UNIVERSITÄT LEIPZIG
INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Quantenmechanik

Übungsblatt 4

Musterlösungen

10 Aufgabe

10.1 Präliminarien

Bei der Überlegungen über Kontinuum-Eigenfunktionen sind ein paar Eigenschaften der wichtigsten Distributionen nötig. Wir fassen sie hier zusammen. Die Diracsche-Deltadistribution und die Cauchyscher Hauptwert lassen sich durch die folgende Grenzen darstellen:

$$\pi\delta(x) = \lim_{\epsilon} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + x^2} \tag{1}$$

$$P(1/x) = \lim_{\epsilon} \frac{x}{\epsilon^2 + x^2} \tag{2}$$

wobei die Grenzen im schwachen Sinne zu verstehen sind, z.B.

$$\pi f(0) = (\pi\delta, f) = \int dx\, \pi\, \delta(x) f(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \int dx\, \pi\, \frac{\epsilon f(x)}{\epsilon^2 + x^2} \tag{3}$$

für alle glatte, genügend schnell abfallende Funktionen f. Mit Hilfe dieser Darstellungen berechnen wir die Fourier-Transformation der Heavisidescher Theta-Distribution

$$(\mathcal{F}\,\Theta)(k) = \int_0^\infty dx\, e^{ikx} \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dx\, e^{ikx} e^{-\epsilon x} = \frac{1}{\epsilon - ik} = \pi\delta(k) + iP(1/k). \tag{4}$$

Schliesslich weisen wir darauf hin, dass

$$x \cdot P(1/x) = 1, \tag{5}$$

und dass $P(1/x)$ darf durch $1/x$ ersetzt werden, solange $x \neq 0$, d.h. solange die Testfunktionen am $x = 0$ verschwinden, $f(0) = 0$.

10.2 Orthonormalität

Bevor wir die Vollständigkeit diskutieren, muss ein System der normierten und zueinander orthogonalen Funktionen bestimmt werden. In der Aufgabe 6 haben wir die Unstätigkeitsbedingung:

$$\psi'_+ - \psi'_- = -2mg\,\psi(0) \tag{6}$$

($\hbar = 1$) bewiesen. Mit $\alpha = mg$ folgt, dass die Eigenfunktion des (einzigen) Bindungszustands ist

$$\psi_0 = \sqrt{\alpha}\, e^{-\alpha|x|}. \tag{7}$$

In der Kontinuum haben wir die folgende Lösung bestimmt:

$$\psi_k^+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R\, e^{-ikx} & x < 0 \\ T e^{ikx} & x > 0, \end{cases} \tag{8}$$

mit k zunächst in $\mathbb{R}$, und

$$T(k) = \frac{k}{k - i\alpha} \qquad R(k) = \frac{i\alpha}{k - i\alpha}. \tag{9}$$

Die Lösung ψ_k^+ ist noch nicht normiert, und es ist nicht klar, ob $\psi_k^+ \perp \psi_p^+$ für $p = -k$ (die Eigenfunktionen zu verschiedenen Energie-Eigenwerten sind automatisch orthogonal; hier $E = k^2$). Wir berechnen (ψ_k^+, ψ_p^+):

$$(\psi_k^+, \psi_p^+) = \ldots = \int_0^\infty \left[e^{i(k-p)x} + \overline{R}_k e^{-i(k+p)x} + R_p e^{i(k+p)x} + \overline{T}_k T_p e^{i(p-k)x}\right]. \tag{10}$$

Nun: solange $|p| \neq |k|$ darf $\int_0^\infty e^{i(k\pm p)} = \frac{i}{k\pm p}$ verwendet werden. In diesem Fall findet man sofort, dass das Integral verschwindet. Im allgemeinen Fall gilt:

$$(\psi_k^+, \psi_p^+) = (\overline{R}_k + R_p)\pi\delta(k+p) + 2\pi\delta(k-p), \tag{11}$$

wobei $(p \pm k)P(1/(p \pm k)) = 1$ ausgenutzt wurde. Wir sehen deutlich, dass ψ_{-k}^+ nicht orthogonal zu ψ_k^+ ist, denn

$$\overline{R}_k + R_{-k} = \frac{-2i\alpha}{k + i\alpha} \neq 0. \tag{12}$$

Wir müssen also das System der Eigenfunktionen modifizieren. Dazu schränken wir k zu den positiven Werten,

$$k > 0 \tag{13}$$

und definieren die zweite zu $E = k^2$ gehörige Eigenfunktion durch

$$\psi_k^-(x) = \psi_k^+(-x) = \begin{cases} T e^{-ikx} & x < 0 \\ e^{-ikx} + R e^{ikx} & x > 0. \end{cases} \tag{14}$$

Mit dieser Definition folgt es wider, dass $(\psi_k^-, \psi_p^-) = 0$ solange $p \neq k$, und

$$(\psi_k^+, \psi_p^-) = (T_p + \overline{T}_k)\delta(p+k). \tag{15}$$

Hier aber sind $p > 0$ und $k > 0$, und deshalb $(\psi_k^+, \psi_p^-) = 0$. Wir schliessen, dass die Funktionen ψ_k^+, ψ_k^-, mit $k > 0$, multipliziert mit $1/\sqrt{2\pi}$ zusammen mit ψ_0 ein Orthonormalsystem formen.

10.3 Vollständigkeit

Zu verifizieren ist

$$\int_0^\infty dk \left[\overline{\psi_k^+(x)}\psi_k^+(y) + \overline{\psi_k^-(x)}\psi_k^-(y)\right] + \overline{\psi_0(x)}\psi_0(y) = \delta(x-y). \tag{16}$$

Wir betrachten das (Kontinuum-)Integral und nehmen an, dass $x < 0$, $y < 0$; dann gilt:

$$\int dk \ldots = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \left[e^{ik(y-x)} + \overline{R}e^{ik(x+y)} + Re^{-ik(x+y)} + (|R|^2 + |T|^2)\, e^{ik(x-y)}\right] \tag{17}$$

In zwei von den Summanden führen wir die Transformation $k \to -k$ durch, und wegen $|R|^2 + |T|^2 = 1$, und $\overline{R(-k)} = R(k)$ erhalten

$$\int dk \ldots = \delta(x-y) + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \frac{i\alpha}{k - i\alpha}\, e^{-ik(x+y)}. \tag{18}$$

Das letzte Integral lässt sich sofort mit Hilfe der Residuensatz berechnen, in dem die Integrationskontur von oben abgeschlossen wird (wegen $x + y < 0$). Der einzige Beitrag kommt aus dem Pol bei $k = i\alpha$. Wir erhalten

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \frac{i\alpha}{k - i\alpha}\, e^{-ik(x+y)} = -\alpha e^{x+y} = -\overline{\psi}_0(x)\psi_0(y). \tag{19}$$

Somit ist die Vollständigkeit (zunächst für $x < 0, y < 0$) bewiesen. Eine analoge Überlegung gilt für $x > 0, y > 0$. Im Falle $x > 0$, $y < 0$ gilt wegen $\overline{T}(-k) = T(k)$, $T\overline{R} + \overline{T}R = 0$ und $\delta(x-y) = 0$:

$$\int dk \ldots = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty e^{ik(x-y)} \frac{k}{k + i\alpha} = -\alpha e^{-\alpha x}\, e^{\alpha y}. \tag{20}$$

Dies zeigt die Vollständigkeit des früher bestimmten Orthonormalsystems $\{\psi_k^+, \psi_k^-, \psi_0\}$ der Energieeigenfunktionen.

11 Aufgabe

Zur Selbstadjungiertheit: es reicht die Hermitizität der Matrizen zu verifizieren, $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$. Die Eigenwerte der beiden Matrizen sind $+1 = \lambda_1 = \ell_1$ und $-1 = \lambda_2 = \ell_2$, und die entsprechende Eigenvektoren sind

$$e_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \quad e_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}, \quad f_1 = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \quad f_2 = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}. \tag{21}$$

Man findet leicht die gesuchte Matrix U:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -i\\ 1 & i\end{pmatrix}, \tag{22}$$

und verifiziert die Unitarität $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I}$.

Die allgemeine Unschärferelation lautet

$$\Delta_\psi A \cdot \Delta_\psi B \geqslant \frac{1}{2} \, |\langle [A,B] \rangle_\psi|, \tag{23}$$

wobei $\Delta_\psi A = \sqrt{\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2}$ und $\langle . \rangle_\psi$ stehen für die Erwartungswerte bzgl. ψ. Im unseren Fall gilt

$$[\sigma_2, \sigma_3] = 2\sigma_1 = 2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{24}$$

also

$$\Delta_\psi \sigma_2 \cdot \Delta_\psi \sigma_3 \geqslant |\langle \sigma_1 \rangle_\psi|, \tag{25}$$

Der Eigenzuständ e_1 ist ein Eigenzustand von σ_2, und daher verschwindet $\Delta_{e_1}(\sigma_2)$. Die Unschärferelation ist erfüllt nur weil gleichzeitig $\langle \sigma_1 \rangle_{e_1} = 0$. Eine analoge Situation tritt bei f_1 auf. Für allgemeine Vektoren $\psi = (x,y)^T$, mit $x, y \in \mathbb{C}$ und $|x|^2 + |y|^2 = 1$ gilt

$$\sqrt{1 + (x\overline{y} - \overline{x}y)^2} \cdot \sqrt{1 - (|x|^2 - |y|^2)^2} \geqslant |\overline{x}y + y\overline{x}|. \tag{26}$$

12 Aufgabe

Wegen der Ergebnisse der Aufgabe 5 es ist klar, dass H mit den angegebenen Periodizitätbedingungen selbstadjungiert ist. Wir finden die Eigenfunktionen

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{ipx}, \tag{27}$$

mit

$$p = k - \alpha/2\pi, \qquad k \in \mathbb{Z}. \tag{28}$$

Das Spektrum besteht aus diskreten Eigenwerten

$$E_p = p^2 = (k - \alpha/2\pi)^2, \qquad k \in \mathbb{Z}, \tag{29}$$

und hängt (offensichtlich) wesentlich von α ab. Die Eigenfunktionen ψ_p lassen sich auch in der Form

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{ikx} \, e^{-i\alpha x/2\pi} \tag{30}$$

schreiben, aus der sofort klar ist, dass die Orthogonalität und Vollständigkeit durch α unbeeinflusst bleibt. Speziell gilt:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \overline{\psi_k(x)} \psi_k(y) = \frac{1}{2\pi} \, e^{i\alpha(x-y)/2\pi} \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{ik(y-z)} = \delta(x-y). \tag{31}$$