Übungen zur Quantenmechanik I

Lösungen zu Blatt 8 (Hausübung)

Präsenzaufgabe 11

Besprechen Sie mit Ihren Übungsgruppenleitern die Klausur!

Hausübung 11 (Matrizenmechanik)

(a) Es ist

$$x_{jk} = \int_{\infty}^{\infty} \mathrm{d}x x u_j^*(x) u_k(x) = \frac{N_j N_k}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \, \xi \, \mathrm{H}_j(\xi) \, \mathrm{H}_k(\xi) \exp(-\xi^2). \tag{1}$$

Wie im Skript bilden wir das Integral mit der erzeugenden Funktion

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi f(t,\xi) f(s,\xi) \xi \exp(-\xi^2) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^j s^k}{j!k!} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \, \xi \, \mathrm{H}_j(\xi) \, \mathrm{H}_k(\xi). \tag{2}$$

Die gesuchten Matrixelemente ergeben sich durch Koeffizientenvergleich bzgl. $t^j s^k$. Setzen wir nun die erzeugende Funktion in (2) ein, erhalten wir

$$I = \exp(2st) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \, \xi \exp[-(\xi - s - t)^2] = \sqrt{\pi}(s+t) \exp(2st) = \sqrt{\pi}(s+t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!}. \tag{3}$$

Vergleichen wir nun die Koeffzienten von $s^j t^j$ in (3) mit denen in (2) erhalten wir aufgrund von (1) nach einigen elementaren Umformungen die Matrixelemente

$$x_{jk} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} (\sqrt{j} \delta_{j,k+1} + \sqrt{k} \delta_{j+1,k}). \tag{4}$$

Beim Schreiben in Matrixform ist zu berücksichtigen, daß die Zählung der Indizes j und k mit 0 beginnt. Es ist also

$$\underline{x} = (x_{jk}) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Offensichtlich gilt $\underline{x}^\dagger = \underline{x}$, d.h. die Matrix ist hermitesch.

(b) Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \hat{p} u_k(x) &= -\mathrm{i}\hbar u_k'(x) = -\mathrm{i} N_k \alpha \hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} [\mathrm{H}_k(\xi) \exp(-\xi^2/2)] \\ &= -\mathrm{i} N_k \alpha \hbar (2k \, \mathrm{H}_{k-1}(\xi) - \xi \, \mathrm{H}_\xi) \exp(-\xi^2/2). \end{aligned} \tag{6}$$

Das bedeutet für das Matrixelement

$$p_{jk} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x u_j^*(x) \hat{p} u_k(x) = -\mathrm{i}\hbar N_j N_k \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \, \mathrm{H}_j(\xi) [2k \, \mathrm{H}_{k-1}(\xi) - \xi \, \mathrm{H}_k(\xi)] \exp(-\xi^2). \tag{7}$$

Mit der Orthogonalitätsrelation aus dem Skript und durch Vergleich mit (1) erhalten wir

$$\begin{aligned} p_{jk} &= -\mathrm{i}\hbar N_j N_k 2\sqrt{\pi} 2^j j! k \delta_{j+1,k} + \mathrm{i}\hbar\alpha^2 x_{jk} = -2\mathrm{i}\hbar\alpha\delta_{j+1,k} + \frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{k}\delta_{j+1,k} + \sqrt{j}\delta_{j,k+1}) \\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{j}\delta_{j,k+1} - \sqrt{k}\delta_{j+1,k}). \end{aligned} \tag{8}$$

Als Matrix geschrieben ist also

$$\underline{p} = (p_{jk}) = \frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{9}$$

(c) Matrixprodukte kann man entweder in Matrixnotation oder als Summe mit Hilfe von (4) und (8) berechnen. Nach einiger Rechnerei kommt dabei tatsächlich

$$\underline{xp} - \underline{px} = \mathrm{i}\hbar\underline{1} \tag{10}$$

heraus, also die Orts-Impuls-Vertauschungsrelation in Matrixnotation. Das muß so sein, weil die auf dem Übungsblatt definierte Abbildung zwischen $\mathrm{L}^2(\mathbb{R})$-Funktionen und den dazugehörigen ℓ_2^2-Folgen sowie zwischen Operatoren und Matrizen einen Isomorphismus darstellen. Das bedeutet, daß die Schrödingersche Wellenmechanik und die Heisenbergsche Matrizenmechanik nur verschiedene Schreibweisen ein und derselben Quantentheorie sind.

(d) Ausführen der Matrixmultiplikation ergibt

$$H_{jk} = \frac{\hbar\omega}{2}(2j+1)\delta_{jk} = E_j\delta_{jk}, \tag{11}$$

d.h. der Hamiltonoperator wird in der Matrixdarstellung bzgl. Energieeigenvektoren diagonal, und die Einträge in den Diagonalelementen sind gerade die Energieeigenwerte.

Das ist von vornherein ohne Rechnung klar, weil eine lineare Abbildung als Matrix bzgl. ihrer Eigenbasis geschrieben stets eine Diagonalmatrix mit ihren Eigenwerten auf der Diagonalen ist.

Freiwillige Zusatzaufgabe

Das ist ein typisches Beispiel für die Anwendung der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{j=0}^{\infty} u_j^*(x) u_j(x') = \delta(x - x'). \tag{12}$$

Diese Relation wenden wir nun wie folgt an[1]

$$\begin{aligned} c_n(\hat{x}\psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x u_n^*(x) x \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' u_n^*(x') x' \psi(x) \delta(x - x') \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' u_n^*(x') x' u_j(x')}_{x_{nj}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x u_j^*(x) \psi(x)}_{c_j(\psi)} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} x_{nj} c_j(\psi), \end{aligned} \tag{13}$$

[1] Man bezeichnet das oft als „Einschieben der Eins".

und das entspricht genau den Regeln der Matrixmultiplikation

$$\vec{c}(\hat{x}\psi) = \underline{x}\vec{c}(\psi). \tag{14}$$

Der einzige Unterschied zur gewöhnlichen Matrizenrechnung ist, daß wir es mit unendlichdimensionalen Matrizen und Spaltenvektoren zu tun haben. Die Vektorkomponenten und Matrixelemente sind dabei i.a. komplexe Zahlen.

Homepage zu Vorlesung und Übungen:

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