Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian

Vanessa Gall, Dr. Roland Willa

Blatt 3

Abgabe 07.05.2021

---

1. Die Schrödingergleichung mit konstantem Potential

Schreiben Sie die (zeitunabhängige) Schrödingergleichung in einer Dimension für ein konstantes Potential V im Realraum auf. Wenden Sie die Fouriertransformation an und leiten Sie eine Energie-Impuls Beziehung her. Diskutieren Sie die zugehörigen Wellenfunktionen. Schliesslich, reflektieren Sie über die Lösungen der Energie-Impuls Beziehung für den Fall $E < V$. Wie sind hier die 'Wellenfunktionen' zu verstehen?

2. Dirac Notation

Wir betrachten drei verschiedene Basen des Hilbertraumes: Die Ortsbasis $\{|x\rangle\}$, die Wellenzahlbasis $\{|k\rangle\}$ und eine (nicht weiter spezifizierte) Basis $\{|n\rangle\}$, wobei $n \in \mathbb{N}$.

a) Die Wellenzahlbasis $\{|k\rangle\}$ ist gegeben durch die Menge der Eigenfunktionen des Wellenzahloperators $\hat{k} = \hat{p}/\hbar$, d.h. $\hat{k}|k\rangle = k|k\rangle$. Schreiben Sie den Impulsoperator in der Ortsraumdarstellung und bestimmen Sie die Eigenfunktionen $\psi_k(x) = \langle x|k\rangle$ durch Lösen der Differentialgleichung. Berücksichtigen Sie dabei, dass die Basisfunktionen orthonormiert sind im Sinne

$$\int dx\, \psi_q(x)^* \psi_k(x) = \delta(q-k). \tag{1}$$

b) Drücken Sie den Identitätsoperator $\hat{\mathbb{I}}$ in jeder der drei Basen aus. Verifizieren Sie explizit für die Ortsdarstellung, dass $\langle q|\hat{\mathbb{I}}|k\rangle = \langle q|k\rangle$ gilt.

Hinweis: Dieser Identitätsoperator hilft Ihnen bei allen folgenden Aufgaben.

c) Sei $\hat{A}$ ein Operator, dessen Eigenzustände durch $\{|n\rangle\}$ gegeben sind. Drücken Sie $\hat{A}$ in der Dirac Notation durch diese Eigenfunktionen und Eigenwerte A_n aus.

d) Entwickeln Sie die Zustände $|x\rangle$ und $|k\rangle$ jeweils in der Orts- und Wellenzahlbasis.

e) Betrachten Sie den allgemeinen Zustand $|\phi\rangle$. Was ist die Ortsraumdarstellung $\phi(x)$ dieses Zustandes und wie sieht seine Ortsraumentwicklung aus?

f) Betrachten Sie den Zustand $|\phi\rangle$ mit der Wellenzahldarstellung

$$\phi(k) = \langle k|\phi\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-k^2/(4\sigma^2)}. \tag{2}$$

Finden Sie seine Ortsraumdarstellung $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$.

3. Die Zeitentwicklung der freien Schrödingergleichung

Betrachten Sie die freie, zeitabhängige Schrödingergleichung in einer räumlichen Dimension $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x,t)$.

a) Zeigen Sie, dass ein Separationsansatz $\psi(x,t) = \phi(x)\chi(t)$ zu zwei unabhängigen Differentialgleichungen (in Raum und Zeit) führt. Bestimmen Sie die allgemeine Lösung $\chi(t)$ der zeitabhängigen Gleichung mit der Anfangsbedingung $\chi(t=0)=1$.

b) Lösen Sie die stationäre, freie Schrödingergleichung $\frac{(\hbar\hat{k})^2}{2m}\phi_k(x) = E_k\phi_k(x)$. Finden Sie hierzu das Fundamentalsystem $\{\phi_k(x), \phi_{-k}(x)\}$, das die Vollständigkeits- und die Orthonormalitätsbedingung

$$\int dx\, \phi_q^*(x)\phi_k(x) = \delta(q-k), \qquad \text{und} \qquad \int dk\, \phi_k^*(x)\phi_k(y) = \delta(x-y), \tag{3}$$

erfüllt. Welcher Zusammenhang besteht zwischen k und E_k? Was ist $\phi_k(x,t)$?

c) Eine allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung hat die Form

$$\psi(x,t) = \int dk a_k \phi_k(x,t) = \int dk a_k \phi_k(x)\chi_k(t), \tag{4}$$

wobei a_k weder von der Zeit noch von der Koordinate abhängen darf. Verwenden Sie die Vollständigkeitsbedingung um zu zeigen, dass

$$a_k = \int dx \phi_k^*(x)\psi(x,t=0). \tag{5}$$

d) Machen Sie sich klar, dass die gefundenen stationären Lösungen $\phi_k(x)$ Eigenzustände des Wellenzahloperators sind, i.e. $\phi_k(x) = \langle x|k\rangle$. Was bedeutet diese Feststellung für die a_k, wenn $\psi(x,t=0) = \langle x|\psi\rangle$? Verwenden Sie dieses Wissen um $\psi(x,t)$ für den Zustand

$$\langle k|\psi\rangle = \psi(k,t=0) = e^{-\frac{1}{4}a^2k^2} \tag{6}$$

zu finden. Wie entwickelt sich die Breite des Wellenpakets $|\psi(x,t)|^2$ mit der Zeit?

4. (Anti-)Kommutator-Algebra: Teil I

Es seien Operatoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ und $\hat{C}$, der Kommutator $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ und der Antikommutator $\{\hat{A},\hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$. Beweisen Sie

a) $\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}([\hat{A},\hat{B}] + \{\hat{A},\hat{B}\})$,

b) $[\hat{A},\hat{A}] = 0$ und $[\hat{A},c] = 0$ für einen beliebigen Skalar c,

c) $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}]$ und $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$,

d) die Jacobi Identität $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$. Kennen Sie eine 2-Form im Funktionenraum die sich ebenso verhält?

e) mit Induktionsbeweis: Aus $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = 0$ folgt $[\hat{A}^m,\hat{B}] = m\hat{A}^{m-1}[\hat{A},\hat{B}], \forall m \in \mathbb{N}^*$. Und ebenso aus $[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ folgt $[\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}], \forall n \in \mathbb{N}^*$.

f) **Anspruchsvoll!** die *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel* $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ mithilfe der obigen Ergebnissen. Es gelte weiterhin $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = [[\hat{B},\hat{A}],\hat{B}] = 0$. Zeigen Sie dazu, dass die Funktion $f(t) = e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$ die Differentialgleichung $\partial f/\partial t = (\hat{A}+\hat{B}+t[\hat{A},\hat{B}])f$ erfüllt und lösen Sie diese. Die Exponentialfunktion ist als Taylorreihe zu verstehen.