Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 17

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Matthias Hecker, Markus Klug

Blatt 3
Abgabe: 15.05.2017, 12:00h; Bespr.: 17.05.2017

---

1. Wellenfunktion eines harmonischen Oszillators (10 Punkte, Quiz)

(a) (1 Punkt) Mit der Normierungsbedingung $\int dx|\psi(x)|^2 = 1$ findet man

$$\begin{aligned}\int dx|\psi(x)|^2 &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{d^2}} && (1)\\ &= A^2\sqrt{\pi}d && (2)\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$A^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi d^2}} \tag{3}$$

(b) (3 Punkte) ψ eingesetzt in die SG ergibt

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x,t) = E\psi(x,t) &= \left(\frac{\hbar^2}{2md^2} - \frac{\hbar^2}{2md^4}x^2 + V(x)\right)\psi(x,t)\\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2md^2} - \frac{\hbar^2}{2md^4}x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x,t)\\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2md^2} - x^2\left(\frac{\hbar^2}{2md^4} - \frac{m\omega^2}{2}\right)\right)\psi(x,t) && (4)\end{aligned}$$

Die Energie und die Längenskala ergeben sich zu $E = \frac{\hbar\omega}{2}$ und $d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

(c) (3 Punkte) Die Erwartunswerte ergeben sich zu

$$\begin{aligned}\langle\hat{T}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t) && (5)\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi(x,t)^*\left(-\frac{1}{d^2} + \frac{x^2}{d^4}\right)\psi(x,t) && (6)\\ &= \frac{\hbar^2}{2md^2} - \frac{\hbar^2}{2md^4}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-\frac{x^2}{d^2}} && (7)\\ &= \frac{\hbar^2}{2md^2} - \frac{\hbar^2}{2md^4}\frac{d^2}{2} && (8)\\ &= \frac{\hbar\omega}{4} && (9)\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\langle\hat{V}(x)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x,t)\frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x,t) && (10)\\ &= \frac{\hbar\omega}{4} && (11)\end{aligned}$$

sodass $\langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle = E$.

(d) (3 Punkte) Zur Anwendung des Ehrenfesttheorems auf $\hat{T}$ und $\hat{V}$ muss jeweils der Kommutator $[\hat{p}^2, \hat{x}^2]$ ausgewertet werden. Es ist bekannt, dass für den Orts- und Impulsoperator die kanonische Vertauschungsrelation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ gilt. Damit folgt

$$\begin{aligned}
[\hat{p}^2, \hat{x}^2] &= \hat{p}[\hat{p}, \hat{x}^2] + [\hat{p}, \hat{x}^2]\hat{p} && (12)\\
&= \hat{p}[\hat{p}, \hat{x}]\hat{x} + \hat{p}\hat{x}[\hat{p}, \hat{x}] + \hat{x}[\hat{p}, \hat{x}]\hat{p} + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{x}\hat{p} && (13)\\
&= -2i\hbar(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) && (14)\\
&= -2i\hbar(2\hat{x}\hat{p} - i\hbar) && (15)
\end{aligned}$$

Somit ist zusätzlich der Erwartungswert $\langle\hat{x}\hat{p}$ zu berechnen

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\hat{p}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t) x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) && (16)\\
&= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t) \frac{x^2}{d^2} \psi(x) && (17)\\
&= \frac{i\hbar}{2} && (18)
\end{aligned}$$

Somit folgt, dass

$$\begin{aligned}
\langle[\hat{p}^2, \hat{x}^2]\rangle &= \frac{2\hbar}{i}(2\langle\hat{x}\hat{p}\rangle - i\hbar) && (19)\\
&= 0 && (20)
\end{aligned}$$

Dementsprechend folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{T}\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{T}]\rangle && (21)\\
&= \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{2m} \langle[\hat{x}^2, \hat{p}^2]\rangle = 0 && (22)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{V}(x)\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{V}(x)]\rangle && (23)\\
&= \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{2m} \langle[\hat{p}^2, \hat{x}^2]\rangle = 0 && (24)
\end{aligned}$$

2. Zeitabhängige Erwartungswerte für Wellenfunktionen im Potentialtopf (pro Teilaufgabe 1 Punkt, gesamt 4 Punkte, schriftlich)

(a) Der Erwartungswert wird auf die übliche Weise berechnet

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\rangle(t) &= \int dx\, \psi^*(x,t)\, \hat{A}\, \psi(x,t) && (25)\\
&= \int dx \sum_{mn} b_n^* \varphi_n^*(x)\, \hat{A}\, b_m \varphi_m(x) && (26)\\
&= \sum_{mn} b_n^* b_m\, \langle n|\hat{A}|m\rangle\, e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} && (27)
\end{aligned}$$

wobei die Matrixelemente gegeben sind durch $\langle m|\hat{A}|n\rangle = \int dx\, \varphi_m^*(x)\hat{A}\varphi_n(x)$. Als nächstes wird die Summe über n und m aufgeteilt in $n \neq m$, wobei $n < m$, und $n = m$, sodass

$$\langle\hat{A}\rangle(t) \quad = \quad \sum_{n<m} \left(b_n^* b_m\, \langle n|\hat{A}|m\rangle\, e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} + b_m^* b_n\, \langle m|\hat{A}|n\rangle\, e^{-i(\omega_n - \omega_m)t} \right) + \sum_n |b_n|^2 \langle n|\hat{A}|n\rangle$$

Unter Verwendung, dass $b_n^* b_m$ und $\langle n|\hat{A}|m\rangle$ rein reel sind, gilt $b_n^* b_m = (b_n b_m^*)^* = b_n b_m^*$ und $\langle n|\hat{A}|m\rangle = (\langle m|\hat{A}|n\rangle)^* = \langle m|\hat{A}|n\rangle$, und der finale Ausdruck lautet

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = 2 \sum_{n<m} b_n^* b_m\, \langle n|\hat{A}|m\rangle\, \cos((\omega_n - \omega_m)t) + \sum_n |b_n|^2 \langle n|\hat{A}|n\rangle$$

(b) Die Entwicklungskoeffizienten werden durch Projektion auf die Anfangswellenfunktion berechnet, oder durch Zerlegung des angegebenen Ausdrucks in die Energieeigenfunktionen des Potentialtopfs unter Verwendung von $\sin 2x = 2\cos x \sin x$

$$\begin{aligned}
\psi(x,0) &= \sqrt{\frac{8}{5a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left(1+\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right) &\quad (28)\\
&= \sqrt{\frac{8}{5a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\sqrt{\frac{8}{5a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) &\quad (29)\\
&= \sqrt{\frac{8}{5a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\sqrt{\frac{2}{5a}}\sin\left(2\frac{\pi x}{a}\right) &\quad (30)\\
&= \frac{2}{\sqrt{5}}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\frac{1}{\sqrt{5}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(2\frac{\pi x}{a}\right) &\quad (31)
\end{aligned}$$

Somit lassen sich die Entwicklungskoeffizienten ablesen zu

$$b_1 = \frac{2}{\sqrt{5}} \quad (32)$$

$$b_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \quad (33)$$

(c) Die Matrixelemente werden berechnet aus

$$\langle n|\hat{x}|m\rangle = \int dx\,\psi_n(x)^* x \psi_m(x) \quad (34)$$

Man sieht direkt auf Grund der Inversionssymmetrie, dass nur das Matrixelement $\langle 1|\hat{x}|2\rangle$ berechnet werden muss. Alle anderen Matrixelemente verschwinden.

$$\begin{aligned}
\langle 1|\hat{x}|2\rangle &= \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(2\frac{\pi x}{a}\right) &\quad (35)\\
&= \frac{16a}{9\pi^2} = \langle 2|\hat{x}|1\rangle &\quad (36)
\end{aligned}$$

(d) Zur Bestimmung des Erwartungswertes muss lediglich noch die Energiedifferenz der ersten beiden Zustände berechnet werden

$$\omega_2 - \omega_1 = \frac{3}{2}\frac{\hbar\pi^2}{ma^2} \quad (37)$$

Somit findet man für den zeitabhängigen Erwartungswert

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle(t) &= 2\cdot\frac{2}{5}\cdot\frac{16a}{9\pi^2}\cdot\cos\left(\frac{3}{2}\frac{\hbar\pi^2}{ma^2}t\right) &\quad (38)\\
&= \frac{64a}{45\pi^2}\cos\left(\frac{3}{2}\frac{\hbar\pi^2}{ma^2}t\right) &\quad (39)
\end{aligned}$$

3. Rechnen mit Operatoren II (4 Punkte, mündlich)

(a) (1 Punkt) Betrachte hierfür den komplex konjugierten Ausdruck der entsprechende Erwartungswerte.

(i)

$$\begin{aligned}
\left(\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^* &= \left(\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right)^*\\
&= \langle\psi|\left([\hat{A},\hat{B}]\right)^\dagger|\psi\rangle\\
&= \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger|\psi\rangle\\
&= -\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle
\end{aligned}$$

Somit ist der betrachtete Erwartunswert rein imaginär.

(ii)

$$\begin{aligned}\left(\langle\{\hat{A},\hat{B}\}\rangle\right)^* &= \langle\psi|\{\hat{A},\hat{B}\}^\dagger|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\{\hat{A},\hat{B}\}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Somit ist der Erwartunswert rein reell.

(iii) Betrachte jeweils den adjungierten Ausdruck der Operatoren.

1.)

$$\begin{aligned}\left(\hat{A}\hat{B}\hat{A}\right)^\dagger &= \hat{A}^\dagger\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger \\ &= \hat{A}\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{A} \rightarrow \text{hermitesch}\end{aligned}$$

2.)

$$\begin{aligned}\left(i[\hat{A},\hat{B}]\right)^\dagger &= -i\left([\hat{A},\hat{B}]\right)^\dagger \\ &= -i[\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger] \\ &= i[\hat{A},\hat{B}] \rightarrow \text{hermitesch}\end{aligned}$$

3.)

$$\begin{aligned}\left(e^{i\hat{A}}\right)^\dagger &= e^{\left(i\hat{A}\right)^\dagger} \\ &= e^{-i\hat{A}} \rightarrow \text{nicht hermitesch, dafür unitär}\end{aligned}$$

4.)

$$\begin{aligned}\left(e^{i[\hat{A},\hat{B}]}\right)^\dagger &= e^{\left(i[\hat{A},\hat{B}]\right)^\dagger} \\ &= e^{i[\hat{A},\hat{B}]} \rightarrow \text{hermitesch}\end{aligned}$$

(b) (1 Punkt) Zunächst wird $\frac{d\hat{f}}{d\eta}$ berechnet

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{f}(\eta)}{d\eta} &= \frac{d}{d\eta}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\eta\hat{A})^n}{n!}\hat{B}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-\eta\hat{A})^m}{m!}\right) && (40)\\ &= \sum_{n=1}^{\infty} n\hat{A}\frac{(\eta\hat{A})^{n-1}}{n!}\hat{B}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-\eta\hat{A})^m}{m!} - \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\eta\hat{A})^n}{n!}\hat{B}\sum_{m=1}^{\infty} m\hat{A}\frac{(-\eta\hat{A})^{m-1}}{m!} && (41)\\ &= \hat{A}e^{\eta\hat{A}}\hat{B}e^{-\eta\hat{A}} - e^{\eta\hat{A}}\hat{B}e^{-\eta\hat{A}}\hat{A} && (42)\\ &= [\hat{A},\hat{f}(\eta)] && (43)\end{aligned}$$

Damit lässt sich die n. Ableitung ausdrücken als

$$\hat{f}^{(n)}(\eta) = \frac{d^n\hat{f}(\eta)}{d\eta^n} = \underbrace{[\hat{A},[\hat{A},\ldots[\hat{A},\hat{f}]]]}_{n\text{ mal}} \tag{44}$$

Somit kann $\hat{f}$ als Reihe dargestellt werden

$$\begin{aligned}\hat{f}(\eta) &= \sum_{n=0}^{\infty}\left.\frac{\hat{f}^{(n)}(\eta)}{n!}\right|_{\eta=0}\eta^n && (45)\\ &= 1 + [\hat{A},\hat{f}]\eta + [\hat{A},[\hat{A},\hat{f}]]\frac{\eta^2}{2!} + [\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{f}]]]\frac{\eta^3}{3!} + \ldots && (46)\end{aligned}$$

und die zu zeigende Identität wird durch $\eta = 1$ erhalten.

(c) (2 Punkte) Mit der Identität von Blatt 2, Gl. 5, $[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$ wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ jeweils mit $[\hat{A}, \hat{B}]$ vertauschen, erhält man

$$\begin{aligned}
[e^{\eta\hat{A}}, \hat{B}] &= [\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\eta\hat{A})^n}{n!}, \hat{B}] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\eta^n}{n!}[\hat{A}^n, \hat{B}] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\eta^n}{n!} n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] \\
&= \eta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\eta\hat{A}\right)^n}{n!}[\hat{A}, \hat{B}] \\
&= \eta e^{\eta\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]
\end{aligned}$$

Damit bestimmt sich die Ableitung von $\hat{g}$ zu

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{g}(\eta)}{d\eta} &= \frac{d}{d\eta}\left(e^{\eta\hat{A}} e^{\eta\hat{B}} e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\right) \\
&= e^{\eta\hat{A}}\hat{A}e^{\eta\hat{B}}e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} + e^{\eta\hat{A}}\hat{B}e^{\eta\hat{B}}e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} - e^{\eta\hat{A}}e^{\eta\hat{B}}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} \\
&= \left(e^{\eta\hat{A}}\left(\hat{A}e^{\eta\hat{B}} - e^{\eta\hat{B}}\hat{A}\right)e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} + \left(e^{\eta\hat{A}}\hat{B} - e^{\eta\hat{A}}\hat{B}\right)e^{\eta\hat{B}}e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\right) \\
&= e^{\eta\hat{A}}[\hat{A}, e^{\eta\hat{B}}]e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} \\
&= -\eta e^{\eta\hat{A}}e^{\eta\hat{B}}[\hat{B}, \hat{A}]e^{-\eta\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} \\
&= \eta[\hat{A}, \hat{B}]\hat{g}(\eta)
\end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung wird von $\hat{g}(\eta) = e^{\frac{\eta^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ gelöst, wie sich schnell überprüfen lässt

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{g}(\eta)}{d\eta} &= \frac{d}{d\eta}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{\eta^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right)^n}{n!}\right) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} n\eta[\hat{A}, \hat{B}]\frac{\left(\frac{\eta^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right)^{n-1}}{n!} \\
&= \eta[\hat{A}, \hat{B}]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{\eta^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right)^{n-1}}{n!} \\
&= \eta[\hat{A}, \hat{B}]\hat{g}(\eta)
\end{aligned}$$

Somit erhält man für $\eta = 1$

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} = e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$

woraus die zu zeigende Identität durch Multiplikation der entsprechenden Operatoren von rechts und links folgt

$$e^{\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$