Quantenmechanik

David Gross, Johan Åberg

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln

WS 24/25

Übungsblatt 9 **Abgabe: Samstag den 7. December um 24:00 Uhr**

1 Komplexe Konjugation als Zeitumkehr

In der Vorlesung wurde besprochen, dass es nicht nur unitäre Operatoren gibt, sondern auch anti-unitäre Operatoren. Ein Operator $Q : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ wird als *anti-unitär* bezeichnet, wenn er *invertierbar* ist und die folgende Bedingung erfüllt:

$$\langle Q\phi | Q\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*, \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{H}.$$

a) Man kann die komplexe Konjugation der Wellenfunktion als einen Operator $C : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ betrachten, der definiert ist durch

$$(C\psi)(x) = \psi(x)^*.$$

Was ist das Inverse C^{-1}? Zeigen Sie, dass C anti-unitär ist. **(2 points)**

b) Man muss vorsichtig sein, wenn man mit anti-unitären Operatoren arbeitet. Für invertierbare *lineare* Operatoren L gilt, dass diese mit allen komplexen Zahlen kommutieren, im Sinne von $L(z\hat{1})L^{-1} = z\hat{1}$ für alle $z \in \mathbb{C}$. Für C gilt jedoch, dass $C(i\hat{1})C^{-1} = -i\hat{1}$. *Zeigen Sie letzteres, indem Sie demonstrieren, dass*

$$\big(C(i\hat{1})C^{-1}\psi\big)(x) = -i\psi(x), \tag{1}$$

für alle Wellenfunktionen ψ. Was wäre das Ergebnis von $\big(C(r\hat{1})C^{-1}\psi\big)(x)$, wenn Sie stattdessen eine relle Zahl $r \in \mathbb{R}$ hätten?

Hinweis: Die linke Seite von (**b)**) könnte auf den ersten Blick etwas verwirrend sein. Es könnte hilfreich sein, die neue Wellenfunktion $\eta(x) = i(C^{-1}\psi)(x)$ einzuführen. Die linke Seite von (**b)**) ist dann nichts anderes als $(C\eta)(x)$. **(2 points)**

c) Als Nächstes wird die Wirkung von C auf Operatoren untersucht. Betrachten Sie dazu ein Teilchen auf einer Linie $\mathbb{R}$ mit Positionsoperator X und Impulsoperator P. *Zeigen Sie, dass*

$$(CXC^{-1}\psi)(x) = (X\psi)(x), \quad (CPC^{-1}\psi)(x) = (-P\psi)(x). \tag{2}$$

(2 points)

Bemerkung: Daraus kann man schließen, dass der Positionsoperator unverändert bleibt, der Impulsoperator jedoch unter der Wirkung von C das Vorzeichen wechselt.

d) Nun wenden Sie sich der Frage zu, warum C als Umkehrung der Zeitentwicklung betrachtet werden kann. Angenommen ein Hamiltonoperator H ist *zeitumkehr-symmetrisch*, was bedeutet, dass

$$CHC^{-1} = H.$$

Zeigen Sie, dass für die Familie von Evolutionsoperatoren $U(t) = e^{-itH/\hbar}$ folgende Gleichung gilt

$$CU(t)\psi(x) = U(-t)C\psi(x). \tag{3}$$

für alle ψ. Beachten Sie, dass in diesem Ausdruck darauf verzichtet wurde, so viele Klammern wie oben zu setzen, um die Lesbarkeit zu vereinfachen. **(3 points)**

Bemerkung: Aus (d)) kann man folgern, dass die Anwendung von C irgendwie die Richtung der Entwicklung von t nach $-t$ umkehrt. Diese Umkehrung wird vielleicht noch etwas klarer, wenn man einige Umformungen von (d)) vornimmt. Wenn t mit $-t$ ersetzt wird und man dann C auf beide Seiten anwendet, ergibt sich

$$U(-t)\psi = CU(t)C\psi. \tag{4}$$

Diese Formel besagt, dass $CU(t)C$ dasselbe ist wie die Rückwärtsentwicklung $U(-t)$. Wenn man in (d)) ψ durch $U(t)\psi$ ersetzt, ergibt sich eine dritte Möglichkeit, nämlich $\psi = CU(t)CU(t)\psi$. Das bedeutet, dass, wenn man sich in der Zeit um t vorwärts entwickelt, C anwendet, dann wieder um t vorwärts entwickelt und schließlich C anwendet, man wieder an dem Punkt ist, an dem man angefangen hat. Die Schlussfolgerung daraus ist, dass die Anwendung von C in einem zeitumkehr-symmetrischen System bewirkt, dass das System sich so verhält, als würde die Zeit rückwärts laufen. Wir können also die komplexe Konjugation C als die Implementierung der Zeitumkehr interpretieren.

e) Man sollte beachten, dass die oben beschriebene Zeitumkehrwirkung wirklich erfordert, dass der Hamiltonoperator zeitumkehr-symmetrisch ist. Allerdings sind das nicht alle Hamiltonoperatoren. *Bestimmen Sie, welcher dieser beiden Hamiltonoperatoren zeitumkehr-symmetrisch ist und welcher nicht:*

$$H_1 = \frac{1}{2m}P^2 + V(X), \quad H_2 = \frac{1}{2m}P^2 + qXP + qPX.$$

Hierbei ist V ein Potential (mit einer vorteilhaften Taylorentwicklung), m eine Masse und q eine reelle Zahl.

Hinweis: Beachten Sie, dass (c)) als $CXC^{-1} = X$ und $CPC^{-1} = -P$ umgeschrieben werden kann. **(2 points)**

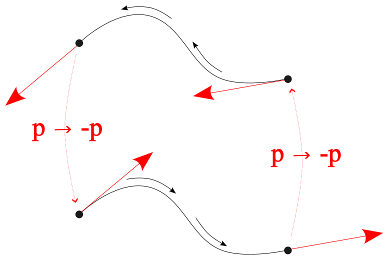
Bemerkung: Das kanonische Beispiel für ein System, das die Zeitumkehr-Symmetrie bricht, ist ein geladenes Teilchen in einem externen Magnetfeld.

f) Die Wirkung der Zeitumkehr kann auch direkt in der Schrödinger-Gleichung beobachtet werden. Sei $\psi(x,t)$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x}(x,t) + V(x)\psi(x,t). \tag{5}$$

Zeigen Sie, dass $\phi(x,t) = \psi(x,-t)^*$ ebenfalls eine Lösung von (f)) ist. **(3 points)**

Bemerkung: Zeitumkehr und Zeitumkehr-Symmetrie sind kein ausschließlich quantenmechanisches Phänomen; es gibt ein klassisches Pendant. Man möge sich daran erinnern, dass die Arena der klassischen Mechanik der Phasenraum ist, der die Raumkoordinaten x und die Impulskoordinaten p kombiniert. Im klassischen Fall führt man eine Zeitumkehroperation ein, die die Impulse umkehrt, während die Positionen unverändert bleiben $(x,p) \to (x,-p)$. Angenommen, die Hamilton-Funktion ist zeitumkehr-symmetrisch, was hier bedeutet, dass $H(x,-p) = H(x,p)$. Dann, wenn das Teilchen für eine Zeit t entwickelt wird, der Impuls jedes Teilchens umkehrt wird ($p \to -p$, aber die Positionen unverändert bleiben), das Teilchen wieder für eine Zeit t entwickelt wird und schließlich die Richtung aller Impulse erneut umkehrt ($p \to -p$) werden, befindet sich das Teilchen wieder an der gleichen Position und dem gleichen Impuls wie zu Beginn (also am gleichen Punkt im Phasenraum). Überlegen Sie, wie all dies mit dem quantenmechanischen Fall, z.B. (c)) und $\psi = CU(t)CU(t)\psi$, verglichen werden kann.



2 Baker-Campbell-Hausdorff

Wie Sie in der vorherigen Übung gesehen haben, ist die Operator-Exponentiation eine zentrale Aufgabe. In der vorherigen Übung hatten Sie jedoch das Glück, dass die Operator-Exponentiation in einer geschlossenen Form erhalten werden konnte. Normalerweise ist die Situation leider nicht so günstig. Für bestimmte Aufgaben kann es jedoch ausreichen, die Exponentiation bis zu einem bestimmten Grad der Approximation zu bestimmen. Die Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) Formel ist ein wichtiges Werkzeug für solche Fälle. Um dies in Perspektive zu setzen, könnte man sich daran erinnern, dass für Zahlen gilt, dass $e^{a+b} = e^a e^b$.

a) Für Operatoren gilt normalerweise $e^{A+B} \neq e^A e^B$. Die allgemeine Ausnahme ist, wenn zwei Operatoren kommutieren. Betrachten Sie vor der Behandlung der BCH-Formel den kommutativen Fall. *Zeigen Sie, dass wenn* $[A, B] = 0$, *dann* $e^{A+B} = e^A e^B$. Beachten Sie, dass *nicht* angenommen wird, dass A und B diagonalisierbar sind, sondern nur, dass sie kommutieren.

Hinweis: Erweiterungen sind Ihre Freunde. Da A und B kommutieren, können Produkte in eine für die Rechnung angenehme Form gebracht werden. Denken Sie insbesondere an $(A + B)^n$. Wie würde die Erweiterung dieses Ausdrucks aussehen, wenn A und B reelle Zahlen wären? Wie verhält sich dies im Vergleich zum Fall, in dem A und B kommutierende Operatoren sind?

(3 points)

b) Nun wenden Sie sich dem Fall von zwei nicht notwendigerweise kommutierenden Operatoren und der BCH-Formel zu.[1] *Zeigen Sie, dass*

$$e^{tA} e^{tB} = e^{tA+tB+\frac{t^2}{2}[A,B]} + O(t^3).$$

Hinweis: Erweitern Sie beide Seiten bis zur zweiten Ordnung in t und vergleichen Sie die Terme.

(3 points)

[1] Die allgemeinere BCH-Erweiterung ist eine unendliche Summe von verschachtelten Kommutatoren. Hier aber wird diese Erweiterung bereits nach der zweiten Ordnung beendet.