Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 5

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 26.05.2023, 14:00 Uhr

Das Übungsblatt wird in Gruppen von maximal 3 Personen bearbeitet. Die Abgabe erfolgt digital über ILIAS.

Aufgabe 1. Hilbert-Raum (5 Punkte)

$\mathcal{H}$ sei die Menge aller Spaltenvektoren

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = (a_n)\,, \tag{1}$$

deren Komponenten komplexe Zahlen sind mit

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 < \infty. \tag{2}$$

Addition und Multiplikation mit einer komplexen Zahl seien komponentenweise erklärt:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_n + b_n)\,, \tag{3}$$

$$c\mathbf{a} = c\,(a_n) \tag{4}$$

Das Skalarprodukt sei wie folgt definiert:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n. \tag{5}$$

1. (3 Punkte) Wiederholen Sie mit einem Lehrbuch Ihrer Wahl zur Quantenmechanik (z.B. Fliessbach, Teil V) das Thema Hilberträume. Fassen Sie dann kurz zusammen, was ein Hilbertraum ist.

2. (2 Punkte) Zeigen Sie, dass $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum ist.

Lösung Aufgabe 1.

1. (3 Punkte) Ein Hilbertraum

   (a) ist ein komplexer, linearer Vektorraum.

   (b) besitzt ein Skalarprodukt und damit eine Norm.

   (c) ist vollständig und separabel.

2. (a) Wir zeigen zunächst, dass $\mathcal{H}$ ein Vektorraum ist. Die Vektoraddition ist assoziativ, kommutativ, es existiert ein Nullelement und ein inverses Element:

$$\mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c}) = (a_n + b_n + c_n) = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} \tag{6}$$
$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_n + b_n) = \mathbf{b} + \mathbf{a} \tag{7}$$
$$\mathbf{a} + \mathbf{0} = (a_n + 0) = \mathbf{a_n} \tag{8}$$
$$\mathbf{a} + (-\mathbf{a}) = (a_n + (-a_n)) = \mathbf{0}. \tag{9}$$

Außerdem ist

$$\sum_n |a_n + b_n|^2 \leq \sum_n \left(|a_n + b_n|^2 + |a_n - b_n|^2\right) = 2\sum_n \left(|a_n|^2 + |b_n|^2\right) < \infty. \tag{10}$$

$\Rightarrow$ wenn $\mathbf{a},\ \mathbf{b} \in \mathcal{H}$, dann ist auch $\mathbf{a} + \mathbf{b} \in \mathcal{H}$. $\mathcal{H}$ ist also abgeschlossen bezüglich der Vektoraddition. Für die Skalarmultiplikation mit $c_1,\ c_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$c_1 (\mathbf{a} + \mathbf{b}) = c_1 (a_n + b_n) = c_1\mathbf{a} + c_1\mathbf{b} \tag{11}$$
$$(c_1 + c_2)\,\mathbf{a} = (c_1 + c_2)\,(a_n) = c_1\mathbf{a} + c_2\mathbf{a} \tag{12}$$
$$(c_1 c_2)\,\mathbf{a} = (c_1 c_2)\,(a_n) = c_1\,(c_2\mathbf{a}) \tag{13}$$
$$0\mathbf{a} = 0\,(a_n) = \mathbf{0}. \tag{14}$$

Mit dem gleichen Argument wie bei der Vektoraddition ist $\mathcal{H}$ auch bezüglich der Skalarmultiplikation abgeschlossen.

(b) Wegen

$$0 \leq \sum_n (|a_n| - |b_n|)^2 \tag{15}$$

ist

$$2\sum_n |a_n||b_n| \leq \sum_n \left(|a_n|^2 + |b_n|^2\right) < \infty. \tag{16}$$

Für $\mathbf{a},\ \mathbf{b} \in \mathcal{H}$ existiert also das Skalarprodukt.

(c) $\mathcal{H}$ ist separabel:
Die Spaltenvektoren

$$\mathbf{e}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \leftarrow \text{n-te Komponente,} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \tag{17}$$

die nur in der n-ten Komponente die Eins, ansonsten überall die Null haben, bilden eine VON-Basis:

$$\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_m = \delta_{nm}. \tag{18}$$

Jeder Vektor lässt sich als Linearkombination der $\mathbf{e}_n$ schreiben.

(d) $\mathcal{H}$ ist vollständig: Die Cauchyfolge ist

$$||\mathbf{a}^{(n)} - \mathbf{a}^{(m)}||^2 = \sum_\nu |a_\nu^{(n)} - a_\nu^{(m)}|^2 \to 0. \tag{19}$$

Da die Summanden nicht-negativ sind, muss jeder für sich bereits verschwinden:

$$|a_\nu^{(n)} - a_\nu^{(m)}| \to 0 \qquad \forall\nu \tag{20}$$
$$\Rightarrow \left(a_\nu^{(n)} - a_\nu^{(m)}\right) \to 0 \qquad \forall\nu. \tag{21}$$

Die komplexen Zahlen sind vollständig. Deswegen existiert für jedes ν ein eindeutiges Grenzelement α_ν mit

$$\lim_{n\to\infty} a_\nu^{(n)} = \alpha_\nu \in \mathbb{C}. \tag{22}$$

Es gibt also einen Limesvektor α mit den Komponenten α_ν. Wir müssen noch zeigen, dass α zu $\mathcal{H}$ gehört. Dazu nutzen wir noch einmmal die Cauchy-Folge aus:

$$\sum_\nu |a_\nu^{(n)} - a_\nu^{(m)}|^2 < \epsilon, \text{falls} n,\ m > N(\epsilon)\,. \tag{23}$$

Da die Grenzwerte existieren, gilt dieses insbesondere für $n \to \infty$:

$$\sum_\nu |a_\nu - a_\nu^{(m)}|^2 < \epsilon. \tag{24}$$

$\Rightarrow$ Der neue Vektor $\left(\alpha - \mathbf{a}^{(m)}\right)$ gehört zu $\mathcal{H}$. Ferner $\mathbf{a}^{(m)} \in \mathcal{H}$. Nach Teil a) gilt dies dann aber auch für die Summe

$$\left[\left(\alpha - \mathbf{a}^{(m)}\right) + \mathbf{a}^{(m)}\right] = \alpha \in \mathcal{H}. \tag{25}$$

Aufgabe 2. Dirac Notation (8 Punkte)

Wir betrachten drei verschiedene Basen des Hilbertraumes: Die Ortsbasis $\{|x\rangle\}$, die Wellenzahlbasis $\{|k\rangle\}$ (beides sind kontinuierliche Basen) und eine nicht weiter spezifizierte diskrete (abzählbar unendliche) Basis $\{|n\rangle\}$, wobei $n \in \mathbb{N}$.

1. (2 Punkte) Die Wellenzahlbasis $\{|k\rangle\}$ ist gegeben durch die Menge der Eigenfunktionen des Wellenzahloperators $\hat{k} = \hat{p}/\hbar$, d.h. $\hat{k}\,|k\rangle = k\,|k\rangle$. Schreiben Sie den Impulsoperator in der Ortsraumdarstellung und bestimmen Sie die Eigenfunktionen $\psi_k(x) = \langle x|\ k\rangle$ durch Lösen der Differentialgleichung. Berücksichtigen Sie dabei, dass die Basisfunktionen orthonormiert sind im Sinne

$$\int \mathrm{d}x\, \psi_q(x)^* \psi_k(x) = \delta(q-k)\,. \tag{26}$$

2. (1 Punkte) Drücken Sie den Identitätsoperator $\hat{1}$ in jeder der drei Basen aus. Verifizieren Sie explizit für die Ortsdarstellung, dass $\langle q|\,\hat{1}\,|k\rangle = \langle q|\ k\rangle$ gilt. *Hinweis: Dieser Identitätsoperator hilft Ihnen bei allen folgenden Aufgaben.*

3. (1 Punkt) Sei $\hat{A}$ ein Operator, dessen Eigenzustände durch $\{|n\rangle\}$ gegeben sind. Drücken Sie $\hat{A}$ in der Dirac Notation durch diese Eigenfunkionen und Eigenwerte A_n aus.

4. (2 Punkte) Entwickeln Sie die Zustände $|x\rangle$ und $|k\rangle$ jeweils in der Orts- und Wellenzahlbasis.

5. (1 Punkt) Betrachten Sie den allgemeinen Zustand $|\phi\rangle$. Was ist die Ortsraumdarstellung $\phi(x)$ dieses Zustandes und wie sieht seine Ortsraumentwicklung aus?

6. (1 Punkt) Betrachten Sie den Zustand $|\phi\rangle$ mit der Wellenzahldarstellung

$$\phi(k) = \langle k|\phi\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-k^2/(4\sigma^2)}\,. \tag{27}$$

Finden Sie seine Ortsraumdarstellung $\phi(x) = \langle x|\ \phi\rangle$.

Lösung Aufgabe 2.

1. Das Eigenwertproblem für den Wellenzahloperator ist in der Realraumdarstellung

$$-i\frac{\partial}{\partial x}\psi_k(x) = k\psi_k(x)$$

und lässt sich mittels Exponentialansatz $\psi_k(x) = Ae^{\lambda k}$ lösen. Man findet durch Einsetzen, $\lambda = ik$, i.e.

$$\psi_k(x) = \langle x|\, k\rangle = Ae^{ikx}$$

Die Normierungskonstante A finden wir durch

$$\delta(q-k) = \int dx\, \psi_q(x)^* \psi_k(x) = |A|^2 \int dx\, e^{i(k-q)} = |A|^2 2\pi\delta(q-k)\,.$$

Somit ist die Wellenzahl-Eigenfunktioin in der Realraumdarstellung gegeben durch

$$\psi_k(x) = \langle x|\, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}\,.$$

2. Es ist

$$\hat{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| = \int dx\, |x\rangle \langle x| = \int dk\, |k\rangle \langle k|$$

Einsetzen der Identität in der Ortsdarstellung ergibt

$$\langle q|\, \hat{1}\, |k\rangle = \int dx\, \langle q|\, x\rangle \langle x|\, k\rangle = \int dx \psi_q^*(x)\psi_k(x) = \delta(q-k) = \langle q|\, k\rangle\ .$$

3. Laut Aufgabenstellung gilt

$$\hat{A}\, |n\rangle = A_n\, |n\rangle\ .$$

Da $\{|n\rangle\}$ eine Basis ist, nutzen wir die Identiätsdarstellung $\hat{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$,

$$\hat{A} = \hat{A}\hat{1} = \sum_n \hat{A}\, |n\rangle \langle n| = \sum A_n\, |n\rangle \langle n|$$

4. Man findet durch Einsetzen der passenden Identität:

$$\begin{aligned}
|x\rangle &= \int dx'\, |x'\rangle \langle x'|\, x\rangle = \int dx'\, |x'\rangle\, \delta(x'-x) = |x\rangle\ ,\\
|x\rangle &= \int dk\, |k\rangle \langle k|\, x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{-ikx}\, |k\rangle\ ,\\
|k\rangle &= \int dx\, |x\rangle \langle x|\, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{ikx}\, |x\rangle\ ,\\
|k\rangle &= \int dk'\, |k'\rangle \langle k'|\, k\rangle = \int dk'\, |k'\rangle\, \delta(k'-k) = |k\rangle\ .
\end{aligned}$$

5. Die Ortsraumdarstellung eines allgemeinen Operators $|\phi\rangle$ ist gegeben durch $\phi(x) = \langle x|\, \phi\rangle$. Eine Entwicklung in der Ortsraumbasis ergibt

$$|\phi\rangle = \int dx\, |x\rangle \langle x|\, \phi\rangle = \int dx \phi(x)\, |x\rangle\ .$$

6. Die Ortsraumdarstellung des Operators ist

$$\begin{aligned}
\phi(x) = \langle x|\, \phi\rangle = \int dk\, \langle x|\, k\rangle \langle k|\, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int dk e^{ikx - k^2/(4\sigma^2)}\\
= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\sigma} e^{-x^2\sigma^2}
\end{aligned}$$

Der Wechsel vom Wellenzahl- in den Ortsraum entspricht also (bis auf Kombinationen mit 2π) exakt der auf dem letzten Blatt besprochenen Fouriertransformation.

Aufgabe 3. (? Punkte)

Lösung Aufgabe 3.

1. Fix any $\epsilon > 0$. Choose $n \in \mathbb{N}$ such that $N > 1/\epsilon^2$. Now assume that $n, m \geq N$. We can evaluate the norm:

$$\begin{aligned}
||f_n(x) - f_m(x)|| &= \left(\int_0^2 (f_n(x) - f_m(x))^2\,dx\right)^{1/2} = \left(\int_0^1 (f_n(x) - f_m(x))^2\,dx + \int_1^2 (f_n(x) - f_m(x))^2\,dx\right)^{1/2} \\
&= \left(\int_0^1 (x^n - x^m)^2\,dx\right)^{1/2} = \left(\int_0^1 (x^{2n} + x^{2m} - 2x^{n+m})\,dx\right)^{1/2} \\
&= \left(\left[\frac{1}{2n+1}x^{2n+1} + \frac{1}{2m+1}x^{2m} - \frac{2}{n+m+1}x^{n+m+1}\right]_0^1\right)^{1/2} \\
&= \left(\frac{1}{2n+1} + \frac{1}{2m+1} - \frac{2}{n+m+1}\right)^{1/2} \\
&< \left(\frac{1}{2n+1} + \frac{1}{2m+1}\right)^{1/2} < \left(\frac{1}{2n} + \frac{1}{2m}\right)^{1/2} \leq \left(\frac{1}{2N} + \frac{1}{2N}\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{N}} < \epsilon
\end{aligned}$$

and therefore $||f_n(x) - f_m(x)|| < \epsilon$.

The sequence of functions $(f_n(x))_{n=1}^{\infty}$ is therefore Cauchy.

2. Looking at the sequence of functions, we can see that the relevant part is on the interval $x \in [0, 1]$. Since the function is defined as $f_n(x) = x^n$ in this interval, we expect that as $n \to \infty$ that $f_n \to 0$ here. In the other half of the interval, $x \in [1, 2]$, the behaviour is constant so $f_n \to 1$. The limiting behaviour is therefore expected to be a step function

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } 0 \leq x \leq 1 \\ 1 & \text{wenn } 1 < x \leq 2 \end{cases}.$$

which is a discontinuous function due to the jump and is therefore not in $C([0, 2])$. With this guess we must prove convergence, and again we start with the usual logic of a limit proof: for any value of $\epsilon > 0$ there exists an $N \in \mathbb{N}$, such that for $n \geq N$ we are guaranteed that $||f_n - f|| < \epsilon$. We again select $N > 1/\epsilon^2$.

$$\begin{aligned}
||f_n(x) - f(x)|| &= \left(\int_0^2 (f_n(x) - f(x))^2\,dx\right)^{1/2} = \left(\int_0^1 (f_n(x) - 0)^2\,dx + \int_1^2 (f_n(x) - 1)^2\,dx\right)^{1/2} \\
&= \left(\int_0^1 (f_n(x))^2\,dx\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{2n+1}} \\
&< \sqrt{\frac{1}{N}} < \epsilon.
\end{aligned}$$

The sequence of continuous functions $(f_n(x))_{n=1}^{\infty}$ therefore converges to the discontinuous function $f(x)$. So although the sequence is Cauchy it does not converge in $C[0, 2]$.