Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik für Informatiker SS 2014

Prof. Dr. A. Shnirman
Dr. B. Narozhny

Blatt 9: Lösungen
Besprechung 17.06.2014

---

1. Erwartungswert, Variation und Unschärfe-Relation:

Gegeben sei die Wellenfunktion eines Teilchens in 1-D:

$$\psi(x) = \mathcal{N}\,(a + bx + cx^2)\,\exp\left[-\frac{x^2}{2}\right]\ ,$$

wobei a, b und c reell sind.

a) **Bestimmen Sie den Normierungskoeffizient $\mathcal{N}$.**
Der Normierungskoeffizient wird mithilfe der Normierungs-Bedingung bestimmt:

$$\int dx|\psi(x)|^2 = 1\ .$$

$$1 = \mathcal{N}^2 \int dx\,(a + bx + cx^2)^2\,\exp\left[-x^2\right]\ .$$

Aus Symmetrie-Gründen "überleben" im diesem Integral nur die gerade Potenzen von x:

$$1 = \mathcal{N}^2 \int dx\,(a^2 + b^2x^2 + 2acx^2 + c^2x^4)\,\exp\left[-x^2\right]\ .$$

Wir brauchen, also, die folgenden Integrale:

$$\int e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\ .$$

$$\int x^2\,e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\alpha^{-3/2}\ .$$

$$\int x^4\,e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\alpha^{-3/2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\,\alpha^{-5/2}\ .$$

Der Parameter α war hier nötig um nach α differenzieren zu können. Am Ende setzen $\alpha = 1$ und erhalten

$$1 = \mathcal{N}^2\left(a^2\sqrt{\pi} + (b^2 + 2ac)\frac{\sqrt{\pi}}{2} + c^2\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right)\ .$$

Also

$$\mathcal{N}^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)}\ .$$

b) **Bestimmen Sie die Erwartungswerte $\langle\hat{x}\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$. Hier ist $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ der Impulsoperator.**

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \mathcal{N}^2 \int dx\, x\,(a + bx + cx^2)^2 \exp\left[-x^2\right] \ .$$

Jetzt, aus Symmetrie-Gründen "überleben" nur die folgenden Terme

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \mathcal{N}^2 \int dx\,(2abx^2 + 2bcx^4) \exp\left[-x^2\right] \ .$$

Das ergibt

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \mathcal{N}^2 \left(ab\sqrt{\pi} + \frac{3bc\sqrt{\pi}}{2}\right) \ .$$

Letztendlich

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \frac{\left(ab + \frac{3bc}{2}\right)}{\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)} \ .$$

Für den Erwartungswert des Impuls-Operators erhalten wir ($\psi(x)$ ist reell)

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = \int dx\,\psi(x)\,\left(-i\hbar\partial/\partial x\right)\,\psi(x) \ .$$

Ohne Rechnung sieht man, dass $\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = 0$. Z.B., mithilfe der partiellen Integration man kann zeigen, dass $\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$.

c) **Berechnen Sie die Variationen $(\Delta x)^2 = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2$ und $(\Delta p)^2 = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2$ und überzeugen Sie sich, dass die Unschärfe-Relation $(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar/2$ gilt.**

1) Wir berechnen erst $(\Delta x)^2$:

$$\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \mathcal{N}^2 \int dx\, x^2\,(a + bx + cx^2)^2 \exp\left[-x^2\right] \ .$$

$$\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \mathcal{N}^2 \int dx\,(a^2x^2 + b^2x^4 + 2acx^4 + c^2x^6) \exp\left[-x^2\right] \ .$$

Wir brauchen noch das folgende Integral:

$$\int x^6\, e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\,\alpha^{-5/2}\right) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}\,\alpha^{-7/2} \ .$$

Dann erhalten wir

$$\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left(\frac{a^2}{2} + \frac{3b^2 + 6ac}{4} + \frac{15c^2}{8}\right) \ .$$

$$\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \frac{\left(\frac{a^2}{2} + \frac{3b^2+6ac}{4} + \frac{15c^2}{8}\right)}{\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)} \ .$$

Schließlich

$$(\Delta x)^2 = \frac{\left(\frac{a^2}{2} + \frac{3b^2+6ac}{4} + \frac{15c^2}{8}\right)}{\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)} - \frac{\left(ab + \frac{3bc}{2}\right)^2}{\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)^2} \ .$$

2) Um $\langle \hat{p}^2 \rangle$ bestimmen zu können, berechnen wir erst

$$\phi(x) = \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{N}(a + bx + cx^2) \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right] \ .$$

$$\phi(x) = \hat{p}\psi(x) = -i\hbar\mathcal{N}\left[(b + 2cx) - x(a + bx + cx^2)\right] \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right] \ .$$

$$\phi(x) = \hat{p}\psi(x) = -i\hbar\mathcal{N}\left[b + (2c - a)x - bx^2 - cx^3)\right] \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right] \ .$$

Dann

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \phi|\phi \rangle = \int dx\, \phi^*(x)\phi(x) \ .$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2 \int dx\ \left[b^2 + (2c - a)^2x^2 + b^2x^4 + c^2x^6 - 2b^2x^2 - 2c(2c - a)x^4\right] \exp\left[-x^2\right]$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2 \int dx\ \left[b^2 + \left[(2c - a)^2 - 2b^2\right] x^2 + \left[b^2 - 2c(2c - a)\right] x^4 + c^2x^6\right] \exp\left[-x^2\right] \ .$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left[b^2 + \frac{1}{2}\left[(2c - a)^2 - 2b^2\right] + \frac{3}{4}\left[b^2 - 2c(2c - a)\right] + \frac{15}{8}\, c^2\right] \ .$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left[\frac{3}{4}\, b^2 + \frac{1}{2}\,(2c - a)^2 - \frac{3}{2}\, c(2c - a) + \frac{15}{8}\, c^2\right] \ .$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left(\frac{3}{4}\, b^2 - \frac{1}{2}\,(2c - a)(a + c) + \frac{15}{8}\, c^2\right) \ .$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left(\frac{3}{4}\, b^2 + \frac{1}{2}\, a^2 - \frac{1}{2}\, ac + \frac{7}{8}\, c^2\right) \ .$$

Schließlich

$$(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2\mathcal{N}^2\sqrt{\pi}\left(\frac{3}{4}\, b^2 + \frac{1}{2}\, a^2 - \frac{1}{2}\, ac + \frac{7}{8}\, c^2\right) \ .$$

$$(\Delta p)^2 = \hbar^2\, \frac{\left(\frac{3}{4}\, b^2 + \frac{1}{2}\, a^2 - \frac{1}{2}\, ac + \frac{7}{8}\, c^2\right)}{\left(a^2 + \frac{b^2+2ac}{2} + \frac{3c^2}{4}\right)} \ .$$

2. Spin-1/2 (Quantenbit):

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Unschärferelationen eng verknüpft sind mit den Kommutatoren von Operatoren. Im allgemeinen gilt

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right)^2$$

wobei $[\hat{A}, \hat{B}]$ ein Kommutator ist: $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Bei Spin 1/2 werden die so genanten *Pauli-Matrizen* σ_i $(i = x, y, z)$ benutzt

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Der Spinoperator ist dabei definiert als $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$.

a) **Überprüfen Sie mit einer expliziten Rechnung dass die Pauli-Matrizen den folgenden Relationen genügen**

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\,\sigma_z \qquad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\,\sigma_x \qquad [\sigma_x, \sigma_z] = -2i\,\sigma_y$$
$$\sigma_x^2 = 1 \qquad \sigma_y^2 = 1 \qquad \sigma_z^2 = 1$$

Einfache Matrix-Multiplikation.

b) **Der Zustand des Spin-1/2 (Quantenbits) ist gegeben durch**

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{i}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \ .$$

Hier $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ **und** $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ **sind die Eigenzustände des Operators** σ_z**:** $\sigma_z|0\rangle = |0\rangle$ **und** $\sigma_z|1\rangle = -|1\rangle$**. Bestimmen Sie die Erwartungswerte** $\langle \hat{S}_i \rangle$ **und die Variationen** $(\Delta S_i)^2$ **für** $i = x, y, z$ **für den Zustand** $|\psi\rangle$**.**

$$\langle\psi|S_z|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(-\tfrac{i}{2} \;\middle|\; \tfrac{\sqrt{3}}{2} \right)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{i}{2} \\ \hline \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(-\frac{1}{2}\right) = -\frac{\hbar}{4} \ .$$

$$\langle\psi|S_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(-\tfrac{i}{2} \;\middle|\; \tfrac{\sqrt{3}}{2} \right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{i}{2} \\ \hline \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = 0 \ .$$

$$\langle\psi|S_y|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(-\tfrac{i}{2} \;\middle|\; \tfrac{\sqrt{3}}{2} \right)\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{i}{2} \\ \hline \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = -\frac{\hbar\sqrt{3}}{4} \ .$$

$$\langle\psi|S_z^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\sigma_z^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \ .$$

$$\langle\psi|S_x^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\sigma_x^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \ .$$

$$\langle\psi|S_y^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\sigma_y^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\langle\psi|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \ .$$

$$(\Delta S_z)^2 = \langle\psi|S_z^2|\psi\rangle - \langle\psi|S_z|\psi\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{16} = \frac{3\hbar^2}{16} \ .$$

$$(\Delta S_x)^2 = \langle\psi|S_x^2|\psi\rangle - \langle\psi|S_x|\psi\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} - 0 = \frac{\hbar^2}{4} \ .$$

$$(\Delta S_y)^2 = \langle\psi|S_y^2|\psi\rangle - \langle\psi|S_y|\psi\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{16} = \frac{\hbar^2}{16} \ .$$

c) **Überprüfen Sie, für den Zustand $|\psi\rangle$, die Unschärferelationen**

1) Die erste Ungleichung

$$(\Delta S_x)^2(\Delta S_y)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{S}_x, \hat{S}_y]\rangle\right)^2$$

Wir erhalten für den Kommutator $[S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4}[\sigma_x, \sigma_y] = \frac{\hbar^2}{4}2i\sigma_z = i\hbar S_z$.
Dann gilt

$$\langle[\hat{S}_x, \hat{S}_y]\rangle = i\hbar\langle S_z\rangle = -i\frac{\hbar^2}{4} \ .$$

Wir überprüfen die Ungleichung

$$\frac{\hbar^2}{4} \times \frac{\hbar^2}{16} \geq \frac{\hbar^4}{64} \ . \quad OK$$

2) Die zweite Ungleichung

$$(\Delta S_x)^2(\Delta S_z)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{S}_x, \hat{S}_z]\rangle\right)^2$$

Wir erhalten für den Kommutator $[S_x, S_z] = \frac{\hbar^2}{4}[\sigma_x, \sigma_z] = -\frac{\hbar^2}{4}2i\sigma_y = -i\hbar S_y$.
Dann gilt

$$\langle[\hat{S}_x, \hat{S}_z]\rangle = -i\hbar\langle S_y\rangle = i\frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4}$$

Wir überprüfen die Ungleichung

$$\frac{\hbar^2}{4} \times \frac{3\hbar^2}{16} \geq \frac{3\hbar^4}{64} \ . \quad OK$$

3) Die dritte Ungleichung

$$(\Delta S_y)^2(\Delta S_z)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{S}_y, \hat{S}_z]\rangle\right)^2 \ .$$

Wir erhalten für den Kommutator $[S_y, S_z] = \frac{\hbar^2}{4}[\sigma_y, \sigma_z] = \frac{\hbar^2}{4}2i\sigma_x = i\hbar S_x$.
Dann gilt

$$\langle[\hat{S}_y, \hat{S}_z]\rangle = i\hbar\langle S_x\rangle = 0$$

Wir überprüfen die Ungleichung

$$\frac{\hbar^2}{16} \times \frac{3\hbar^2}{16} \geq 0 \ . \quad OK$$