Blatt 3

Ausgabe: Freitag, 20.11.20; Abgabe bis: Freitag, 27.11.2020, 14 Uhr (**20 Punkte**)

Aufgabe 1 Operatoren auf dem L^2 [12 Punkte]

Der Raum der quadratintegrablen Funktionen über $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ $(n \in \mathbb{N})$

$$\mathcal{L}^2(\Omega) = \left\{ f : \Omega \longrightarrow \mathbb{C} \;\middle|\; \int_\Omega |f(x)|^2 dx < \infty \right\} \tag{1}$$

bildet zusammen mit dem Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{L}^2(\Omega) \times \mathcal{L}^2(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{C} \\ f, g \longmapsto \langle f | g \rangle &:= \int_\Omega f^*(x) g(x) \mathrm{d}x \end{aligned} \tag{2}$$

den Hilbertraum $L^2(\Omega)$ der für die Darstellung von Wellenfunktionen unerlässlich ist. Da es sich beim $L^2(\Omega)$ um einen vollständigen Vektorraum handelt, ist die Bra-Ket-Notation wieder extrem praktisch, um komplizierte Ausdrücke kompakt darzustellen (wir haben sie bei der Definition des Skalarproduktes $\langle \cdot | \cdot \rangle$ bereits verwendet). Im Folgenden wollen wir uns mit Operatoren und deren Darstellungen auf dem $L^2(\Omega)$ am Beispiel des Impulsoperators $\hat{p}$ in einer Dimension vertraut machen und betrachten dafür den $L^2(\Omega)$ mit $\Omega \equiv \mathbb{R}$.

(1.a) (**3 Punkte**) Wir wollen zunächst die Darstellung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung zeigen, welche Ihnen auf dem letzten Übungszettel bereits begegnet ist. Hierfür schreiben wir formal die Wirkung des Impulsoperators auf einen allgemeinen Zustand $|\psi\rangle$ in der Ortsdarstellung durch Einschieben zweier Identitäten $\int_\mathbb{R} dx\, |x\rangle \langle x|$ aus:

$$\hat{p}\, |\psi\rangle = \int_\mathbb{R} dx \int_\mathbb{R} dx'\, |x\rangle \langle x|\hat{p}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle \;\;, \tag{3}$$

wobei die abstrakten Zustände $|x\rangle$ Eigenzustände des Ortsoperators $\hat{x}$ sind, d.h. $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. Die "Koeffizienten" $\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle$ bezeichnen wir wieder als Wellenfunktion des Zustandes $|\psi\rangle$ in der Ortsdarstellung.
Zeigen Sie, dass die Wirkung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung gegeben ist durch

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \;, \tag{4}$$

wobei $|p\rangle$ die abstrakten Eigenzustände von $\hat{p}$ sind.
Hinweis: Es gilt $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px}$

(1.b) (**3 Punkte**) Zeigen Sie sowohl in der Orts- als auch der Impulsdarstellung, dass der Impulsoperator hermitesch ist, also für zwei beliebige Zustände $|\psi\rangle\,, |\varphi\rangle$ gilt

$$\langle \psi|\hat{p}\,\varphi\rangle = \langle \hat{p}\,\psi|\varphi\rangle \;\;. \tag{5}$$

(1.c) (**4 Punkte**) Wir wollen nun die Darstellungen des Impulsoperators ausnutzen, um die Erwartungswerte für spezielle Zustände auszurechnen. Betrachten Sie zwei Zustände $|\psi\rangle\,, |\varphi\rangle$, welche in der Ortsdarstellung definiert sind durch:

$$\langle x|\psi\rangle := \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \ , \quad \text{mit } \sigma \in \mathbb{R} \text{ und } \sigma > 0 \ , \tag{6}$$

$$\langle x|\varphi\rangle := \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \ , \quad \text{mit } k \in \mathbb{R} \ . \tag{7}$$

Berechnen Sie für beide Zustände jeweils die Erwartungswerte $\langle\hat{p}\rangle_\xi$, $\langle\hat{p}^2\rangle_\xi$, $\langle\hat{x}\rangle_\xi$ und $\langle\hat{x}^2\rangle_\xi$, wobei wir die Abkürzung $\langle\hat{O}\rangle_\xi = \langle\xi|\hat{O}|\xi\rangle$ verwendet haben und $|\xi\rangle \in \{|\psi\rangle\,, |\varphi\rangle\}$.

(1.d) (**2 Punkte**) Verwenden Sie ihre Ergebnisse, um für beide Zustände jeweils die "mittlere Streuung"

$$\Delta x_\xi = \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle_\xi - \langle\hat{x}\rangle_\xi^2} \quad \text{und} \quad \Delta p_\xi = \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle_\xi - \langle\hat{p}\rangle_\xi^2} \tag{8}$$

auszurechnen. Interpretieren Sie die Ergebnisse unter dem Aspekt, dass für ein Teilchen, welches durch den Zustand $|\xi\rangle$ beschrieben wird

1. $|\langle x|\xi\rangle|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte dieses Teilchen ist,
2. $|\langle p|\xi\rangle|^2$ die Impulswahrscheinlichkeitsdichte dieses Teilchens ist.

Aufgabe 2 Lineare Algebra [8 Punkte]

In der Quantenmechanik werden wir nicht nur mit der Darstellung der Wirkung von Operatoren auf Zustände arbeiten. Es ist genauso nützlich, die (differentiellen) Beziehungen zwischen Operatoren untereinander auszunutzen. Dafür beweisen wir im Folgenden einige sehr wichtige Beziehungen.

(2.a) (**2 Punkte**) Betrachten Sie eine polynomielle Funktion $F(\hat{B})$ eines linearen Operators $\hat{B}$. Wir definieren die Ableitung von F nach $\hat{B}$ durch die Beziehung

$$\frac{d}{d\hat{B}}(\hat{B})^k = k(\hat{B})^{k-1} \ , \quad \text{für } k \in \mathbb{N}. \tag{9}$$

Zeigen Sie damit, dass für lineare Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ mit $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] = 0$ gilt:

$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = [\hat{A},\hat{B}]\frac{dF}{d\hat{B}} \ . \tag{10}$$

(2.b) (**2 Punkte**) Die Ableitung eines linearen Operators $\hat{A}(t)$, der von einem reellen Parameter $t \in \mathbb{R}$ abhängt, ist definiert durch $\frac{d\hat{A}}{dt} = \lim\limits_{\Delta t\to 0} \frac{\hat{A}(t+\Delta t)-\hat{A}(t)}{\Delta t}$. Es gilt insbesondere für zwei Operatoren $\hat{A}(t), \hat{B}(t)$:

$$\frac{d(\hat{A}+\hat{B})}{dt} = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt} \ , \quad \text{und} \quad \frac{d(\hat{A}\hat{B})}{dt} = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B}(t) + \hat{A}(t)\frac{d\hat{B}}{dt} \ . \tag{11}$$

Bestimmen Sie damit für Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ die Ableitungen

$$\frac{d}{dt}\mathrm{e}^{t\hat{A}} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}\left(\mathrm{e}^{t\hat{A}}\mathrm{e}^{t\hat{B}}\right) \ . \tag{12}$$

Die *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel*

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]] + \cdots \tag{13}$$

mit linearen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ ist besonders wichtig bei der Arbeit mit unitären Transformationen. Wir wollen sie Stück für Stück zeigen.

(2.c) (**4 Punkte**) Betrachten Sie zunächst für $t \in \mathbb{R}$ den Operator

$$\hat{B}(t) = \mathrm{e}^{t\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-t\hat{A}} \tag{14}$$

und zeigen Sie, dass dieser folgender Beziehung genügt:

$$[\hat{A}, \hat{B}(t)] = \frac{d}{dt}\hat{B}(t)\ . \tag{15}$$

Benutzen Sie diese Relation und zeigen Sie, dass $\hat{B}(t)$ mit $\hat{B}(0) = \hat{B}$ die folgende Integralgleichung löst

$$\hat{B}(t) = \hat{B} + \int_0^t dt[\hat{A}, \hat{B}(t)]\ . \tag{16}$$

Nun definieren wir den $n \in \mathbb{N}$-fachen Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}]_n$ durch

$$[\hat{A},\hat{B}]_n := [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]_{n-1}], \quad \text{mit} \quad [\hat{A},\hat{B}]_1 = [\hat{A},\hat{B}]\ . \tag{17}$$

Zeigen Sie mittels vollständiger Induktion, dass die rekursive Folge

$$\hat{B}_{n+1}(t) = \hat{B}_n(t) + \frac{t^{n+1}}{(n+1)!}[\hat{A},\hat{B}]_{n+1} \tag{18}$$

für $\hat{B}(t) = \lim_{n\to\infty} \hat{B}_n$ ebenfalls eq. (16) löst. Wie folgt daraus die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel?