

## 1 Zeitentwicklung für ein Zweiniveausystem (5pt)

Wir betrachten das mittlerweile gut bekannte Zweiniveausystem, beschrieben durch den Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ . In dieser Aufgabe werden wir die zeitabhängige Schrödingergleichung lösen, um zu berechnen, wie sich der Zustand des Systems als Funktion der Zeit verändert.

Die Dynamik eines Quantensystems ist durch den Hamiltonoperator bestimmt. Hier betrachten wir

$$H = \omega \sigma_y, \quad (1.1)$$

wobei  $\omega \in \mathbb{R}$  und  $\sigma_y$  die übliche Pauli-Y-Matrix ist.

- (a) Löse die zeitabhängige Schrödingergleichung und schreibe den zeitentwickelten Zustand des Systems damit in der Form

$$|\psi(t)\rangle = a_0(t) |0\rangle + a_1(t) |1\rangle. \quad (1.2)$$

Nutze als Anfangsbedingung, dass der Zustand zum Zeitpunkt  $t = 0$  durch  $|\psi_0\rangle = |0\rangle$  gegeben ist. Die Zustände  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  sind wie gewohnt die Eigenzustände von  $\sigma_z$ .

*Tipp:* Die Schrödingergleichung lässt sich explizit als System von zwei Differentialgleichungen für  $a_0$  und  $a_1$  lösen. Ihr könnt jedoch auch die Inhalte der Vorlesung und Übungsblatt 2 verwenden. **[2pt]**

Die zeitabhängige Schrödingergleichung ist

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H |\psi(t)\rangle \quad (1.3)$$

Die Lösung für den Fall, dass  $H$  zeitunabhängig ist, ist

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (1.4)$$

Aus Übungsblatt 2, wissen wir, dass

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\omega t/\hbar} \sigma_y = \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) 1 - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \quad (1.5)$$

Für  $|\psi_0\rangle = |\psi(0)\rangle = |0\rangle$  haben wir somit

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= e^{-iHt/\hbar} |0\rangle \\ &= \left( \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) 1 - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \right) |0\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) |0\rangle - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y |0\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) |0\rangle - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) |0\rangle + \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) |1\rangle \end{aligned} \quad (1.6)$$

wo wir verwendet haben, dass  $\sigma_y |0\rangle = i |1\rangle$  und  $\sigma_y |1\rangle = -i |0\rangle$ . Somit haben wir

$$|\psi(t)\rangle = a_0(t) |0\rangle + a_1(t) |1\rangle \quad (1.7)$$

mit

$$a_0(t) = \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right), \quad a_1(t) = \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \quad (1.8)$$

- (b) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von  $\sigma_z$  zum Zeitpunkt  $t$  das Messergebnis  $-1$  zu erhalten? In welchem Zustand befindet sich das System unmittelbar nach der Messung? **[1pt]**

Ein Messung von  $\sigma_z$  mit Messergebnis von  $-1$  im Zustand  $|\psi(t)\rangle$  entspricht einem Kollaps zu  $|1\rangle$ . Daher haben wir eine Wahrscheinlichkeit

$$|\langle\psi(t)|1\rangle|^2 = |a_1(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \quad (1.9)$$

- (c) Berechne den Erwartungswert  $\langle\sigma_z\rangle_{\psi(t)} = \langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle$ . **[1pt]**

$$\begin{aligned} \langle\sigma_z\rangle_{\psi(t)} &= \langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = (a_0^*(t) \langle 0| + a_1^*(t) \langle 1|) \sigma_z (a_0(t) |0\rangle + a_1(t) |1\rangle) \\ &= (a_0^*(t) \langle 0| + a_1^*(t) \langle 1|) (a_0(t) |0\rangle - a_1(t) |1\rangle) \\ &= |a_0(t)|^2 - |a_1(t)|^2 \\ &= \cos^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) - \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \\ &= \cos\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

- (d) In der Vorlesung wurde auch das Heisenberg-Bild eingeführt: In diesem Bild sind es nicht die Zustände, die sich in der Zeit entwickeln, sondern die Observablen. Dabei ist die Zeitentwicklung einer Observablen  $A$  gegeben durch  $A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$ , mit dem Zeitentwicklungsoperator  $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$ .

1. Berechne die zeitentwickelte Observable  $\sigma_z(t) = e^{iHt/\hbar} \sigma_z e^{-iHt/\hbar}$ . **[0.5pt]**

$$\begin{aligned}
\sigma_z(t) &= e^{iHt/\hbar} \sigma_z e^{-iHt/\hbar} \\
&= \left( \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) 1 + i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \right) \sigma_z \left( \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) 1 - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \right) \\
&= \left( \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) 1 + i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \right) \left( \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - i \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z \sigma_y \right) \\
&= \cos^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - i \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) (\sigma_z \sigma_y - \sigma_y \sigma_z) + \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_y \sigma_z \sigma_y \quad (1.11) \\
&= \cos^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - i \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) [\sigma_z, \sigma_y] - \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z \\
&= \cos^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - i \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) (-2i\sigma_x) - \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z \\
&= \cos\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - \sin\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \sigma_x
\end{aligned}$$

2. Berechne den Erwartungswert  $\langle \sigma_z(t) \rangle_{\psi_0} = \langle \psi_0 | \sigma_z(t) | \psi_0 \rangle$  und vergleiche das Ergebnis mit (c). **[0.5pt]**

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_z(t) \rangle_{\psi_0} &= \langle \psi_0 | \sigma_z(t) | \psi_0 \rangle \\
&= \langle 0 | \sigma_z(t) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \left( \cos\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \sigma_z - \sin\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \sigma_x \right) | 0 \rangle \quad (1.12) \\
&= \cos\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \langle 0 | \sigma_z | 0 \rangle - \sin\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right) \langle 0 | \sigma_x | 0 \rangle \\
&= \cos\left(\frac{2\omega t}{\hbar}\right)
\end{aligned}$$

Die beiden Resultate sind ident.

## 2 Teilchen im Potentialtopf (5pt)

Betrachte einen ein-dimensionalen,  $\infty$ -tiefen Potentialtopf der Breite  $a$ , dargestellt als das Intervall  $0 \leq x \leq a$ . Der Hamiltonoperator  $H$  wirkt auf  $L^2([0, a])$  zwischen 0 und  $x$  als:

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi, \quad (2.1)$$

und 0 außerhalb des Intervalls.

- (a) Finde die Energieeigenzustände und zugehörigen Energieeigenwerte des Hamiltonoperators eines Potentialtopfs der Breite  $a$ . **[2pt]**.

Nehme zunächst an, dass  $H$  überall gleich  $H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi$  auf Zustände  $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$  wirkt. Die Lösung  $\Psi_k(x) = e^{ikx}$  erfüllt zwar:

$$H\Psi_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad (2.2)$$

aber die Funktionen  $e^{ikx}$  können nicht normiert werden.

Die Bedingung, dass  $V$  unendlich groß wird außerhalb von  $[0, a]$  impliziert, dass nun Randbedingungen gelten. Die Randbedingung ist, dass  $\Psi = 0$  ist außerhalb von  $[0, a]$ , dies ist der einzige Weg die Schrödingergleichung zu erfüllen. Jetzt folgt aus:

$$\Psi_k(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx}. \quad (2.3)$$

Aus der *Stetigkeit* der Wellenfunktion folgt  $\Psi_k(0) = \Psi_k(a) = 0$ . Dann gilt:

$$A + B = 0 \quad (2.4)$$

und:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0. \quad (2.5)$$

Daraus folgt  $A = -B$  was:

$$A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = A(2i) \sin(kx) \cong \tilde{A} \sin(kx). \quad (2.6)$$

Aus der zweiten Randbedingung für  $x = a$ ,  $\sin(ka) = 0$ , folgt  $k = \frac{n\pi}{a}$ . Also:

$$\Psi_n = \tilde{A} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (2.7)$$

Um  $\tilde{A}$  zu bestimmen, müssen wir die Wellenfunktionen normieren:

$$|\tilde{A}|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = 1. \quad (2.8)$$

Da  $\int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \frac{a}{2}$ , folgt  $\tilde{A} = \sqrt{\frac{2}{a}}$ . Es gilt:

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (2.9)$$

Da  $k_n = \frac{n\pi}{a}$ , folgt:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

*Hinweis: Eigenzustände sind normiert. Welche Randbedingungen gelten für die Eigenfunktionen?*

- (b) Das Teilchen befinde sich im Eigenzustand tiefster Energie (Grundzustand) des Topfs der Breite  $a/2$ . Zu einer bestimmten Zeit werde die rechte Wand plötzlich von  $x = a/2$  nach  $x = a$  verschoben.

Berechne die Wahrscheinlichkeit, dass danach das Teilchen im ersten angeregten Zustand, bzw. im Grundzustand des Potentialtopfs der Breite  $a$  ist. **[1,5pt]**

Anfangs ist das Teilchen im Zustand  $\Psi_1^{a/2} = \sqrt{\frac{4}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$  für  $x \in [0, a/2]$  und  $\Psi_1^{a/2} = 0$ , für  $x \in [a/2, a]$ , sowie auch 0 für alle  $x$  außerhalb von  $[0, a]$ . Der Grundzustand und erste angeregte Zustand des Potentialtopfs der Breite  $a$  ist

$$\Psi_1^a = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad (2.11)$$

$$\Psi_2^a = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (2.12)$$

Die Überlagerung mit dem Grundzustand des Topfes  $\langle \Psi_1^a | \Psi_1^{a/2} \rangle$  ist:

$$\langle \Psi_1^a | \Psi_1^{a/2} \rangle = \int_0^{a/2} dx \sqrt{\frac{8}{a^2}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) = \int_0^{a/2} dx \sqrt{\frac{32}{a^2}} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right), \quad (2.13)$$

wo wir  $\sin(2x)\sin(x) = 2\sin^2(x)\cos(x)$  verwendet haben. Mittels der Substitution  $u = \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ , gilt:

$$\int_0^{a/2} dx \sqrt{\frac{32}{a^2}} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) = \int_{\sin^{-1}(0)}^{\sin^{-1}(a/2)} du u^2 \frac{4\sqrt{2}}{\pi} = \frac{4\sqrt{2}}{3\pi}. \quad (2.14)$$

Dann ist die Wahrscheinlichkeit im Grundzustand zu sein:

$$P_{11} = \left| \langle \Psi_1^a | \Psi_1^{a/2} \rangle \right|^2 = \frac{32}{9\pi^2}. \quad (2.15)$$

Die Überlagerung im Falle des ersten angeregten Zustandes ist:

$$\langle \Psi_2^a | \Psi_1^{a/2} \rangle = \int_0^{a/2} dx \sqrt{\frac{8}{a^2}} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \sqrt{\frac{2}{a^2}} \int_0^{a/2} dx \left(1 - \cos\left(\frac{4\pi}{a}x\right)\right) = \sqrt{\frac{1}{2}}. \quad (2.16)$$

Dann gilt:

$$P_{12} = \left| \langle \Psi_2^a | \Psi_1^{a/2} \rangle \right|^2 = \frac{1}{2}. \quad (2.17)$$

*Hinweis: Der Zustand ist unmittelbar nach der Verschiebung noch derselbe.*

- (c) Bleibt der Erwartungswert der Energie des Teilchens bei der plötzlichen Änderung erhalten? Berechne auch die Varianz der Energie. **[1,5pt]**

Die Hamiltonoperatoren (Energieoperatoren) vor und nach der Verschiebung sind:

$$H_{a/2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad x \in [0, a/2], \quad (2.18)$$

$$H_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad x \in [0, a], \quad (2.19)$$

Für die ursprüngliche Wellenfunktion:

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi_1 \rangle_{a/2} = \frac{2}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad x \in [0, a/2] \quad (2.20)$$

und 0 außerhalb. Im Intervall  $[0, a/2]$  berechnen wir nun die erste und zweite Ableitung, die wir in den Hamilton-operator einsetzen.

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad x \in [0, a/2]. \quad (2.21)$$

und 0 außerhalb. Wir bemerken jetzt, dass die erste Ableitung *unstetig* ist. Das sieht man daran, dass bei  $x = a/2$ :

$$\cos\left(\frac{2\pi}{2}\right) = \cos(\pi) = -1. \quad (2.22)$$

aber rechts davon 0. Dies war nicht der Fall für die Wellenfunktion selbst (diese ist stetig), da  $\sin(\pi) = 0$  gilt. Wir können auch schreiben

$$\frac{d\Psi}{dx} = \begin{cases} 0 & x \in (-\infty, 0) \\ \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) & x \in [0, a/2] \\ 0 & x \in (a/2, \infty) \end{cases} \quad (2.23)$$

beziehungsweise

$$\frac{d\Psi}{dx} = \begin{cases} 0 & x \in (-\infty, 0) \\ \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \theta(-(x - a/2)) & x \in [0, \infty) \end{cases} \quad (2.24)$$

Nachdem  $\delta(x) = \frac{d}{dx}\theta(x)$ , können wir schreiben für die zweite Ableitung:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2}{a^2\sqrt{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \delta(x - a/2) \quad x \in [0, a/2], \quad (2.25)$$

und:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = 0 \quad x \in [a/2, a]. \quad (2.26)$$

Dann gilt:

$$H_a \Psi = H_{a/2} \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \delta(x - a/2). \quad (2.27)$$

Der Erwartungswert der Energie ist:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H_a | \Psi \rangle &= \langle \Psi | H_{a/2} | \Psi \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \delta(x - a/2) \Psi(x) dx \\ &= \langle \Psi | H_{a/2} | \Psi \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{a\sqrt{a}} |\Psi(a/2)|^2 = \langle \Psi | H_{a/2} | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

da  $\Psi(a/2) = 0$  ist. Also ist der Energieerwartungswert derselbe, vor und nach dem Verschieben der Potentialwand. Die Varianz der Energie ist:

$$\langle H_a^2 \rangle_{\Psi} - \langle H_a \rangle_{\Psi}^2. \quad (2.29)$$

Allerdings ist:

$$\langle H_a^2 \rangle_{\Psi} = \langle (H_a \Psi) | (H_a \Psi) \rangle = \infty, \quad (2.30)$$

da die  $\delta$ -Funktion nicht quadrat-integrierbar ist. Wir können nicht  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - \frac{a}{2})$  berechnen. Daher ist die Varianz (Schwankungsquadrat) unendlich.

### 3 Teilchen auf einem Ring (5pt)

In Aufgabe 2 hast du ein Teilchen in einem eindimensional Potentialtopf untersucht. Wir wollen weiters ein freies Teilchen betrachten, aber mit anderen Randbedingungen.

Betrachte ein Teilchen der Masse  $m$  auf einem eindimensionalen Ring mit dem Umfang  $a$ , dargestellt durch das Intervall  $0 \leq x < a$ . Die Punkte  $x = 0$  und  $x = a$  sind dabei identifiziert, sodass die Wellenfunktion die periodische Randbedingung erfüllt:

$$\Psi(x) = \Psi(x + a) \quad (3.1)$$

Die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen auf dem Ring lautet

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi \quad (3.2)$$

- (a) Die Schrödingergleichung hat Lösungen der Form  $\Psi(x) = Ae^{ikx}$ , wobei  $k$  die Wellenzahl ist. Bestimme die zulässigen Energieeigenwerte. **[1,5pt]**

Durch zweimaliges Differenzieren erhalten wir

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi = -k^2 \Psi$$

Damit ergibt sich der Energieeigenwert  $E$  zu

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

. Nun wenden wir die periodische Randbedingung an, die fordert:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \Psi(x+a) \\ Ae^{ikx} &= Ae^{ikx} e^{ika} \\ \implies e^{ika} &= 1 \\ \implies ka &= 2\pi n, n \in \mathbb{Z}\end{aligned}$$

Damit ist die Wellenzahl quantisiert:  $k_n = \frac{2\pi}{a}n$ , wobei  $n \in \mathbb{Z}$ . Die Energie-Eigenwerte sind damit ebenfalls quantisiert:

$$E_n = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2} n^2, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.3)$$

(b) Normiere die Wellenfunktion. **[0,5pt]**

$$\begin{aligned}1 &\equiv \int_{x=0}^a |\Psi(x)|^2 dx = \int_{x=0}^a |A|^2 dx \\ &= |A|^2 a \implies A = \sqrt{\frac{1}{a}}\end{aligned}$$

(c) Vergleiche die in Teil (a) gefundenen Energieeigenwerte mit denen eines Teilchens in einem eindimensionalen Potentialtopf der Breite  $a$ . Was ist anders? Diskutiere. **[1pt]**

Für ein Teilchen im Potentialtopf haben wir die Randbedingungen  $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ . Die erlaubten Eigenwerte sind in diesem Fall

$$E_n^{\text{Topf}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Wir sehen, dass es beim Potentialtopf eine Nullpunktsenergie gibt  $E_1^{\text{Topf}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ , während das Teilchen auf dem Ring eine Energie  $E_0^{\text{Ring}} = 0$  für  $n = 0$  haben kann. In beiden Fällen sind die Energien quantisiert. Die Energieabstände sind allerdings unterschiedlich. Wir haben

$$E_{n+1}^{\text{Ring}} - E_n^{\text{Ring}} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2} [2n+1] \quad (3.4)$$

$$E_{n+1}^{\text{Topf}} - E_n^{\text{Topf}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} [2n+1] \quad (3.5)$$

- (d) Berechne  $\Delta x$  und  $\Delta p$  im Zustand  $\Psi(x)$ . Diskutiere Heisenbergs Unschärferelation. **[2pt]**

Für den Zustand  $\Psi(x) = Ae^{ikx}$  auf dem Ring berechnen wir die Erwartungswerte von  $x$  und  $x^2$  sowie  $p$  und  $p^2$ .

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{x=0}^a dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = A^2 \int_{x=0}^a x dx = A^2 \frac{a^2}{2} = \frac{a}{2} \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{x=0}^a dx \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) = A^2 \int_{x=0}^a x^2 dx = A^2 \frac{a^3}{3} = \frac{a^2}{3} \\ \langle p \rangle &= \int_{x=0}^a dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi(x) \\ &= \hbar k \int_{x=0}^a dx |\Psi(x)|^2 \\ &= \hbar k \\ \langle p^2 \rangle &= \int_{x=0}^a dx \Psi^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \Psi(x) \\ &= \hbar^2 k^2 \int_{x=0}^a dx |\Psi(x)|^2 \\ &= \hbar^2 k^2\end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die Varianzen

$$\begin{aligned}\Delta x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4} = \frac{a^2}{12} \\ \Delta p^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \hbar^2 k^2 - \hbar^2 k^2 = 0\end{aligned}$$

beziehungsweise die

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{12}}, \quad \Delta p = 0$$

Ist Heisenbergsche Unschärferelation  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  also nun verletzt? Wir müssen etwas aufpassen. Wir haben den Erwartungswert berechnet von einem Impulseigenzustand. Für ein freies Teilchen definiert auf  $x \in \mathbb{R}$  bedeutet dies somit  $\Delta x = \infty$ , also somit komplette Delokalisation.

In unserem Fall haben wir ein freies Teilchen auf einem begrenzten Intervall  $0 \leq x < a$ .  $\Delta x$  ist demnach endlich. Gleichermassen lässt sich der Impulseigenzustand scheinbar ordentlich normalisieren.

Um die Frage hinsichtlich Heisenberg's Unschärferelation gut beantworten zu können, brauchen wir funktionale Analysis; siehe Stack Exchange post für Details. Kurzgefasst: Weder  $\hat{x}, \hat{p}$  (mit  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbb{I}$ ) als Operatoren haben Eigenfunktionen im strengen Sinne. Deshalb gibt es auch diesen vermeintlichen Widerspruch mit der Heisenbergschen Unschärferelation.

## 4 Ein Kommutator-Rätsel (5pt)

In den vorherigen Übungen haben wir die *kanonische Kommutatorrelation* kennengelernt, die der Heisenbergschen Unschärferelation zugrunde liegt:  $[x, p] = i\hbar$ .

Wir haben ebenfalls gelernt, dass  $x$  und  $p$  in der Quantenmechanik Hermitesche Operatoren auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  sind. Allgemein sollten wir die Kommutatorrelation also in der Form

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbb{I} \quad (4.1)$$

schreiben, wobei  $\mathbb{I}$  die Identität beschreibt und wir uns per Notation deutlich machen, dass  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  Operatoren sind.

- (a) Wir nehmen an, dass  $\mathcal{H}$  eine endliche Dimension  $d$  hat, sodass wir Operatoren auf  $\mathcal{H}$  als  $d \times d$  Matrizen darstellen können. Zeige, dass die Kommutatorrelation 4.1 in diesem Fall nicht erfüllt sein kann. **[1pt]**

*Tipp:* Erinnert euch an die Definition und Eigenschaften der Spur einer Matrix. Seien  $X$  und  $P$  zwei  $d \times d$  Matrizen, welche  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  darstellen. Dann gilt

$$\text{Tr}([X, P]) = \text{Tr}(XP) - \text{Tr}(PX) = 0,$$

weil die Spur invariant unter zyklischen Vertauschungen in ihrem Argument ist. Auf der rechten Seite haben wir wiederum

$$\text{Tr}(i\hbar \mathbb{I}) = i\hbar \text{Tr}(\mathbb{I}) \neq 0,$$

weil die Spur der Identitätsmatrix auf einem  $d$ -dimensionalen Raum gleich  $d$  ist. (Genauer gesagt ist  $\mathbb{I}$  die Identität auf dem Definitionsbereich von  $[\hat{x}, \hat{p}]$ , aber das ändert nichts Grundlegendes am Argument.)

- (b) In Übungsblatt 1 hatten wir bereits das Konzept von beschränkten Operatoren kennengelernt: Ein linearer Operator  $A$  ist beschränkt, wenn seine Operatornorm  $\|A\|$  endlich ist.

Zeige, dass zwei Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$ , welche die Kommutatorrelation 4.1 erfüllen, nicht beide beschränkt sein können. **[3pt]**

*Tipp:* Startet mit der Identität  $[p^n, x] = -i\hbar n p^{n-1}$  (siehe Aufgabe 5, Übungsblatt 2 für eine Herleitung).

Wir starten mit dem Hinweis und nehmen die Operatornorm auf beiden Seiten:

$$\|p^n x - x p^n\| = \hbar n \|p^{n-1}\|. \quad (4.2)$$

Jetzt nutzen wir zuerst die Subadditivität und dann die Submultiplikativität der Operatornorm:

$$\|p^n x - x p^n\| \leq \|p^n x\| + \|-x p^n\| \leq 2\|p^n\|\|x\|. \quad (4.3)$$

Aus den beiden vorherigen Aussagen folgt

$$\hbar n \|p^{n-1}\| \leq 2\|p^n\|\|x\| \quad (4.4)$$

$$\Leftrightarrow 2\|p\|\|x\| \geq \hbar n. \quad (4.5)$$

Wir haben keinerlei Einschränkungen für  $n$  angenommen –  $n$  kann also beliebig groß gewählt werden, sodass das Produkt der Operatornormen von  $x$  und  $p$  unendlich groß werden kann.

- (c) Interpretiere kurz die Ergebnisse aus (a) und (b) – was lernen wir daraus über  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  und  $\mathcal{H}$ ? **[1pt]**

Aus Aufgabenteil (a) lernen wir, dass die Annahme eines endlichdimensionalen Hilbertraums zu einem Widerspruch führt – der Hilbertraum, auf dem  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  die Kommutatorrelation erfüllen, muss also unendlichdimensional sein. Teil (b) wiederum zeigt uns, dass mindestens einer der beiden Operatoren unbeschränkt sein muss, was das Ergebnis von (a) aus einer anderen Perspektive bestätigt (denn Operatoren auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum können nur beschränkt sein.)