Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 14

Prof. Dr. Gerd Schön
Dr. Andreas Poenicke, Andreas Heimes

Lösungen zu Blatt 5
Besprechung 28.05.2014

---

1. Linearer und quadratischer Stark-Effekt (3 Punkte)

In Ortsdarstellung sind die beiden energetisch niedrigsten Zustände durch

$$\psi_i(x) \equiv \langle x|i\rangle = \begin{cases} A_i \sin(k_i[b+x]) & -b < x < 0 \\ B_i \sin(k_i[b-x]) & 0 \le x < b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $A_1 = B_1$ und $A_2 = -B_2$ gegeben.

(Auf Blatt 3 haben wir weiter gefunden, dass die Wellenvektoren durch $k_1 = \frac{\pi}{b}$ und $-\tan(k_2 b)/k_2 = \hbar^2/mv_0$ gegeben sind. Dies nur zur Vollständigkeit, für die weitere Aufgabe wird dies nicht benötigt.)

(a) [0,5 Punkte] Zu Beginn bestimmen wir die Koeffizienten A_i so, dass die Normierungsbedingung $\langle i|i\rangle$ für $i = 1, 2$ erfüllt ist. Dazu nutzen wir aus, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |x\rangle\langle x| = 1$$

und schreiben

$$\langle i|i\rangle = \langle i| \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|\right) |i\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \langle i|x\rangle\langle x|i\rangle = \int_{-b}^{b} \mathrm{d}x\, \psi_i^*(x)\psi_i(x). \tag{1}$$

Setzen wir die Wellenfunktionen $\psi_i(x)$ dort ein, so erhalten wir

$$\int_{-b}^{b} \psi_i^*(x)\psi_i(x)\mathrm{d}x = |A_i|^2 \left(\int_{-b}^{0} \sin^2(k_i[b+x])\,\mathrm{d}x + \int_0^b \sin^2(k_i[b-x])\,\mathrm{d}x\right) \tag{2}$$

$$= 2|A_i|^2 \int_0^b \mathrm{d}x\ \sin^2(k_i[b-x]) \tag{3}$$

$$= |A_i|^2 \int_0^b \mathrm{d}x\ \big(1 - \cos(2k_i[b-x])\big) \tag{4}$$

$$= |A_i|^2 \left(b - \frac{1}{2k_i}\sin(2k_i b)\right) = 1 \tag{5}$$

$$\tag{6}$$

und damit $|A_i| = \left(b - \frac{1}{2k_i}\sin(2k_i b)\right)^{-1/2}$.

(b) Nun wird ein kleines elektrisches Feld $\vec{E} = \mathcal{E}\hat{e}_x$ angelegt. Der Hamilton-Operator ist dementsprechend gegeben durch

$$\langle x|\hat{\mathcal{H}}|x\rangle = H(x) = H_0(x) + q\mathcal{E}x. \tag{7}$$

Um die Matrixelemente $h_{ij} = \langle i|\hat{\mathcal{H}}|j\rangle$ zu berechnen, sehen wir zunächst, dass $\mathcal{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle$ und damit

$$\langle i|\hat{\mathcal{H}}_0|j\rangle = \delta_{ij}E_i, \tag{8}$$

wobei δ_{ij} das Kronecker-Delta ist. Wenn wir den gleichen Trick wie in Gl.(1) verwenden, so erhalten wir

$$h_{ij} = \langle i|\hat{\mathcal{H}}|j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\ \langle i|x\rangle\langle x|\hat{\mathcal{H}}|x'\rangle\langle x'|j\rangle \tag{9}$$

Der Hamilton-Operator ist diagonal in der Ortsdarstellung, d.h. $\langle x|\hat{\mathcal{H}}|x'\rangle = \delta(x - x')(H_0(x) + q\mathcal{E}\,x)$, d.h.

$$h_{ij} = \delta_{ij}E_i + \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_i^*(x)\big(q\mathcal{E}\,x\big)\psi_j(x). \tag{10}$$

Aufgrund der Symmetrie der Wellenfunktionen liefert das letzte Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_i^*(x)\big(q\mathcal{E}\,x\big)\psi_j(x) = 0 \quad \text{für} \quad i = j \tag{11}$$

Um h_{12} zu berechnen, nutzen wir den Hinweis auf dem Blatt und erhalten

$$q\mathcal{E}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \psi_1^*(x)\, x\, \psi_2(x) = 2q\mathcal{E}A_1^*A_2 \int_0^b \mathrm{d}x\, \sin(k_1[b-x])\sin(k_2[b-x])\, x \tag{12}$$

$$= 2q\mathcal{E}A_1^*A_2 \int_0^b \mathrm{d}x\, \sin(k_1 x)\sin(k_2 x)\,[b-x] = 2q\mathcal{E}A_1^*A_2\mathcal{C}(k_1,k_2) \equiv d\mathcal{E} \tag{13}$$

d bezeichnet man als Dipolmatrixelement. Für $v_0 \to \infty$ ist $k_1 \approx k_2$. Damit ergibt sich in erster Näherung

$$d \approx qb - 2qA_1^*A_1 \int_0^b \mathrm{d}x\, \sin(k_1 x)\sin(k_1 x)\, x = qb. \tag{14}$$

$$\tag{15}$$

h_{21} ergibt sich analog

$$q\mathcal{E}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_2^*(x)\, x\, \psi_1(x) = d^*\mathcal{E}. \tag{16}$$

Also ist $h_{12} = h_{21}^*$, der Hamilton-Operator ist Hermite'sch.
Schreiben wir nun den Hamilton-Operator in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle\}$,

$$\begin{pmatrix}\langle 1|1\rangle \\ \langle 2|1\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}\langle 1|2\rangle \\ \langle 2|2\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{17}$$

Diese Schreibweise ist im allgemeinen recht länglich, weswegen man manchmal schreibt

$$|1\rangle \doteq \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad |2\rangle \doteq \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \tag{18}$$

wobei das $\doteq$ indiziert, dass rechtsseitig des Gleichheitszeichens eine Darstellung des Zustandes ist (hier in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle\}$). Wir erhalten

$$\begin{pmatrix}\langle 1|\hat{\mathcal{H}}|1\rangle & \langle 1|\hat{\mathcal{H}}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{\mathcal{H}}|1\rangle & \langle 2|\hat{\mathcal{H}}|2\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}E_1 & d\,\mathcal{E} \\ d^*\,\mathcal{E} & E_2\end{pmatrix} \tag{19}$$

(c) Eigenwerte und Eigenvektoren [1 Punkt]
Die Eigenwerte dieser Matrix sind gegeben durch

$$E_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + |d\mathcal{E}|^2} \tag{20}$$

Die Eigenvektoren sind durch

$$\Big(\mathcal{H} - E_\pm\mathbf{1}\Big)\vec{v}_\pm = 0 \quad \text{und damit} \quad \vec{v}_+ = \begin{pmatrix} d\mathcal{E} \\ E_+ - E_1\end{pmatrix}, \vec{v}_- = \begin{pmatrix}E_- - E_2 \\ d^*\mathcal{E}\end{pmatrix} \tag{21}$$

gegeben. Die Eigenvektoren sind auch orthogonal:

$$\vec{v}_+^\dagger \cdot \vec{v}_- = d^*\mathcal{E}(E_- - E_2) + (E_+ - E_1)d^*\mathcal{E} = d^*\mathcal{E}\big((E_- + E_+) - (E_1 + E_2)\big) = 0$$

Betrachten wir nun die beiden Fälle auf dem Aufgabenblatt:

(i) **Quadratischer Stark-Effekt**: $|d|\mathcal{E} \ll E_2 - E_1$
In diesem Fall nutzen wir den Hinweis und entwickeln die Wurzel

$$\sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + |d\mathcal{E}|^2} = \frac{E_2 - E_1}{2}\sqrt{1 + \frac{4|d\mathcal{E}|^2}{(E_2 - E_1)^2}} \tag{22}$$

$$= \frac{E_2 - E_1}{2}\left(1 + \frac{2|d\mathcal{E}|^2}{(E_2 - E_1)^2} + \cdots\right) \tag{23}$$

$$\approx \frac{E_2 - E_1}{2} + \frac{|d\mathcal{E}|^2}{(E_2 - E_1)} \tag{24}$$

Die Eigenwerte von Grundzustand $(-)$ und ersten Angeregten $(+)$ sind damit näherungsweise gegeben durch

$$E_\pm = \begin{cases} E_2 + \frac{|d\mathcal{E}|^2}{E_2 - E_1} \\ E_1 - \frac{|d\mathcal{E}|^2}{E_2 - E_1}. \end{cases} \tag{25}$$

(ii) **Linearer Stark-Effekt**: $|d\mathcal{E}| \gg E_2 - E_1$
In diesem Fall erhalten wir

$$E_\pm = \begin{cases} \frac{E_1 + E_2}{2} + |d\mathcal{E}| \\ \frac{E_1 + E_2}{2} - |d\mathcal{E}|. \end{cases} \tag{26}$$

2. Funktionen von Operatoren (2,5 Punkte)

(a) [0,5 Punkte] Berechnet werden soll $e^{\hat{\sigma}_z}$, wobei $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ist.

Die Exponentialfunktion von Operatoren ist durch die Summe

$$e^{\hat{A}} = \sum_n \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

definiert. Damit erhält man

$$\begin{aligned} e^{\hat{\sigma}_z} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2!}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3!}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \dots \\ &= \begin{pmatrix} \sum_n \frac{1^n}{n!} & 0 \\ 0 & \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Bei der Berechnung der Terme findet man auch, dass gilt $\hat{\sigma}_z^{2n} = \mathbf{1}$ und $\hat{\sigma}_z^{2n+1} = \hat{\sigma}_z$.

(b) [1 Punkt] Es ist zu zeigen, dass für einen (zeitunabhängigen) Operator $\hat{A}$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{\hat{A}t} = \hat{A}e^{\hat{A}t} = e^{\hat{A}t}\hat{A} \quad \text{gilt.}$$

Wieder wird die Potenzreihe verwendet:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{\hat{A}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hat{A}^n n t^{n-1}}{n!} = \hat{A}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hat{A}^{n-1} t^{n-1}}{(n-1)!} = \hat{A}e^{\hat{A}}$$

da $[\hat{A}, \hat{A}] = [t, \hat{A}] = 0$ gilt auch $[e^{\hat{A}t}, \hat{A}] = 0$ und damit

$$\hat{A}e^{\hat{A}t} = e^{\hat{A}t}\hat{A}.$$

Weiter soll $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t})$ berechnet werden:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t}) = (\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{\hat{A}t})e^{\hat{B}t} + e^{\hat{A}t}(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{\hat{B}t}) = \hat{A}e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t} + e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{\hat{B}t} = \hat{A}e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t} + e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t}\hat{B}$$

(c) [1 Punkt] Es soll gezeigt werden, dass für einen beliebigen zeitabhängigen Operator $\hat{A}(t)$ im allgemeinen gilt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{A\hat{(}t)} \neq \frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t}e^{\hat{A}(t)}. \tag{27}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{\hat{A}(t)} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_n \frac{\hat{A}(t)^n}{n!} = \sum_n \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\hat{A}(t)^n}{n!}$$

weiter ist

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)^n &= \Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)\Big)\hat{A}(t)^{n-1} + \hat{A}(t)\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)\Big)\hat{A}(t)^{n-2} + \cdots + \hat{A}(t)^{n-1}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)\Big) \\ &= \sum_{m=0}^{n-1}\hat{A}(t)^m\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)\Big)\hat{A}(t)^{n-1-m}\end{aligned}$$

und damit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{\hat{A}(t)} = \sum_n \frac{1}{n!}\sum_{m=0}^{n-1}\hat{A}(t)^m\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)\Big)\hat{A}(t)^{n-1-m}.$$

Die beiden Seiten von Gl. (27) sind nur gleich wenn $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)$ und $\hat{A}(t)$ vertauschen also $[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t), \hat{A}(t)] = 0$ was nicht allgemein der Fall ist.

3. Hermite'sche Adjungation und Kommutatoralgebra (3 Punkte)

(a) [0.5 Punkte] Es sollen von den Operatoren $\hat{X}\hat{P}_x$ und $i[\hat{X}^2, \hat{P}_x]$ die Hermite'schen Adjungierten berechnet werden:

$$(\hat{X}\hat{P}_x)^\dagger = \hat{P}_x^\dagger\hat{X}^\dagger = \hat{P}_x\hat{X}$$

und

$$(i[\hat{X}^2, \hat{P}_x])^\dagger = -i(\hat{P}_x^\dagger(\hat{X}^2)^\dagger - (\hat{X}^2)^\dagger\hat{P}_x^\dagger) = i(\hat{X}^2\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X}^2) = i[\hat{X}^2, \hat{P}_x].$$

(b) [1 Punkt] Sei $\hat{G}$ ein Hermite'scher Operator. Zeigen Sie, dass dann für $\hat{F} = e^{i\hat{G}}$ die Beziehung $\hat{F}^\dagger = \hat{F}^{-1}$ gilt:

$$\hat{F}^\dagger = \sum_n\Big(\frac{i\hat{G}^n}{n!}\Big)^\dagger = \sum_n\frac{(-i\hat{G})^n}{n!} = e^{-i\hat{G}}$$

(c) [0.5 Punkte] Zeigen Sie, dass gilt $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.

$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

(d) [1 Punkt] Beweisen Sie, dass für $[[A, B], A] = 0$ die Beziehung $[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$ gilt ($n \in \mathbb{N}$).

Beweis durch vollständige Induktion:
Induktionsanfang:

$$n = 1: \qquad [A, B] = [A, B]$$

Induktionsvorraussetzung:

$$n = m: \qquad [\hat{A}^m, \hat{B}] = m\hat{A}^{m-1}[\hat{A}, \hat{B}]$$

Induktionsschritt:

$$\begin{aligned}n = m+1: \qquad [\hat{A}^{m+1}, \hat{B}] &= \hat{A}[\hat{A}^m, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}^m = \hat{A}[\hat{A}^m, \hat{B}] + \hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] \\ &= \hat{A}(m\hat{A}^{m-1}[\hat{A}, \hat{B}]) + \hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] \\ &= (m+1)\hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}]\end{aligned}$$

q.e.d.

Berechnen Sie damit $[\hat{P}, \hat{X}^n]$:

$$[\hat{P}, \hat{X}^n] = -n\hat{X}^{n-1}[\hat{X}, \hat{P}] = -in\hbar\hat{X}^{n-1}$$

4. Orts- und Impulsdarstellung (2 Punkte)

Zeigen Sie, ausgehend von der Impulsdarstellung

$$\hat{P}\,|p\rangle = p\,|p\rangle \quad \text{und} \quad u_p(x) \equiv \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar},$$

dass in der Ortsdarstellung der Impulsoperator $\hat{P}$ durch

$$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

darstellbar ist.

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{P}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}p\,\langle x|\hat{P}\,|p\rangle\langle p|\,\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\,\langle x|p|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\mathrm{d}\bar{x}\;p\,\langle x|p\rangle\,\langle p\,|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\,\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}p\mathrm{d}\bar{x}\;p\frac{1}{2\pi\hbar}e^{ipx/\hbar}e^{-ip\bar{x}/\hbar}\psi(\bar{x}) \\
&= \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}e^{ipx/\hbar}\int \mathrm{d}\bar{x}\Big(-\frac{\hbar}{i}\Big)\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}e^{-ip\bar{x}/\hbar}\Big)\psi(\bar{x}) \\
&= -\int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi i}e^{ipx/\hbar}\Big[\big(e^{-ip\bar{x}/\hbar}\psi(\bar{x})\big)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \mathrm{d}\bar{x}e^{-ip\bar{x}/\hbar}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}\psi(\bar{x})\Big)\Big] \\
&= \frac{1}{i}\int \mathrm{d}\bar{x}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}\psi(\bar{x})\Big)\int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi}e^{ip(x-\bar{x})/\hbar} = \frac{1}{i}\int \mathrm{d}\bar{x}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}\psi(\bar{x})\Big)\hbar\delta(x-\bar{x}) \\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)
\end{aligned}$$