Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland Willa

Blatt 2
Abgabe 30.04.2021

---

1. Kommutatoren

Der Kommutator zweier Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ist im Allgemeinen definiert als

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{1}$$

Wir möchten hier Kommutatoren des 3-dimensional Ortsoperators $\hat{x} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ und Impulsoperators $\hat{p} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$ berechnen, wobei in der Ortsraumdarstellung $\hat{x}_i = x_i$ und $\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$ gilt.

a) Beweisen Sie, dass für allgemeine Opratoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ und $\hat{C}$ die Relationen $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$ und $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$ gelten.

b) Verifizieren Sie die Eigenschaft $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ aus der Vorlesung noch einmal explizit und berechnen Sie dann die Kommutatoren $[\hat{x}^2, \hat{x}_i]$ und $[\hat{x}_i, \hat{p}^2]$.

c) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{T}, \hat{V}(x)]$, wobei $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ der Operator der kinetischen Energie und $\hat{V}(x) = \kappa\hat{x}^2/2$ das Potential sei.

Lösungsskizze:

a) Um die Schreibweise zu vereinfachen, werden wir in diesem Aufgabenteil die Hütchen zur Kennzeichnung von Operatoren weglassen. Man zeigt leicht

$$[A, B] \overset{\text{def}}{=} AB - BA = -(BA - AB) \overset{\text{def}}{=} -[B, A] \tag{2}$$

und

$$[A, BC] = A(BC) - (BC)A = ABC \underbrace{-BAC + BAC}_{=0} -BCA \tag{3}$$

$$= [A, B]C + B[A, C] \tag{4}$$

wie gewünscht. In Kombination gilt insbesondere auch $[AB, C] = A[B, C]+[A, C]B$.

b) Man stellt fest, dass

$$\hat{x}^2 = \sum_{j=1}^{3} \hat{x}_j^2 \tag{5}$$

$$[\hat{x}^2, \hat{x}_i] = \sum_{j=1}^{3}[\hat{x}_j^2, \hat{x}_i] \overset{\text{a)}}{=} \sum_{j=1}^{3} \hat{x}_j[\hat{x}_j, \hat{x}_i] + [\hat{x}_j, \hat{x}_i]\hat{x}_j = 0, \tag{6}$$

da $[\hat{x}_j, \hat{x}_i] = 0$. Im zweiten Teil berechnet man analog

$$[\hat{x}_i, \hat{p}^2] = \sum_{j=1}^{3} [\hat{x}_i, \hat{p}_j^2] \stackrel{\text{a)}}{=} \sum_{j=1}^{3} \hat{p}_j [\hat{x}_i, \hat{p}_j] + [\hat{x}_i, \hat{p}_j] \hat{p}_j \tag{7}$$

$$= \sum_{j=1}^{3} \hat{p}_j i\hbar\delta_{ij} + i\hbar\delta_{ij}\hat{p}_j = 2i\hbar\hat{p}_i, \tag{8}$$

da man durch Verwendung einer differenzierbaren Testfunktion $f(x_1, x_2, x_3)$ sieht

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] f(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar [x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}] f(x_1, x_2, x_3) \tag{9}$$

$$= -i\hbar \left(x_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} f(x_1, x_2, x_3) \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(x_i f(x_1, x_2, x_3) \right) \right) \tag{10}$$

$$= -i\hbar \left(x_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} f(x_1, x_2, x_3) \right) - \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j} \right) - x_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} f(x_1, x_2, x_3) \right) \right) \tag{11}$$

$$= i\hbar\delta_{ij} f(x_1, x_2, x_3) \tag{12}$$

$$\Rightarrow [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{13}$$

c) Hier berechnet man

$$[\hat{T}, \hat{V}(x)] = \frac{\kappa}{4m} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} [\hat{p}_i^2, \hat{x}_j^2] \stackrel{\text{a)}}{=} \frac{\kappa}{4m} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \hat{x}_j [\hat{p}_i^2, \hat{x}_j] + [\hat{p}_i^2, \hat{x}_j] \hat{x}_j \tag{14}$$

$$\stackrel{\text{b)}}{=} \frac{\kappa}{4m} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} (-2i\hbar) \delta_{ij} (\hat{x}_i \hat{p}_i + \hat{p}_i \hat{x}_i) \tag{15}$$

$$= \frac{-i\hbar\kappa}{2m} \sum_{i=1}^{3} (2\hat{x}_i\hat{p}_i - i\hbar) = \left(\frac{-i\hbar\kappa}{m} \sum_{i=1}^{3} \hat{x}_i \hat{p}_i \right) - \frac{3\hbar^2\kappa}{2m}. \tag{16}$$

2. Fouriertransformation

Wir verwenden die Fouriertransformation um vom Ortsraum in den Impulsraum (oder umgekehrt) zu wechseln. Die Impulsraumdarstellung der Funktion $f(x)$ ist gerade die Fouriertransformierte $\tilde{f}(k)$, die definiert ist als

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx}. \tag{17}$$

Die inverse Transformation ist gegeben durch

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx}. \tag{18}$$

Somit ist $f(x)$ auch die Fouriertransformierte der Funktion $\tilde{f}(k)$ und insbesondere ihre Ortsraumdarstellung. Beachten Sie die Unterschiede im Exponenten und das zusätzliche 2π je nach Richtung der Transformation! Für die Fouriertransformation in der Zeit werden unterschiedliche Vorzeichen in den Exponenten verwendet (siehe weiter unten).

a) Berechnen Sie die Fouriertransformation für $f_1(x) = \delta(x)$ und $\tilde{f}_2(k) = \delta(k)$.

b) Berechnen Sie die Fouriertransformation für $f_3(x) = 1_x = 1$ und $\tilde{f}_4(k) = 1_k = 1$.

c) Zeigen Sie, dass die Fouriertransformierte der Funktion $f_5(x) = (\frac{\partial}{\partial x} g(x))$ für allgemeines differenzierbares $g(x)$ gegeben ist durch

$$\tilde{f}_5(k) = ik\tilde{g}(k). \tag{19}$$

wobei $\tilde{g}(k)$ die Fouriertransformierte der Funktion $g(x)$ ist.

d) Die Fouriertransformierte der Funktion $\tilde{f}_6(k) = e^{-\frac{a}{2}k^2}$ ist gegeben durch

$$f_6(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{1}{2a}x^2}, \tag{20}$$

wobei $a \in \mathbb{C}$ und $\Re(a) \geq 0$ gilt. Beweisen Sie dies für reelles positives $a > 0$.

Lösungsskizze:

a) Man berechnet

$$\tilde{f}_1(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) e^{-ikx} = e^0 = 1_k \tag{21}$$

und analog

$$f_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \delta(k) e^{ikx} = \frac{e^0}{2\pi} = \frac{1_x}{2\pi}. \tag{22}$$

b) In a) haben wir gesehen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) e^{-ikx} = 1_k. \tag{23}$$

Dies entspricht genau der Definition (17) mit $\tilde{f}(k) = 1_k = 1 = \tilde{f}_4(k)$ und $f(x) = \delta(x)$. Da Relation (18) genau die Umkehrrelation ist, gilt somit

$$f_4(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} 1_k e^{ikx} = \delta(x). \tag{24}$$

Analog sieht man

$$\tilde{f}_3(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx 1_x e^{-ikx} = 2\pi\delta(k) \tag{25}$$

Somit ist eine Funktion, die im Ortsraum maximal lokalisiert oder bestimmt ist, im Impulsraum genau maximal unbestimmt und umgekehrt.

c) Wir drücken $g(x)$ durch die Fouriertransformierte aus

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{g}(k) e^{ikx} \tag{26}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} g(x) = \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{g}(k) e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} (\tilde{g}(k) ik) e^{ikx}. \tag{27}$$

Der Vergleich mit Relation (18) liefert das geforderte Ergebnis.

d) Man ergänzt zuerst den Exponenten zum Binom

$$f_6(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{a}{2}k^2+ikx} = e^{-\frac{x^2}{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{a}{2}\left(k-i\frac{x}{a}\right)^2}. \tag{28}$$

Die Substitution $q = \sqrt{a/2}(k - ix/a)$ liefert dann

$$f_6(x) = e^{-\frac{x^2}{2a}} \frac{\sqrt{2}}{2\pi\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-q^2}, \tag{29}$$

da laut Annahme $a > 0$ ändert diese Substitution die Integrationsgrenzen nicht. Der **endliche** Imaginärteil der Grenzen spielt keine Rolle. Dies ist ein normales Gaussintegral und wir erhalten wie gefordert

$$f_6(x) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{-\frac{x^2}{2a}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{x^2}{2a}}. \tag{30}$$

Die Fouriertransformierte einer Gaussfunktion mi Breite a ist also wieder eine Gaussfunktion, allerdings mit Breite $1/a$. Je schmaler die Funktion im Ortsraum ist, desto breiter ist sie also im Impulsraum und umgekehrt.

3. Greensche Funktion

Die Fouriertransformation einer Funktion $f(\boldsymbol{x}, t)$ (und ihr Inverses) in d räumlichen und einer zeitlichen Dimension sind definiert durch

$$f(\boldsymbol{k}, \omega) = \int \quad d^d x \quad dt \quad e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} f(\boldsymbol{x}, t) \tag{31}$$

$$f(\boldsymbol{x}, t) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{d\omega}{(2\pi)} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} \quad f(\boldsymbol{k}, \omega) \tag{32}$$

Gleichzeitig ist die Greensche Funktion eines linearen Operators $\mathcal{D}_{\boldsymbol{x},t}$ definiert durch die Beziehung $\mathcal{D}_{\boldsymbol{x},t} G(\boldsymbol{x}, t) = i\hbar\delta(\boldsymbol{x})\delta(t)$.

a) Leiten Sie die *zeitunabhängige* Schrödingergleichung eines freien Teilchens in der Fourierdarstellung her, d.h., finden Sie die Bestimmungsgleichung für $\psi(\boldsymbol{k})$.

b) Für die zeitabhängige Schrödingergleichung ist die (retardierte) Greensche Funktion (für $t > 0$) definiert als

$$[i\hbar\partial_t - \hat{H}]G(\boldsymbol{x}, t) = i\hbar\delta(\boldsymbol{x})\delta(t) \tag{33}$$

mit $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$. Zeigen Sie mittels inverser Fouriertransformation, dass die Greensche Funktion in der Fourierdarstellung die Form $G(\boldsymbol{k}, \omega) = \eta(\omega - \hbar k^2/2m)^{-1}$ besitzt und bestimmen Sie η.

c) Nutzen Sie den Residuensatz um aus dem obigen Ergebnis $G(\boldsymbol{k}, t)$ zu berechnen. Das Ergebnis bestizt die Form $G(\boldsymbol{k}, t) \propto \exp[-i\nu k^2 t]$. Wenn Sie bei der Herleitung scheitern, diskutieren Sie die Einheiten von ν.

Tipp: Schieben Sie den Pol von der reellen Achse in die untere komplexe Halbebene $G(\boldsymbol{k}, \omega) \to \eta(\omega - \hbar k^2/2m + i\delta)^{-1}$. Für ein Integral entlang der Kontour Γ welche einen einfachen Pol einmal im Uhrzeigersinn umschliesst ist (Residuensatz light)

$$\frac{-1}{2\pi i} \oint_\Gamma dz \, \frac{f(z)}{z - \zeta} = f(\zeta). \tag{34}$$

d) Berechnen Sie die Greensche Funktion $G(\boldsymbol{x}, t)$. Verwenden Sie obige Ergebnisse.
Tipp: Eine Gausssche Verteilung wurde in Aufgabe 1 fouriertransformiert. Gehen Sie analog vor und lassen sich nicht von imaginären Koeffizienten verunsichern.

Lösungsskizze:

a) Die *zeitunabhängige* Schrödingergleichung eines freien Teilchens lautet

$$[-(\hbar^2/2m)\nabla^2 - E]\psi_E(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{35}$$

wobei ψ_E eine Eigenfunktion zum Eigenwert E ist. In der Fourierdarstellung gilt dann

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} (\hbar^2 k^2/2m - E)\psi_E(\boldsymbol{k}) = 0. \tag{36}$$

(Hier endet die Aufgabenstellung). Damit diese Gleichung für jedes $\boldsymbol{x}$ erfüllt ist muss gelten $\psi_E(\boldsymbol{k}) \sim \delta(k^2 - 2mE/\hbar^2)$. Eine inverse Fouriertransformation liefert dann sofort die ebenen Wellen

$$\psi_E(\boldsymbol{x}) \propto e^{i\boldsymbol{k}_E\cdot\boldsymbol{x}} \tag{37}$$

mit $|\boldsymbol{k}_E| = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

b) Kombiniert man die Schrödingergleichung (33) mit der Definition der Fouriertransformation, so erhält man

$$(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2) \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{d\omega}{(2\pi)} G(\boldsymbol{k}, \omega) e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x} - \omega t)} = i\hbar \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} \int \frac{d\omega}{(2\pi)} e^{i\omega t} \tag{38}$$

wobei wir die Darstellung der δ-Funktion auf der rechten Seite genutzt haben. Wendet man die Ableitungen auf die Exponentialfunktionen an, vereinfacht sich der obige Ausdruck nun zu $(\hbar\omega - \hbar^2 k^2/2m)G(\boldsymbol{k}, \omega) = i\hbar$ [da die Gleichung nun für jedes $(\boldsymbol{x}, t)$ gelten muss], also

$$G(\boldsymbol{k}, \omega) = \frac{i}{\omega - \hbar k^2/2m}. \tag{39}$$

c) Es gilt das Integral

$$G(\boldsymbol{k}, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} G(\boldsymbol{k}, \omega) e^{-i\omega t} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{i}{\omega - \hbar k^2/2m} e^{-i\omega t} \tag{40}$$

zu berechnen. Der Integrand besizt einen Pol erster Ordnung auf der reellen Achse bei $\omega_p = \hbar k^2/2m$. Für $t > 0$ muss ein Konturintegral in der unteren komplexen Halbebene (Γ_-) geschlossen werden damit der Beitrag der Schliessung verschwindet. Es gilt

$$\oint_{\Gamma_-} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{ie^{-i\omega t}}{\omega - (\omega_p - i\delta)} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{ie^{-i\omega t}}{\omega - (\omega_p - i\delta)} \tag{41}$$

$$= \frac{-2\pi i}{2\pi} \mathrm{Res}_{\omega_p - i\delta} \Big[\frac{ie^{-i\omega t}}{\omega - (\omega_p - i\delta)} \Big] = e^{-i(\omega_p - i\delta)t} \tag{42}$$

wobei der Pol um δ in die negative komplexe Halbebene geschoben wurde. Ein Minuszeichen kommt von der (Uhrzeiger-)Richtung mit der der Pol umlaufen wird. Wir finden im Grenzfall $\delta \to 0$

$$G(\boldsymbol{k}, t) = e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}. \tag{43}$$

d) Zum Schluss berechnen wir die Fouriertransformation eines Gaussschen Wellenpakets, d.h.

$$G(\boldsymbol{x},t) = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d} G(\boldsymbol{k},t) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d} e^{-\left(\delta + i\frac{\hbar t}{2m}\right)k^2 + i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{k}} = \left(\frac{-im}{2\pi\hbar t}\right)^{d/2} e^{i\frac{mx^2}{2\hbar t}}, \quad (44)$$

with $x = |\boldsymbol{x}|$. Den letzten Schritt erhält man durch quadratische Ergänzung des Exponenten und anschliessendem Gaussschem Integral.