3. Tutorium

Sonntag, 7. November 2021 21:39

1. Beispiel zum Basiswechsel

gegeben: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ auf 3-dim. Hilbertraum $\mathcal{H}$

$\{|\psi_i\rangle\}$ und $\{|\phi_i\rangle\}$ seien Orthonormalbasen

Es gelte: $\hat{A} = 4|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 2|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi_3\rangle\langle\psi_3|$

$$\hat{A}|\phi_1\rangle = 2|\phi_1\rangle + i|\phi_2\rangle + \frac{1+i}{2}|\phi_3\rangle$$
$$\hat{A}|\phi_2\rangle = -i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle + \frac{1-i}{2}|\phi_3\rangle$$

a.) Berechne die Matrix-Darstellungen von $\hat{A}$ in beiden Basen

- $\{|\psi_i\rangle\}$ direkt ablesbar $\quad \hat{A}_\psi = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

- $\{|\phi_i\rangle\}$ $\quad \hat{A}_\phi = \begin{pmatrix} \langle\phi_1|\hat{A}|\phi_1\rangle & \langle\phi_1|\hat{A}|\phi_2\rangle & \langle\phi_1|\hat{A}|\phi_3\rangle \\ \langle\phi_2|\hat{A}|\phi_1\rangle & \langle\phi_2|\hat{A}|\phi_2\rangle & \langle\phi_2|\hat{A}|\phi_3\rangle \\ \langle\phi_3|\hat{A}|\phi_1\rangle & \langle\phi_3|\hat{A}|\phi_2\rangle & \langle\phi_3|\hat{A}|\phi_3\rangle \end{pmatrix}$

Matrix-Element von $\hat{A}$

$$\langle\phi_1|\hat{A}|\phi_1\rangle = \langle\phi_1|\left(2|\phi_1\rangle + i|\phi_2\rangle + \frac{1+i}{2}|\phi_3\rangle\right) = 2 \qquad \langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$$

(mit $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1$, $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$, $\langle\phi_1|\phi_3\rangle = 0$)

analog:

$$\langle\phi_2|\hat{A}|\phi_1\rangle = i \qquad \langle\phi_1|\hat{A}|\phi_2\rangle = -i$$
$$\langle\phi_3|\hat{A}|\phi_1\rangle = \frac{1+i}{2} \qquad \langle\phi_2|\hat{A}|\phi_2\rangle = 2$$
$$\langle\phi_3|\hat{A}|\phi_2\rangle = \frac{1-i}{2}$$

$$\Rightarrow \hat{A}_\phi = \begin{pmatrix} 2 & -i & \cdot \\ i & 2 & \cdot \\ \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} & \cdot \end{pmatrix} \quad \text{zudem gilt } A_\phi^\dagger = A_\phi \quad \Rightarrow \hat{A}_\phi = \begin{pmatrix} 2 & -i & \frac{1-i}{2} \\ i & 2 & \frac{1+i}{2} \\ \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} & \cdot \end{pmatrix}$$

Wie erhalten wir das letzte Element?

- Für eine lineare Abbildung $\hat{A}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ ist die Spur unabhängig von der gewählten Basis!

$$\Rightarrow \underbrace{Tr(\hat{A}_\psi)}_{=7} = Tr(\hat{A}_\phi) = 7 \quad \text{Damit folgt } \langle\phi_3|\hat{A}|\phi_3\rangle = 7-2-2 = 3$$

$$\Rightarrow \quad \hat{A}_\phi = \begin{pmatrix} 2 & -i & \frac{1-i}{2} \\ i & 2 & \frac{1+i}{2} \\ \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} & 3 \end{pmatrix}$$

b.) Bestimme die Darstellung von $\{|\phi_i\}$ in der Basis von $\{|\psi_i\rangle\}$

- Ermittle die Basiswechselmatrix von $\{|\psi_i\rangle\} \to \{|\phi_i\rangle\}$
- Da $\{|\psi_i\rangle\}$ bereits die Einheitsbasis ist, reicht es aus, die diagonalisierende Matrix S zu finden: $\boxed{\hat{A}_\phi = S \hat{A}_\psi S^\dagger}$ $\quad S^\dagger = S^{-1}$

- Bestimmung von S:

  1.) Berechne Eigenvektoren von $\hat{A}_\phi$:

$$(\hat{A}_\phi - \lambda_i \cdot \mathbb{1}) |v_i\rangle = 0$$

Eigenwerte sind bekannt: $\lambda_1 = 4$, $\lambda_2 = 2$, $\lambda_3 = 1$

$$(\hat{A}_\phi - \mathbb{1}) = \begin{pmatrix} 1 & -i & \frac{1-i}{2} \\ i & 1 & \frac{1+i}{2} \\ \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} & 2 \end{pmatrix} \underset{\text{Zeilenumformungen}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = i x_2 \qquad \text{sei } x_2 = 1 \Rightarrow x_1 = i$$
$$x_3 = 0$$

$$\Rightarrow |v_3\rangle = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{Normierung}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{in } |\psi_i\rangle \text{ Basis})$$

analog:

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1-i}{2} \\ \frac{1+i}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_1 = 4$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{-1+i}{2} \\ -\frac{1-i}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = 2$$

2.)
$$S = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ |v_1\rangle & |v_2\rangle & |v_3\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1-i}{2} & \frac{-1+i}{2} & i \\ \frac{1+i}{2} & \frac{-1-i}{2} & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt nun: $\begin{pmatrix} |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \\ |\phi_3\rangle \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \\ |\psi_3\rangle \end{pmatrix}$ $\qquad \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \\ |\psi_3\rangle \end{pmatrix} = S^\dagger \begin{pmatrix} |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \\ |\phi_3\rangle \end{pmatrix}$

$S^\dagger$

Vergleiche: $A_\phi |v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle$

$$\Rightarrow \quad S A_\psi S^+ |v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle \quad \Big| \, S^+ \cdot$$

$$A_\psi \underbrace{(S^+|v_i\rangle)}_{\text{Eigenvektoren von } A_\psi} = \lambda_i \, (S^+|v_i\rangle)$$

$$\Rightarrow \quad |\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1-i}{2} |\psi_1\rangle + \frac{-1+i}{2} |\psi_2\rangle + i|\psi_3\rangle \right)$$

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1+i}{2} |\psi_1\rangle + \frac{-1-i}{2} |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle \right)$$

$$|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \right)$$

2. Postulate der Quantenmechanik

1) Zustände werden beschrieben durch Vektoren im Hilbertraum $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

klassische Teilchenbahn $\Rightarrow$ Zustand: Wellenfunktion $\psi(\vec{r},t)$

$\vec{r}(t): \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$ $\qquad$ $\psi: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

2.) Messbare, physikalische Größen (Observablen) werden durch lineare hermitesche Operatoren beschrieben

$$\hat{A}: \mathcal{H} \to \mathcal{H} \qquad \hat{A}^+ = \hat{A}$$

3.) Die möglichen Messwerte einer Observablen sind die zu $\hat{A}$ korrespondierenden Eigenwerte

$$\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

$\uparrow$ Messwert, Spektrum

· Wahrscheinlichkeit: $W(\alpha_1) = \dfrac{\langle\psi|P_{\alpha_1}|\psi\rangle}{\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{=1}}$ $\qquad$ P_{α_1} - Projektor auf Unterraum

$$= \langle\psi|\underbrace{\alpha_1\rangle\langle\alpha_i}_{P_{\alpha_i}}|\psi\rangle = |\underbrace{\langle\alpha_i|\psi\rangle}_{}|^2$$

Amplitude der Wellenfunktion für Wert α_i

Vgl. $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

4.) Ergibt eine Messung von $\hat{A}$ den Eigenwert α, so ändert sich der Zustand
$\Rightarrow$ die Wellenfunktion kollabiert.

$$|\psi\rangle \Rightarrow \frac{P_{\alpha_i}|\psi\rangle}{\| P_{\alpha_i}|\psi\rangle \|}$$ Projektion auf den Eigenzustand

5) Schrödinger-Gleichung: Die zeitliche Entwicklung des Systems ist gegeben durch:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)\, |\psi(t)\rangle}$$

- lineare, partielle DGL

3. Die Schrödingergleichung

- für ein nichtrelativistisches Teilchen lautet der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \underset{\text{Korrespondenz}}{\longleftrightarrow} \quad H = \frac{p^2}{2m} \quad \text{(klassische Mechanik)}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi\rangle \qquad \Big| \langle x|$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \frac{1}{2m} \underbrace{\langle x| \hat{p}^2 |\psi\rangle}_{\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \langle x|\psi\rangle}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(x,t)}$$

Herleitung der Ortsraumdarstellung der SGL:

- nach De Broglie ist die Wellenfunktion eines freien Teilchens eine ebene Welle

$$\psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)} \qquad A \in \mathbb{C}, \quad k,\omega \in \mathbb{R}$$

- zudem gelten folgende Relationen für Energie und Impuls

$$\boxed{E = \hbar\omega \qquad p = \hbar k} \quad \text{(Materiewellen)}$$

$$\Rightarrow E = \frac{m}{2} v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \quad \Rightarrow \quad \boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$ Dispersionsrelation nicht-relativistischer Teilchen

- Anforderungen an die Schrödingergleichung
  - → Differentialgleichung
  - → Linear
  - → Hat die Lösung $\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)}$ mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\uparrow \quad \partial/\partial t \qquad \uparrow \quad \partial^2/\partial x^2$$

Ableiten: $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -i\omega\,\Psi(x,t)$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -k^2\,\Psi(x,t)$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Big|\, \Psi(x,t)$$

$$\hbar\omega\,\Psi(x,t) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2\,\Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$$