Prof. U. Mosel, Dr. H. van Hees **Sommersemester 2009**

Übungen zur Quantenmechanik I

Blatt 8 **15.06.2009, Abgabetermin für Hausübungen: 22.06.2009**

Präsenzaufgabe 11

Besprechen Sie mit Ihren Übungsgruppenleitern die Klausur!

Hausübung 11 (Matrizenmechanik)

In der Vorlesung haben Sie die Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators behandelt. Zur Lösung der folgenden Aufgabe dürfen Sie alle Formeln in Prof. Mosels Skript zur erzeugenden Funktion der Hermite-Polynome benutzen:

http://theorie.physik.uni-giessen.de/~hees/qm1-ss09/erzeugende-funktion-hermite-polynome-Mosel.pdf

Die auf 1 normierten Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators lauten demnach

$$u_n(x) = N_n \mathrm{H}_n(\xi) \exp(-\xi^2/2), \quad \text{mit} \quad \xi = x\alpha, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} n! 2^n}\right)^{1/2}. \tag{1}$$

Dabei ist $n \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \ldots\}$. Diese Funktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) des Hilbertschen Funktionenraumes $\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$ der quadratintegrablen Funktionen, die quantenmechanische Zustände repräsentieren.

(a) Berechnen Sie die sog. „Matrixelemente des Ortsoperators” bzgl. dieses VONS’, also die Größen

$$x_{jk} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x u_j^*(x) x u_k(x). \tag{2}$$

Verwenden Sie dabei denselben Trick mit der erzeugenden Funktion, der in dem oben angegebenen Skript benutzt wurde, um die Orthogonalität der Eigenfunktionen nachzuweisen und die Normierungsfaktoren N_n zu berechnen (S. 5-6).

Stellen Sie Ihr Resultat für x_{jk} übersichtlich als unendlichdimensionale Matrix dar, also in der Form

$$\underline{x} = (x_{jk}) = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & x_{03} & \cdots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Ist die Matrix im Sinne der linearen Algebra hermitesch?

(b) Berechnen Sie nun mit Hilfe der bisher erreichten Ergebnisse die Matrixelemente des Impulsoperators. Machen Sie dabei von der Ableitungsformel für die Hermitepolynome (Gl. (1.8) im Skript) Gebrauch, also von

$$\mathrm{H}_n'(\xi) = 2n\mathrm{H}_{n-1}(\xi), \tag{4}$$

und verwenden Sie weiter die Orthogonalitätsrelationen (Gl. (1.36) im Skript) sowie Ihr Resultat für $\underline{x}$ gem. Gl. (3). Ist die Matrix hermitesch?

(c) Zeigen Sie, daß die gefundenen Matrizen die Vertauschungsrelationen für $\hat{x}$ und $\hat{p}$ erfüllen, indem Sie die üblichen Rechenregeln für die Matrixmultiplikation verwenden, d.h. zeigen Sie, daß

$$\underline{x}\underline{p} - \underline{p}\underline{x} = \mathrm{i}\hbar\underline{1} \tag{5}$$

ist.

(d) Berechnen Sie schließlich (wieder unter ausschließlicher Verwendung der Matrizenrechenregeln!) die den Hamiltonoperator repräsentierende Matrix, d.h.

$$\underline{H} = \frac{1}{2m}\underline{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\underline{x}^2. \tag{6}$$

Warum hätten Sie dieses Resultat auch ohne Rechnung sofort hinschreiben können?

Freiwillige Zusatzaufgabe

Die Wellenfunktionen können umkehrbar eindeutig auf die Komponenten bzgl. des VONS $u_n(x)$ cf. (1) abgebildet werden, nämlich durch

$$c_n(\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x u_n^*(x)\psi(x) \Leftrightarrow \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\psi)u_n(x). \tag{7}$$

Für zwei Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 gilt dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\psi_1^*(x)\psi_2(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^*(\psi_1)c_n(\psi_2). \tag{8}$$

Zeigen Sie, daß im Sinne dieser Abbildung

$$c_j(\hat{x}\psi) = \sum_{k=0}^{\infty} x_{jk}c_k(\psi) \tag{9}$$

mit den in Aufgabenteil (a) berechneten Matrixelementen x_{jk} gilt. Im folgenden möge $\vec{c}(\psi)$ den unendlichdimensionalen Spaltenvektor mit den Einträgen $c_n(\psi)$ bezeichnen. Zeigen Sie dann, daß Gl. (9) in der Form

$$\vec{c}(\hat{x}\psi) = \underline{x}\vec{c}(\psi) \tag{10}$$

geschrieben werden kann. Die Operatoren werden also zu unendlichdimensionalen Matrizen, die auf den Spaltenvektoren aus den Komponenten der Wellenfunktion bzgl. des VONS (1) ganz analog wie die endlichdimensionalen Matrizen in der linearen Algebra operieren!

Bemerkung zur Historie: Wie wir in der Übung gesehen haben werden die Operatoren werden also in der Darstellung der Quantentheorie im Folgenraum ℓ_2 zu unendlichdimensionalen Matrizen, die ganz analog wie die endlichdimensionalen Matrizen in der linearen Algebra gehandhabt werden können! Insbesondere wird die Hintereinanderausführung von Operatoren im Funktionenraum einfach zur üblichen Matrizenmultiplikation von Matrizen, die auf unendlichdimensionale Vektoren wirken.

Die Quantentheorie läßt sich also im Prinzip genauso gut im Folgenraum ℓ_2 anstatt im Hilbertraum $\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$ der quadratintegrablen Wellenfunktionen darstellen. Statt hermitescher Differentialoperatoren (für den Impuls) bzw. Multiplikation mit x (für den Ortsvektor) hat man dann unendlichdimensionale hermitesche Matrizen. Man sagt auch, man habe die Quantentheorie zum einen als „Wellenmechanik", zum anderen als „Matrizenmechanik" dargestellt.

Die erste Version der Quantentheorie wurde zunächst nicht als Wellenmechanik, sondern von Heisenberg als Matrizenmechanik formuliert. Nur wenig später hat dann Schrödinger die Wellenmechanik gefunden. Wie wir eben gesehen haben, sind beides nur verschiedene Darstellungen ein und derselben Theorie. Das hat Schrödinger auch innerhalb kürzester Zeit gezeigt. Interessant ist auch, daß das Energieeigenwertproblem für das Wasserstoffatom von Pauli zuerst mit der Matrizenmechanik gelöst wurde, noch bevor Schrödinger es mit Hilfe seiner Wellenmechanik behandelt hat, obwohl letzteres viel einfacher ist als Paulis matrizenmechanische Rechnung!

Homepage zu Vorlesung und Übungen:

`http://theorie.physik.uni-giessen.de/~hees/qm1-ss09/`