Theoretische Physik: Quantenmechanik
Übungsblatt 9

Vorlesung: Otfried Gühne   Übungen: Andreas Ketterer, Christina Ritz, Timo Simnacher
Vorlesung: Di. 10-12 (B030) und Fr. 14-16 (D115)
Übungen: Di. 8:30-10:00 (B030) und Di. 12:30-14:00 (B030)

Zu bearbeiten bis 15.12.2017

1. Endlicher Potentialtopf (gerade Lösung) (2+2+2+2 Punkte)

Betrachten Sie das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| > a, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

und lösen die zugehörige zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung im gebundenen Fall, d.h. für Zustände mit Energie $E < V_0$. Verfahren Sie wie folgt:

(i) Benutzen Sie den Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{bx} & x < -a \\ B\cos(kx) & |x| \leq a \\ Ae^{-bx} & x > a. \end{cases} \tag{1}$$

um aus der zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung die Koeffizienten b and k zu bestimmen. Hinweis: Aus Symmetriegründen kann die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das angegebene Potential durch gerade oder ungerade Funktionen gegeben sein. Wir beschränken uns hier auf die gerade Lösung.

(ii) Welche Randbedingungen müssen gelten damit ψ und ψ' stetige Funktionen sind, und welche Bedingungen folgen daraus für die Koeffizienten A und B?

(iii) Folgern Sie aus den Randbedingungen, dass $b = k\tan(ka)$. Zeigen Sie weiter, dass $ba = \sqrt{z_0^2 - z^2}$, wobei $z_0 = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}a$ und $z = ka$, und folgern Sie daraus folgende Gleichung:

$$\sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1} = \tan(z). \tag{2}$$

(iv) Gleichung (2) kann nicht analytisch gelöst werden. Bestimmen Sie stattdessen eine grafische Lösung von (2), mit $z_0 = \frac{5\pi}{4}$, und schließen daraus, dass es genau zwei (gebundene und gerade) Energieeigenwerte gibt.

2. Dichtematrizen (1+2+3+2+2 Punkte)

Aus der Volesung wissen Sie, dass ein Quantenzustand durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ gegeben ist. Im folgenden nehmen wir an, dass sich ein Quantensystem mit der Wahrscheinlichkeit p_α im Zustand $|\psi_\alpha\rangle$ befindet, wobei $\sum_\alpha p_\alpha = 1$, und nennen die Menge aller Tupel $(p_\alpha, |\psi_\alpha\rangle)$ ein Ensemble von Zuständen. Wenn ein Quantensystem durch ein Ensemble beschrieben wird, sagt man auch es befindet sich in einem gemischten Zustand. Andererseits, falls $p_\alpha = 1$, für genau ein α, nennt man den Zustand rein. Ein Ensemble (oder gemischter Zustand) kann analog durch einen

Dichteoperator (oder Dichtematrix) $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, hierbei ist $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ die Menge aller Operatoren auf $\mathcal{H}$, dargestellt werden. Der Dichteoperator des Ensembles $\{(p_\alpha, |\psi_\alpha\rangle)\}$ ist wie folgt definiert:

$$\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|. \tag{3}$$

wobei durch $\langle\psi_\alpha|$ die zu $|\psi_\alpha\rangle$ zugehörigen Bra-Vektoren bezeichnet werden. Erinnern Sie sich, dass der zu $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ zugehörige Bra-Vektor durch $\langle\psi| = \sum_n c_n^*\langle n|$ gegeben ist.

(i) Zeigen Sie, dass $\mathrm{tr}[\rho] = 1$, wobei $\mathrm{tr}[\rho]$ die Spur des Operators ρ bezeichnet.

(ii) Der Erwartungswert eines Operators O bezüglich des Ensembles $\{(p_\alpha, |\psi_\alpha\rangle)\}$ ist durch $\langle O\rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle O\rangle_{|\psi_\alpha\rangle}$ gegeben. Zeigen Sie, dass $\langle O\rangle = \mathrm{tr}[O\rho]$.

(iii) Zeigen Sie, dass $\langle\rho\rangle \leq 1$, und Gleichheit gilt falls ρ ein reiner Zustand ist. Zeigen Sie weiter, dass in einem d-dimensionalen Hilbertraum $\langle\rho\rangle \geq d$, und Gleichheit gilt wenn $\rho = \frac{1}{d}\mathbb{1}$. Die größe $\langle\rho\rangle$ wird auch Purity des Zustands ρ genannt. Tipp: Beachten Sie, dass ρ hermitesch ist und damit auch diagonalisierbar.

(iv) Zeigen Sie, dass die Zeitentwicklung des Dichteoperators ρ durch die von-Neumann-Gleichung gegeben ist:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)]. \tag{4}$$

(v) Folgendes Ensemble eines Qubits sei gegeben $\{(1/4, |0\rangle), (1/2, |+\rangle), (1/4, |-i\rangle)\}$, mit $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ und $|-i\rangle = (|0\rangle - i|1\rangle)/\sqrt{2}$. Berechnen Sie den zugehörigen Dichteoperator ρ. Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von ρ. Stellen Sie ρ bezüglich seiner Eigenwerte und Eigenvektoren in Bra-Ket-Schreibweise dar.

Was können Sie über die Eindeutigkeit der Darstellung (3) sagen?

3. Drehimpulsoperator und Kugelflächenfunktionen (1+1+2+2 Punkte)

Betrachten Sie die Drehimpulsoperatoren $L_i = \frac{1}{\hbar}\epsilon_{ijk}Q_jP_k$, für $i = 1, 2, 3$, sowie die damit definierten Operatoren $L_\pm = L_1 \pm iL_2$. Die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} erfüllen dann die Gleichung:

$$L_\pm Y_{lm} = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\,Y_{l(m\pm1)}, \quad \text{und} \quad L_3 Y_{lm} = mY_{lm}, \tag{5}$$

für alle $l \in \mathbb{N}$ und $m = -l, \ldots, l$. Im folgenden betrachten wir die Einschränkungen der Operatoren $L_\pm$ un L_3 auf den durch die Vektoren $\{Y_{1m}\}_{m=-1,0,1}$ aufgespannten Raum.

(i) Bestimmen Sie die darstellenden Matrizen von $L_\pm$ und L_3 bezüglich der Basis $\{Y_{1m}\}_{m=-1,0,1}$.

(ii) Bestimmen Sie mit Hilfe der ermittelten Matrizen auch die entsprechenden Matrixdarstellungen der Operatoren $L_1,\ L_2$ und $\vec{L}^2$.

(iii) Verifizieren Sie die Kommutatorrelationen $[L_3, L_\pm] = \pm L_\pm$ und $[L_i, L_j] = iL_k$, für $i = 3,\ j = 1$ und $k = 2$ (gilt insbesondere für alle geraden Permutationen $\{ijk\}$ von $\{123\}$).

(iv) Bestimmen Sie mit Hilfe der ermittelten Matrizen die Erwartungswerte $\langle L_1\rangle$, $\langle L_2\rangle$, $\langle L_3\rangle$ und $\langle\vec{L}^2\rangle$, sowie die Varianzen $(\Delta L_1)^2$, $(\Delta L_2)^2$, $(\Delta L_3)^2$ und $(\Delta\vec{L}^2)^2$, im Zustand Y_{11}.