
Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 4
Operatoren in der Quantenmechanik

Wintersemester 15/16

Das zweite Postulat der Quantenmechanik bezieht sich auf die Beschreibung physikalisch messbarer Größen (Observablen):

Jede Observable wird durch einen hermiteschen Operator beschrieben.

Jede Observable besitzt ein Spektrum aus einem diskreten Teil (Eigenvektoren, Eigenwerte) und einem Kontinuum. Im Folgenden wollen wir uns mit Eigenschaften der Operatoren (Linearität, Hermitizität), Eigenwertbetrachtungen und entsprechenden Notationen in der Quantenmechanik befassen.

1 Linearität und Eigenfunktionen

- a) Überprüfen Sie durch Anwenden auf $\Psi(x) = a \cdot g(x) + b \cdot h(x)$, ob die folgenden Operatoren linear sind. Ist die jeweils angegebene Funktion $f(x)$ eine Eigenfunktion zum jeweiligen Operator?

- (i) $\hat{O}_1 = \int dx$ $f(x) = e^{2x-1}$
- (ii) $\hat{O}_2 = \ln$ $f(x) = \sqrt{x}$
- (iii) $\hat{O}_3 = \hat{x}$ $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$
- (iv) $\hat{O}_4 = \hat{p}_x$ $f(x) = \cos(x) + i \cdot \sin(x)$

- b) (i) Zeigen Sie, dass $\sin(nx)$ und $\cos(nx)$ entartete Eigenfunktionen zum Operator $\frac{d^2}{dx^2}$ sind.

- (ii) Zeigen Sie, dass e^{nx} gleichzeitig Eigenfunktion zu den Operatoren $\frac{d}{dx}$ und $\frac{d^2}{dx^2}$ ist.

- (iii) Es seien zwei entartete Eigenfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 zu einem linearen Operator $\hat{O}$ gegeben. Zeigen Sie, dass jede Linearkombination $\phi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$ ($c_1, c_2 \in \mathbb{C}$) ebenfalls eine Eigenfunktion zu $\hat{O}$ ist und dass diese Linearkombination denselben Eigenwert wie ϕ_1 und ϕ_2 besitzt.

- (iv) Was passiert in (iii), wenn ϕ_1 und ϕ_2 nicht entartet sind?

2 Integrale und Dirac-Notation

Wichtige Integrale in der Quantenmechanik sind Integrale über Operatoren I_{mn} und Überlappintegrale S_{mn} :

$$I_{mn} = \int f_m^*(\tau) \hat{O} f_n(\tau) d\tau \quad S_{mn} = \int f_m^*(\tau) f_n(\tau) d\tau \quad (1)$$

Hierbei beschreibt $d\tau$ die Integration über den gesamten Raum. Der Spezialfall S_{mm} kann als Normierungsintegral bezeichnet werden.

a) Gegeben seien Funktionen der Form:

$$f_{O,\alpha}(r) = N_{O,\alpha} e^{-\alpha \cdot (r-O)^2}$$

Weiterhin wählen wir 2 Funktionen, wobei α für beide gleich ist sowie für die erste $O_1 = -\frac{d}{2}$ und für die zweite $O_2 = \frac{d}{2}$ ist. So ist der Abstand der Maxima beider Funktionen genau d .

(i) Geben Sie die allgemeinen Ausdrücke für Operator- und Überlappintegral (Gl. (1)) in Dirac-Notation sowie für Normierungs- und Orthonormalitätsbedingung in Integral- und Dirac-Notation an.

(ii) Zeigen Sie, dass der Normierungsfaktor $N_{O,\alpha}$ von O unabhängig ist. Wie lautet er? Nutzen Sie das bestimmte Integral sowie Integration durch Substitution:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}$$

(iii) Skizzieren Sie die beiden Funktionen $f_{O_1,\alpha}$ und $f_{O_2,\alpha}$ in das gleiche Koordinatensystem.

b) Wir betrachten weiterhin die 2 Funktionen aus a).

(i) Berechnen Sie das Überlappintegral S_{12} der beiden Funktionen in Abhängigkeit von α und d . Welchen Wert hat das Integral S_{21} ?

(ii) Zeigen Sie, dass die Integrale I_{12} und I_{21} über den Operator $\hat{A} = \frac{d}{dr}$ für $d \neq 0$ nicht gleich sind. (*Hinweis:* Sie müssen die beiden Integrale nicht vollständig ausrechnen.)

3 Hermitizität, Matrix-Notation, unitäre Transformation

Integrale über Operatoren (z.B. I_{mn}) können auch als Elemente einer Matrix $\mathbf{I}$ aufgefasst werden. Die Eigenschaft der Hermitizität eines Operators und einer daraus erhaltenen Matrix sind äquivalent.

(a) (i) Welche Eigenschaften besitzt die Matrix $\mathbf{A}$, wenn sie hermitesch ist? Wie lautet die Hermitizitäts-Bedingung für einen Operator $\hat{A}$ (in Integral- und Dirac-Notation)?

(ii) Welche der folgenden Operatoren sind hermitesch? $\hat{a}$, $\hat{b}$ und $\hat{c}$ sind beliebige Operatoren. Benutzen Sie $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$.

$$1.) \hat{O} = \hat{a}\hat{a}^\dagger \quad 2.) \hat{O} = \hat{a}\hat{b}\hat{c} \quad 3.) \hat{P} = \sum_{i=0}^k |a_i\rangle \langle a_i|$$

(iii) Zeigen Sie, dass der Projektor $\hat{P}$ aus (i) auch idempotent ($\hat{P}^2 = \hat{P}$) ist. Wir nehmen die $|a_i\rangle$ als orthonormiert an:

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$$

(b) (i) Ist der Operator $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ hermitesch? Verwenden Sie zur Lösung die Integral-Notation der Hermitizitäts-Bedingung sowie partielle Integration. Weiterhin sei vorausgesetzt, dass die Funktionen $f_m(x)$ und $f_n(x)$ im Unendlichen verschwinden, d.h.:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f_m(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} f_n(x) = 0$$

(ii) Es sei $\hat{Q}$ ein hermitescher Operator. Zeigen Sie, dass $\hat{Q}^2 = \hat{Q}\hat{Q}$ ebenfalls hermitesch ist. Benutzen Sie als Hermitizitäts-Bedingung $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$.

(iii) Begründen Sie, dass $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ (1D Hamilton-Operator des freien Teilchens) hermitesch ist. Benutzen Sie ihre Erkenntnisse aus (i) und (ii) sowie die Information, dass die Multiplikation mit einer reellen Konstante nichts an der Hermitizität eines Operators ändert.

(iv) Welche Eigenschaften besitzen die Eigenwerte bzw. Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators?

(c) (i) Welche Eigenschaften besitzt die Matrix $\mathbf{U}$, wenn sie unitär ist?

(ii) Bleibt ein hermitescher Operator $\mathbf{A}$ auch nach einer unitären Transformation $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}$ hermitesch? Beweisen Sie.

(iii) $\mathbf{A}$ besitze die Eigenfunktionen $|\phi_i\rangle$ und die Eigenwerte ε_i . Zeigen Sie, dass $|\phi'_i\rangle = \mathbf{U}^\dagger |\phi_i\rangle$ die Eigenfunktionen der unitär transformierten Matrix $\mathbf{A}' = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}$ sind. Was sind die Eigenwerte von $\mathbf{A}'$?

Hinweise für (a)-(c): $(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger$ (analog für 3, 4, ... Matrizen und Operatoren)