Prof. Dr. Stefan Hofmann Wintersemester 2018/19

Übungen zur Quantenmechanik (T2)

Übungsblatt 12, Besprechung vom 17.1 – 21.01

Aufgabe 1 – „Radialer" Impulsoperator

Betrachten Sie im Folgenden den Raum der quadrat-integrablen Funktionen auf der reellen Halblinie,

$$\mathscr{H} = L^2([0,\infty)).$$

Wir definieren den „radialen" Impulsoperator $\mathscr{P} = -\mathrm{i}\hbar\partial_x$ mit Definitionsmenge

$$\mathscr{D}(\mathscr{P}) = \{\phi \in \mathscr{H} : \mathscr{P}\phi \in \mathscr{H} \wedge \phi(0) = 0\}.$$

Die Definitionsmenge des adjungierten Operators $\mathscr{P}^\dagger$ ist gegeben durch

$$\mathscr{D}(\mathscr{P}^\dagger) = \{\phi \in \mathscr{H} : \mathscr{P}^\dagger\phi \in \mathscr{H}\},$$

ohne Randbedingung.

(i) Zeigen Sie, dass $\mathscr{P}$ auf seiner Definitionsmenge hermitesch ist.

(ii) Zeigen Sie dass es in $\mathscr{D}(\mathscr{P}^\dagger)$ normierbare Lösungen von

$$\mathscr{P}^\dagger\phi = i\phi$$

gibt, aber keine Lösungen von

$$\mathscr{P}^\dagger\phi = -i\phi$$

(mathematisch bedeutet dies, dass die *Defektindizes* unterschiedlich sind). Dies bedeutet, dass keine selbst-adjungierte Erweiterung von $\mathscr{P}$ auf $[0,\infty)$ existiert. Interpretieren Sie dieses Ergebnis und überlegen Sie sich, ob der Begriff des Impulses für dieses System sinnvoll ist.

Solution

(i) We compute first for $f, g \in C_0^\infty([0,\infty))$ with $f(0) = g(0) = 0$,

$$\begin{aligned}
\langle f \mid \mathscr{P}\, g\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\, f^*(x)(-\mathrm{i}\hbar\partial_x g(x)) \\
&= -\mathrm{i}\hbar f^*(x)g(x)\big|_0^\infty + \int_0^\infty \mathrm{d}x\,(-\mathrm{i}\hbar\partial_x f(x))^* g(x) \\
&= \langle \mathscr{P}\, f \mid g\rangle\,,
\end{aligned}$$

and by density of C_0^∞ we can extend this to all of $\mathscr{D}(\mathscr{P})$.

(ii) The function $f(x) = e^{-\frac{kx}{\hbar}}$ satisfies

$$\mathscr{P} f = -\mathrm{i}\hbar\partial_x f(x) = \mathrm{i}k f(x)$$

and is normalisable, since

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, e^{-\frac{kx}{\hbar}} = \frac{\hbar}{k}.$$

Note that there is no normalisable solution with eigenvalue $-\mathrm{i}k$, since this function would diverge as $x \to \infty$. This means that the (von Neumann) deficiency indices are given by $n_+ = 1$ and $n_- = 0$, so there exists no self-adjoint extension. This is an important result. On the real half-line, this definition of momentum does not lead to an observable, since there is no corresponding self-adjoint operator. This does not mean, however, that radial momentum is ill-defined, as we have to be careful about the actual Hilbert space. We will address the proper radial momentum in a later exercise.

Aufgabe 2 – Dynamik eines Zwei-Zustandssystems

Betrachten Sie ein Zwei-Zustandssystem mit der Darstellung der Orthonormalbasis $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ als

$$|1\rangle \doteq (1,0)^T, \quad |2\rangle \doteq (0,1)^T.$$

Der Hamiltonoperator ist in dieser Basis gegeben als

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon & g \\ g & \varepsilon \end{pmatrix},$$

wobei $\varepsilon, g \in \mathbb{R}$.

(i) Welche Werte können bei einer Messung der Energie beobachtet werden, und in welchem Zustand befindet sich das System jeweils nach dieser Messung?

(ii) Lösen Sie die Schrödinger-Gleichung für die Anfangsbedingung $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ und geben Sie $|\Psi(t)\rangle$ explizit an.

(iii) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit, das System bei einer Messung im Zustand $|2\rangle$ zu finden, als Funktion von t und überprüfen Sie explizit, dass die Norm von $|\Psi\rangle$ erhalten bleibt.

Solution

(i) The eigenvalues are found to be $E_\pm = \varepsilon \pm |g|$.
The corresponding eigenstates are given by $|E_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^T$ and $|E_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)^T$.

(ii) The Schrödinger equation is given by

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle .$$

For eigenstates, this means

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t |E\rangle = H|E\rangle = E|E\rangle ,$$

so they evolve as

$$|E(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t} |E(t=0)\rangle .$$

For

$$|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|E_+\rangle + |E_-\rangle\big),$$

we find

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t}|E_+\rangle + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}}|E_-\rangle\right).$$

(iii) We need to compute the amplitude $\langle 2|\psi(t)\rangle$, which is found to be

$$\begin{aligned}\langle 2|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\langle E_+| - \langle E_-|\big)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t}|E_+\rangle + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}}|E_-\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}t}\big)\end{aligned}$$

and the probability is given by the absolute value squared,

$$P(2) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{(E_+ - E_-)}{\hbar}t\right)\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{|2g|}{\hbar}t\right)\right).$$

The norm of $|\psi(t)\rangle$ is found to be

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \Big(\langle E_+|e^{\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t} + \langle E_-|e^{\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}t}\Big)\Big(e^{-\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t}|E_+\rangle + e^{-\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}t}|E_-\rangle\Big) = 1.$$

Aufgabe 3 – Freies Teilchen

Betrachten Sie das Gaußsche Wellenpaket von Blatt 11, beschrieben durch den Zustand $|\,\alpha\rangle$ mit Ortsdarstellung

$$\langle x\,|\,\alpha\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \mathrm{i}\frac{kx}{\hbar}\right)$$

(i) Berechnen Sie $\alpha(x,t)$.

(ii) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte als Funktion von t und interpretieren Sie Ihre Lösung anhand von Skizzen.

Solution

(i) Warning: In 11.2 we used the wrong convention for Fourier-transformation. The correct result is

$$\alpha(p) = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p-k)^2},$$

with momentum k instead of $-k$ (hence the change of sign in the exponent).
The Hamiltonian of a free particle is given by

$$H = \frac{\mathscr{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

The (generalised) eigenfunctions are the plane-wave solutions $e_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}x}$ with energy $E_p = \frac{p^2}{2m}$. We know from the last sheet that the Fourier transform of the Gaussian is given by

$$\alpha(p) = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p-k)^2}.$$

We find the expansion in terms of $e_p(x)$ as

$$\alpha(x) = \int \mathrm{d}p\, e_p \alpha(p),$$

and thus the time-evolution as

$$\begin{aligned}\alpha(x,t) &= \int \mathrm{d}p\, e_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_p}{\hbar}t}\alpha(p)\\ &= \int \mathrm{d}p \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m\hbar}t} \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p+k)^2} e^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}\end{aligned}$$

After completing the square and integrating the Gaussian, we obtain

$$\begin{aligned}\alpha(x,t) &= \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{2\pi}\left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{\hbar m}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{(\frac{\sigma^2 k}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}x}{\hbar})^2}{2(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{\hbar m})} - \frac{\sigma^2 k^2}{2\hbar^2}\right)\\ &= \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\sigma^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{(\frac{\sigma^2 k}{\hbar} + \mathrm{i}x)^2}{2(\sigma^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m})} - \frac{\sigma^2 k^2}{2\hbar^2}\right)\end{aligned}$$

To get a better understanding of what is going on, it is useful to rewrite this in terms of a moving wave solution, i.e. in terms of the argument $x - vt$. From the free equation we see that $v = \frac{k}{m}$, and we rewrite the exponent

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{i}x + \frac{\sigma^2 k}{\hbar}\right)^2 - 2\left(\sigma^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m}\right)\frac{\sigma^2 k^2}{2\hbar^2} &= -x^2 + 2\sigma^2\mathrm{i}\frac{kx}{\hbar} + \frac{\sigma^4 k^2}{\hbar^2} - \frac{\sigma^4 k^2}{\hbar^2} - 2\sigma^2\mathrm{i}\frac{k^2}{2m\hbar}t\\ &= -x^2 + 2\sigma^2\left(\mathrm{i}\frac{k}{\hbar}x - \mathrm{i}\frac{E_k}{\hbar}t\right)\\ &= -\left(x - \frac{k}{m}t\right)^2 - 2\frac{t}{m}kx + 2\frac{t}{m}\frac{k^2}{2m}t + 2\sigma^2\left(\mathrm{i}\frac{k}{\hbar}x - \mathrm{i}\frac{E_k}{\hbar}t\right)\\ &= -\left(x - \frac{k}{m}t\right)^2 + 2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{m}\right)\left(\mathrm{i}\frac{k}{\hbar}x - \mathrm{i}\frac{E_k}{\hbar}t\right)\end{aligned}$$

Using this, we find

$$\alpha(x,t) = \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\sigma^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\mathrm{i}\Big(\frac{k}{\hbar}x - \frac{E_k}{\hbar}t\Big)\right) \exp\left(-\frac{(x-\frac{k}{m}t)^2}{2(\sigma^2+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{m})}\right).$$

We see that the phase corresponds to a wave-packet moving in the right direction.

(ii) To interpret the second exponential, consider the probability density. We find

$$|\alpha(x,t)|^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\sigma^2(x-\frac{k}{m}t)^2}{(\sigma^4+\frac{\hbar^2t^2}{m^2})}\right),$$

where we used $|\exp(A)|^2 = \exp(2\mathrm{Re}(A))$. We see that this corresponds to the Gaussian with shifted position $x - vt$, i.e. right-moving, but as t increases, the Gaussian becomes wider.