Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 15

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Andreas Poenicke, Patrik Hlobil

Blatt 1 (Lösungen)
Abgabe: 21.04.2015, Besprechung: 22.04.2015

---

1. Schrödingergleichung für ein freies relativistisches Teilchen (5 Punkte)

Quadrieren der relativistischen Energie-Impuls Beziehung führt zu:

$$E^2 = m^2c^4 + c^2p^2 \tag{1}$$

Wir möchten nun eine Wellengleichung finden der Form

$$A\,\frac{\partial^n \psi(x,t)}{\partial t^n} + B(x)\,\psi(x,t) = C\,\frac{\partial^m \psi(x,t)}{\partial x^m} \tag{2}$$

welche wellenartige Lösungen

$$\psi(x,t) \propto \exp\left(ikx - i\omega t\right) \tag{3}$$

besitzt. Zudem sollen der Wellenvektor k und die Frequenz ω die de Broglie Relationen

$$p = \hbar k \quad \text{and} \quad E = \hbar\omega \tag{4}$$

erfüllen. Einsetzen der Wellenfunktion (3) führt zur Gleichung

$$A\,(i\omega)^n + B(x) = C\,(-ik)^m \quad \xrightarrow{(4)} \quad A(iE/\hbar)^n + B(x) = C(-ip/\hbar)^m \tag{5}$$

Im Vergleich zu (1) setzen wir $n = m = 2$ wodurch:

$$-A(E/\hbar)^2 + B(x) = -C(p/\hbar)^2 \qquad \to \qquad E^2 = \hbar^2\frac{B(x)}{A} + \frac{C}{A}p^2 \tag{6}$$

Der Vergleich mit (4) liefert uns

$$\begin{aligned} m^2c^4 &= \hbar^2\frac{B(x)}{A} \\ c^2 &= \frac{C}{A} \end{aligned} \tag{7}$$

Wir wählen nun $C = 1$ (da die Wellenfunktion nur bis auf eine multiplikative Konstante definiert ist) und bekommen somit

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{c^2} \\ B(x) &= \frac{m^2c^4A}{\hbar^2} = \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \end{aligned} \tag{8}$$

Unsere Wellenfunktion ist also;

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi\left(x,t\right)}{\partial t^2} + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi\left(x,t\right) = \nabla^2\psi\left(x,t\right). \tag{9}$$

Diese Wellenfunktion wird auch Klein-Gordon Gleichung genannt.

2. Wellenfunktion im Potential(7 Punkte)

(a) Die Wellenfunktion ist korrekt auf 1 normiert:

$$|\psi|^2 = \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x)\psi(x) = \int \mathrm{d}x\ |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\int \mathrm{d}x\, e^{-x^2/d^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int \mathrm{d}x\, e^{-x^2} = 1 \quad (10)$$

wobei wir das auftauchende Gaußintegral bereits auf dem 1. Übungsblatt berechnet haben.

(b) Es gilt

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x)\, x\, \psi(x) = \int \mathrm{d}x\ |\psi\,(x)|^2\, x = \frac{1}{\pi^{1/2}d}\int \mathrm{d}x\ \exp\Big(-\frac{x^2}{d^2}\Big)x = 0 \quad (11)$$

aus Symmetriegründen. Zudem gilt

$$\langle \hat{x}^2 \rangle \quad = \quad \int \mathrm{d}x\, |\psi(x)|^2 x^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\int \mathrm{d}x\, x^2 \exp\Big(-\frac{x^2}{d^2}\Big) = \frac{d^2}{2} \quad (12)$$

sodass:

$$\langle (\Delta\hat{x}) \rangle = \frac{d}{\sqrt{2}} \quad (13)$$

Die Erwartungswerte für $\hat{p} = \hbar\partial_x/i$ sind analog:

$$\langle \hat{p} \rangle = \hbar k, \qquad \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2 \qquad \text{sowie} \qquad \langle (\Delta\hat{p}) \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}d} \quad (14)$$

Wir bekommen somit

$$\langle (\Delta\hat{x}) \rangle\, \langle (\Delta\hat{p}) \rangle = \frac{\hbar}{2}. \quad (15)$$

sodass der oben beschriebene Zustand nach der Heisenberg'schen Unschärferelation ein Zustand minimaler Unschärfe ist.

(c) Betrachte die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V\,(x)\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \quad (16)$$

mit dem Ansatz $\psi(x,t) = \psi\,(x)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ erhalten wir die stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\,(x)\,\psi\,(x) = E\psi\,(x)\,. \quad (17)$$

Für die Wellenfunktion mit $k = 0$ gilt offensichtlich

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{x^2 - d^2}{d^4}\psi \quad (18)$$

und damit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{x^2 - d^2}{d^4} + V\,(x) = E \qquad \rightarrow \qquad V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{x^2}{d^4} + E - \frac{\hbar^2}{2md^2}\,. \quad (19)$$

Das Potential ist offensichtlich eine Parabel und beschreibt daher einen harmonischen Oszillator. Wenn wir den Nullpunkt der Energie $V(x = 0) = 0$ setzen, gilt offensichtlich:

$$V\,(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{x^2}{d^4} \quad (20)$$

und wir bekommen die Energie (relativ zur Energie am Boden der Parabel):

$$E = \frac{\hbar^2}{2md^2} \quad (21)$$

Klassisch beschreiben wir das Potential eines harmonischen Oszillator als

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2 \tag{22}$$

mit der Federkonstanten k. Die Federkonstante unseres Potentials (20) ist

$$k = \frac{\hbar^2}{md^4} \tag{23}$$

und die zugehörige klassische Kreisfrequenz ist gegeben durch:

$$\omega_{\text{class}} = \sqrt{k/m} = \frac{\hbar}{md^2} \tag{24}$$

Die Energie des Potentials ist somit über die klassische Kreisfrequenz gegeben durch

$$E = \frac{\hbar\omega_{\text{class}}}{2}. \tag{25}$$

Der Zustand $\psi(x)$ für $k = 0$ beschreibt den Grundzustand eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators. Dieser besitzt nicht die Energie 0, sondern die Vakuumenergie $E_0 = \hbar\omega_{\text{class}}/2$, da das Teilchen nicht in absoluter Ruhelage sein kann durch die Heisenberg'sche Unschärferelation.
Der Zustand mit $k \neq 0$

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp\left(ikx - \frac{x^2}{2d^2}\right) = \frac{e^{-\frac{k^2d^2}{2}}}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x - ikd^2)^2}{2d^2}\right) \tag{26}$$

beschreibt einen sogenannten kohärenten Zustand (auch Glauber-Zustand). Wir werden die kohärenten Zustände auf einem späteren Übungsblatt genauer behandeln.

3. Matrixexponentialfunktion (8 Punkte)

(a) Definiere zunächst

$$x = \max|A_{ij}| \tag{27}$$

als das größte Matrixelement von $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Die Zahlenfolge

$$B_{ij}^{(K)} := \left|\left[\sum_{k=0}^{K} \frac{A^k}{k!}\right]_{ij}\right| \tag{28}$$

definiert das i, j Matrixelement der Matrixexponentialfunktion e^A bis zur K-ten Reihenentwicklung. e^A konvergiert also, wenn jedes Element $\lim B_{ij}^{(K)}$ konvergiert. Betrachte also

$$B_{ij}^{(K)} := \left|\left[\sum_{k=0}^{K} \frac{A^k}{k!}\right]_{ij}\right| \leq \sum_{k=0}^{K} \frac{\left|[A^k]_{ij}\right|}{k!} \tag{29}$$

wobei wir hier die Dreiecksungleichung verwendet haben. Wir können nun abschätzen

$$\begin{aligned} \left|[A^k]_{ij}\right| &= \left|\sum_{l_1,\ldots,l_{k-1}=0}^{n} A_{i,l_1}A_{l_1,l_2}\ldots A_{l_{k-1},j}\right| \leq \sum_{l_1,\ldots,l_{k-1}=0}^{n} \left|A_{i,l_1}A_{l_1,l_2}\ldots A_{l_{k-1},j}\right| \\ &= \sum_{l_1,\ldots,l_{k-1}=0}^{n} \underbrace{\left|A_{i,l_1}\right|}_{\leq x}\left|A_{l_1,l_2}\right|\ldots\left|A_{l_{k-1},j}\right| \leq \sum_{l_1,\ldots,l_{k-1}=0}^{n} x^k = n^{k-1}x^k \end{aligned} \tag{30}$$

Damit folgt also:

$$B_{ij}^{(K)} \leq \sum_{k=0}^{K} \frac{\left|[A^k]_{ij}\right|}{k!} \leq \sum_{k=0}^{K} \frac{n^{k-1}x^k}{k!} = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{K} \frac{(n\cdot x)^k}{k!} \xrightarrow{K\to\infty} \frac{1}{n}e^{n\cdot x} \tag{31}$$

Damit konvergiert jede Teilfolge und die Definition der Matrixexponentialfunktion ist konvergent für jede beliebige Matrix $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$.

(b) Betrachte die Ableitung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}e^{\lambda A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^k}{k!} = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{k\cdot\lambda^{k-1}A^k}{k!} = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\lambda^{k-1}A^k}{(k-1)!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^{k+1}}{k!} \tag{32}$$

Offensichtlich gilt nun

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}e^{\lambda A} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^{k+1}}{k!} = A\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^k}{k!} = Ae^A \tag{33}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}e^{\lambda A} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^{k+1}}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k A^k}{k!}A = e^A A \tag{34}$$

(c) Benutze das Cauchy Produkt

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k\right)\left(\sum_{l=0}^{\infty}\beta_l\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k}\alpha_l\beta_{k-n} \tag{35}$$

um umzuformen

$$e^A e^B = \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{A^k}{k!}\right)\left(\sum_{l=0}^{\infty}\frac{B^l}{l!}\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k}\frac{A^l}{l!}\frac{B^{k-l}}{(k-l)!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}\binom{k}{l}A^l B^{k-l} \tag{36}$$

Zudem gilt

$$e^{A+B} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(A+B)^k \tag{37}$$

Damit wir (37) zu (36) umformen können, müssen wir verlangen das die Matrix A und B miteinander kommutieren

$$AB = BA \qquad \rightarrow \qquad [A,B] = 0 \tag{38}$$

Dann gilt nämlich der binomische Lehrsatz für (37)

$$e^{A+B} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(A+B)^k = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}\binom{k}{l}A^l B^{k-l} \overset{(36)}{=} e^A e^B \tag{39}$$

(d) Sei U die Matrix, welche die hermitesche Matrix $C^\dagger = C$ diagonalisiert, dann gilt

$$C_{\text{diag}} = U^\dagger C U = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n) \tag{40}$$

wobei $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ die reellen Eigenwerte von C sind[1]. Betrachte nun:

$$\begin{aligned}
U^\dagger e^C U &= U^\dagger\sum_{k=0}^{\infty}\frac{C^k}{k!}U = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{U^\dagger C^k U}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\overbrace{U^\dagger C\underbrace{UU^\dagger}_{\mathbb{1}}C\underbrace{UU^\dagger}_{\mathbb{1}}C\ldots\underbrace{UU^\dagger}_{\mathbb{1}}CU}^{k\text{-mal } C} \\
&\overset{(40)}{=} \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}C_{\text{diag}}^k = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \ldots & \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & \lambda_n\end{pmatrix}^k = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\begin{pmatrix}\lambda_1^k & 0 & \ldots & \\ 0 & \lambda_2^k & 0 & \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & \lambda_n^k\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda_1^k}{k!} & 0 & \ldots & \\ 0 & \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda_2^k}{k!} & 0 & \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda_n^k}{k!}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}e^{\lambda_1} & 0 & \ldots & \\ 0 & e^{\lambda_2} & 0 & \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & e^{\lambda_n}\end{pmatrix} \\
&= \text{diag}(e^{\lambda_1}, e^{\lambda_2}, \ldots, e^{\lambda_n}) = (e^C)_{\text{diag}}
\end{aligned} \tag{41}$$

[1]Die Spalten der Matrix U sind natürlich gerade die normierten und orthogonalisierten Eigenvektoren von C.

(e)

- Berechne zunächst

$$\sigma_x^2 = \mathbb{1} \tag{42}$$

Damit folgt

$$\sigma_x^k = \begin{cases} \sigma_x & \text{für } k \text{ ungerade} \\ \mathbb{1} & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases} \tag{43}$$

Somit folgt für die Matrixexponentialfunktion

$$\begin{aligned} e^{\sigma_x} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sigma_x^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sigma_x^{2k+1}}{(2k+1)!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sigma_x^{2k}}{(2k)!} \\ &= \sigma_x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} + \mathbb{1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} = \sigma_x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1^{2k+1}}{(2k+1)!} + \mathbb{1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1^{2k}}{(2k)!} \\ &= \sigma_x \cdot \sinh(1) + \mathbb{1} \cosh(1) = \begin{pmatrix} \cosh(1) & \sinh(1) \\ \sinh(1) & \cosh(1) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{44}$$

- Betrachte nun die Eigenwerte und Eigenvektoren von σ_x:

$$\det\left(\sigma_x - \lambda\mathbb{1}\right) = \lambda^2 - 1 \overset{!}{=} 0 \tag{45}$$

und damit

$$\lambda_1 = 1 \qquad \lambda_2 = -1 \tag{46}$$

mit zugehörigen Eigenvektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{47}$$

Die Diagonalisierungsmatrix ist somit

$$U = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{48}$$

Die diagonalisierte Matrixexponentialfunktion ist nach (41) gegeben durch:

$$(e^{\sigma_x})_{\text{diag}} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix} \tag{49}$$

und unter Ausnutzung von (41) finden wir

$$\begin{aligned} e^{\sigma_x} &= U(e^{\sigma_x})_{\text{diag}} U^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e + e^{-1} & e - e^{-1} \\ e - e^{-1} & e + e^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(1) & \sinh(1) \\ \sinh(1) & \cosh(1) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{50}$$