Heiko Dumlich, Max Hoffmann 10. Mai 2007

3 Übungsblatt Atom- und Molekülphysik

3.1 (Erwartungswerte und Mittelwerte)

Es sind die Erwartungswerte und Mittelwerte zu berechnen und zu vergleichen.

Wir definieren den Erwartungswert als:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_a^b xf(x)\,dx}{\int_a^b f(x)\,dx}$$

Den Mittelwert definieren wir als:

$$\bar{x} = \frac{1}{(b-a)}\int_a^b x\,dx$$

bzw. für die diskreten Fälle (da wir dort $b-a$ nicht darstellen können) als:

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n.$$

a)

Es ist die Funktion $f(x) = x$ auf dem Intervall $[0, b]$ gegeben. Wir normieren, um die Integrationsgrenze zu erhalten:

$$\begin{aligned}\int_0^b x\,dx &= 1\\ \left[\frac{1}{2}x^2\right]_0^b &= 1\\ b &= \sqrt{2}.\end{aligned}$$

Wir können nun den Erwartungswert berechnen:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_0^{\sqrt{2}} x^2\,dx}{\int_0^{\sqrt{2}} x\,dx} = \frac{\frac{1}{3}\left[x^3\right]_0^{\sqrt{2}}}{\frac{1}{2}\left[x^2\right]_0^{\sqrt{2}}} = \frac{\frac{1}{3}2^{\frac{3}{2}}}{1} = \frac{1}{3}2^{\frac{3}{2}} = \sqrt{\frac{8}{9}} = \frac{2}{3}b.$$

Für den Mittelwert erhalten wir:

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^{\sqrt{2}} x\,dx = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{2}x^2\right]_0^{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}} = \frac{b}{2}.$$

Der Vergleich zeigt, dass Erwartungswert und Mittelwert sich stark unterscheiden.

b)

Es ist gegeben $g(x) = c$ auf dem Intervall $[a, b]$, die Normierung liefert:

$$\begin{aligned}\int_a^b g(x)\; dx &= 1 \\ c &= \frac{1}{(b-a)}.\end{aligned}$$

Wir erhalten also für den Erwartungswert:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_a^b xc\,dx}{\int_a^b c\,dx} = \frac{\int_a^b x\,dx}{\int_a^b 1\,dx} = \frac{\left[\frac{1}{2}x^2\right]_a^b}{(b-a)} = \frac{1}{2}\frac{b^2-a^2}{b-a} = \frac{b+a}{2}.$$

Der Mittelwert liefert:

$$\bar{x} = \frac{1}{(b-a)}\int_a^b x\,dx = \frac{1}{(b-a)}\left[\frac{1}{2}x^2\right]_a^b = \frac{b+a}{2}.$$

Der Erwartungswert und der Mittelwert stimmen also für diese Funktion überein, dies war auch zu erwarten, da wir eine konstante Funktion betrachtet haben.

c)

Wir betrachten die diskrete Verteilung $h(1) = 1$, $h(2) = 2$, $h(3) = 1$, sonst null. Wir können dies durch Delta-Funktionen beschreiben mit $h(x) = \delta(x-1) + 2\delta(x-2) + \delta(x-3)$. Wir berechnen den Erwartungswert:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xh(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} h(x)\,dx} = \frac{1\cdot 1 + 2\cdot 2 + 1\cdot 3}{1+2+1} = \frac{8}{4} = 2.$$

Der Mittelwert liefert:

$$\bar{x} = \frac{1}{3}\sum_{n=1}^{3} x_n = \frac{1+2+3}{3} = \frac{6}{3} = 2.$$

Auf Grund der symmetrischen Anordnung der Verteilung ist der Erwartungswert dem Mittelwert wie erwartet gleich.

d)

Wir betrachten die diskrete Verteilung $j(1) = 1$, $j(2) = 2$, $j(4) = 1$, sonst null. Dies lässt sich in Form von Delta-Funktionen durch $j(x) = \delta(x-1) + \delta(x-2) + \delta(x-4)$ ausdrücken. Wir berechnen den Erwartungswert und erhalten:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xj(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} j(x)\,dx} = \frac{1\cdot 1 + 2\cdot 2 + 1\cdot 4}{1+2+1} = \frac{9}{4}.$$

Für den Mittelwert erhalten wir:

$$\bar{x} = \frac{1}{3}\sum_{n=1}^{3} x_n = \frac{1+2+4}{3} = \frac{7}{3}.$$

Für den unsymmetrischen Fall liefert der Erwartungswert ein anderes Ergebnis als der Mittelwert, dies war zu erwarten.

Für den Aufgabenteil a) und d) erhalten wir also ein unterschiedliches Ergebnis für Mittelwert und Erwartungswert.

3.2 (Eigenwerte hermitischer Operatoren)

Es ist zu zeigen, dass Eigenwerte hermitischer Operatoren stets reell sind. Wir betrachten den hermiteschen Operator $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ mit den Eigenwerten:

$$\begin{aligned} \hat{A}|a\rangle &= \alpha|a\rangle \\ \langle a|\hat{A}^\dagger &= \alpha^*. \end{aligned}$$

Es folgt also:

$$\alpha\langle a|a\rangle = \langle a|\alpha|a\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = \alpha^*\langle a|a\rangle.$$

Es gilt also $\alpha = \alpha^*$, wobei * die komplexe Konjugation bedeuten soll. Ein Wert kann aber nur dann gleich seinem komplex konjugierten Wert sein, wenn er reell ist. Somit müssen also die Eigenwerte eines hermiteschen Operators reell sein.

3.3 (Orthogonalität von Eigenfunktionen)

Es ist zu zeigen, dass Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten eines hermitischen Operators orthogonal sind. Wir betrachten den hermiteschen Operator $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ mit:

$$\begin{aligned} \hat{O}|a\rangle &= \alpha|a\rangle \\ \hat{O}|b\rangle &= \beta|b\rangle. \end{aligned}$$

Es gilt:

$$0 = \hat{O} - \hat{O} = \langle b|\hat{O} - \hat{O}|a\rangle = \langle b|\hat{O}^\dagger - \hat{O}|a\rangle = (b-a)\,\langle b|a\rangle.$$

Wobei der Beweis der Tatsache aus 2.) ausgenutzt wurde. Nun folgt also in der Fallunterscheidung: Für $b = a$:

$$0 = (a-a)\,\langle a|a\rangle$$

und für $b \neq a$ folgt:

$$0 = (b-a)\,\langle b|a\rangle,$$

da $(b-a) \neq 0$, muss also das Skalarprodukt 0 sein um die Gleichung zu erfüllen, aber das ist gerade die zu zeigende Orhtogonalität.