KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I   SS 17

PROF. DR. JÖRG SCHMALIAN
MATTHIAS HECKER, MARKUS KLUG

Blatt 0
Besprechung 26.04.2017

---

1. Skalarprodukt im ℓ^2 und $\mathcal{L}^2$

(a) Wir zeigen nacheinander mit $\mathbf{a}\,,\mathbf{b}\,,\mathbf{c} \in \mathbb{C}^n$ und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$:

- (Sesqui-)Linearität:

$$\langle\, \mathbf{a} \mid \lambda_1 \mathbf{b} + \lambda_2 \mathbf{c}\,\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i^*(\lambda_1 b_i + \lambda_2 c_i) = \lambda_1 \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i + \lambda_2 \sum_{i=1}^{n} a_i^* c_i = \lambda_1 \langle\, \mathbf{a} \mid \mathbf{b}\,\rangle + \lambda_2 \langle\, \mathbf{a} \mid \mathbf{c}\,\rangle$$

$$\langle\, \lambda_1 \mathbf{a} + \lambda_2 \mathbf{b} \mid \mathbf{c}\,\rangle = \sum_{i=1}^{n} (\lambda_1 a_i + \lambda_2 b_i)^* c_i = \lambda_1^* \sum_{i=1}^{n} a_i^* c_i + \lambda_2^* \sum_{i=1}^{n} b_i^* c_i = \lambda_1^* \langle\, \mathbf{a} \mid \mathbf{c}\,\rangle + \lambda_2^* \langle\, \mathbf{b} \mid \mathbf{c}\,\rangle$$

- Hermitizität:

$$\langle\, \mathbf{a} \mid \mathbf{b}\,\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i = \Big(\sum_{i=1}^{n} b_i^* a_i\Big)^* = \langle\, \mathbf{b} \mid \mathbf{a}\,\rangle^* \tag{1}$$

- Positive Definitheit:

$$\langle\, \mathbf{a} \mid \mathbf{a}\,\rangle := ||\, \mathbf{a}\, ||^2 = \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 \geq 0 \tag{2}$$

(b) Zu berechnen sind jeweils die Reihen

$$||\, \mathbf{a}\, ||^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} = e$$

$$||\, \mathbf{b}\, ||^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |b_i|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2} = \frac{\pi^2}{6} \tag{3}$$

$$||\, \mathbf{c}\, ||^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = \sum_{i=0}^{\infty} \left|q^2\right|^i \overset{0<|q|<1}{=} \frac{1}{1-|q|^2} \tag{4}$$

Da alle Reihen existieren und gegen einen endlichen Wert konvergieren, gilt dass $a_n, b_n, c_n \in \ell^2$.

(c) Wir zeigen nacheinander mit $\psi(x), \phi(x), \chi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$:

- (Sesqui-)Linearität:

$$\begin{aligned}\langle\, \psi \mid \lambda_1 \phi + \lambda_2 \chi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\big[\lambda_1 \phi(x) + \lambda_2 \chi(x)\big] = \lambda_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\phi(x) + \lambda_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\chi(x) \\ &= \lambda_1 \langle\, \psi \mid \phi \rangle + \lambda_2 \langle\, \psi \mid \chi \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle\, \lambda_1 \psi + \lambda_2 \phi \mid \chi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \big[\lambda_1 \psi(x) + \lambda_2 \phi(x)\big]^* \chi(x) = \lambda_1^* \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\chi(x) + \lambda_2^* \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^*(x)\chi(x) \\ &= \lambda_1^* \langle\, \psi \mid \chi \rangle + \lambda_2^* \langle\, \phi \mid \chi \rangle\end{aligned}$$

- Hermitizität:

$$\langle\, \psi \mid \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\phi(x) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^*(x)\psi(x)\right)^* = \langle\, \phi \mid \psi \rangle^* \tag{5}$$

- Positive Definitheit:

$$\langle\, \psi \mid \psi \rangle := ||\, \psi\, ||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 \geq 0 \tag{6}$$

(d) Betrachte eine beliebige Funktion $f(x) \in \mathcal{L}^2$. Unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation können wir diese in die Basis $\{P_n\}$ entwickeln:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \underbrace{\delta(x - x')}_{\sum_{n=0}^{\infty} P_n^*(x')P_n(x)} f(x') = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx'\, P_n^*(x') f(x')}_{=\langle\, P_n | f \rangle} P_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\langle\, P_n \mid f \rangle}_{a_n} P_n(x) \tag{7}$$

Diese Abbildung ist ein Isomorphismus, denn bei fester Basiswahl (z.B. Entwicklung in Fourierreihe, Hermite-Polynome, etc.) sind die Entwicklungskoeffizienten eindeutig gegeben und es gilt, dass

$$f(x) \in \mathcal{L}^2 \Leftrightarrow \infty > ||\, f\, ||^2 = \int dx\, |f(x)|^2 = \sum_{n,m=0}^{\infty} a_n^* a_m \underbrace{\int dx\, P_n^*(x) P_m(x)}_{\delta_{n,m}} = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 \Leftrightarrow (a_n) \in \ell^2 \tag{8}$$

Man kann die (a_n) nun als unendlich dimensionalen Vektor

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x) = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \end{pmatrix}_{\{P_0, P_1, \dots\}} \tag{9}$$

in der Basis der Basisfunktionen $\{P_n\}$ ansehen.

(e) Hier ist eine partielle Integration und die Eigenschaft quadratintegrabler Funktionen anzuwenden, dass diese für $\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = 0$, um Normierbarkeit zu gewährleisten:

$$\langle f | (i\nabla) g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x) \left(i \frac{d}{dx} g(x) \right) \tag{10}$$

$$= -i \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{d}{dx} f^*(x) \right) g(x) + i f^*(x) g(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} \tag{11}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(i \frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) = \langle (i\nabla) f | g \rangle \tag{12}$$

2. Erwartungswerte einer gaussförmigen Wellenfunktion

(a) Wir berechnen

$$||\, \psi\, ||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \tag{13}$$

Substituiere $z = \frac{x - x_0}{\sqrt{2\sigma^2}}$ sodass

$$||\, \psi\, ||^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} \tag{14}$$

Das Integral über e^{-x^2} kann mit Hilfe von Polarkoordinaten berechnet werden über

$$\begin{aligned}\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2}\right)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-y^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dxdy\, e^{-(x^2+y^2)} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} dr\, re^{-r^2} \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr\, re^{-r^2} = -\pi\big[e^{-r^2}\big]_0^{\infty} = \pi \end{aligned} \tag{15}$$

als

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = \sqrt{\pi} \tag{16}$$

Also folgt

$$||\,\psi\,||^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = 1 \quad \checkmark \tag{17}$$

(b) Wir berechnen nun

$$\begin{aligned}\langle\,\hat{x}\,\rangle = \langle\,\psi \mid \hat{x} \mid \psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x \cdot |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\,(y+x_0)\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, y\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}_{=0} + x_0 \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}_{1} \\ &= x_0 \end{aligned} \tag{18}$$

(c) Neben $\langle\,\hat{x}\,\rangle = x_0$ benötigen wir nun noch

$$\begin{aligned}\langle\,\hat{x}^2\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\,(y+x_0)^2\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, y^2\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} + 2x_0 \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, y\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}_{=0} + x_0^2 \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}_{=1} \\ &= x_0^2 + \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, y \cdot \left(y\, e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}\right) \overset{\text{part. Int.}}{=} x_0^2 + \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, \sigma^2 e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} \\ &= x_0^2 + \sigma^2 \end{aligned} \tag{19}$$

sodass

$$\Delta X = \sqrt{\langle\,\hat{x}^2\,\rangle - \langle\,\hat{x}\,\rangle^2} = \sqrt{x_0^2 + \sigma^2 - x_0^2} = \sigma \tag{20}$$

(d) Der mittlere Impuls des Teilchens ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle\,\hat{p}\,\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \frac{\hbar}{i} \partial_x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \frac{\hbar}{i} \frac{x-x_0}{2\sigma^2} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \\ &= -\frac{\hbar/i}{2\sigma^2\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, ye^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} = 0 \end{aligned} \tag{21}$$

(e) Wir benötigen nun:

$$\begin{aligned}\langle\,\hat{p}^2\,\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i}\partial_x\right)^2 \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \partial_x^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \\ &\overset{\text{part. Int}}{=} \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\partial_x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^4} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}_{\overset{(19)}{=}\sigma^2} \\ &= \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \end{aligned} \tag{22}$$

sodass

$$\Delta P = \sqrt{\langle\, \hat{p}^2 \,\rangle - \langle\, \hat{p} \,\rangle^2} = \frac{\hbar}{2\sigma} \tag{23}$$

Das Unschärfeprodukt

$$\Delta X \cdot \Delta P = \sigma \cdot \frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2} \tag{24}$$

ist dann minimal für ein Gauss-Wellenpaket nach der Heisenberg'schen Unschärferelation:

$$\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \tag{25}$$