = \alpha\,.$$

Somit ist für $p = p'$

$$\langle p|p\rangle = |N|^2 2L = 1 \qquad \Rightarrow \qquad N = \frac{1}{\sqrt{2L}}\,.$$

(c) Offenbar wird das diskrete Spektrum der Impulseigenwerte für $L \to \infty$ kontinuierlich, alle Impulse werden somit möglich. Der Ausdruck $\delta_L(x) = \frac{\sin(\pi x L)}{\pi x}$ konvergiert zudem für $L \to \infty$ gegen die δ-Distribution, so dass eine entsprechende Normierung gerechtfertigt ist. Dann folgt

$$\langle p|p'\rangle = |N|^2 2\lim_{L\to\infty}\frac{\sin\left(\frac{1}{\hbar}(p-p')L\right)}{\frac{1}{\hbar}(p-p')} = |N|^2 2\delta\left(\frac{1}{\hbar\pi}(p-p')\right) = |N|^2 2\pi\hbar\delta(p-p')\,.$$

Um auf die δ-Distribution zu normieren, ist also $N = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}$.