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?

Lösungsskizze:

Im Realraum lautet die Schrödingergleichung

$$[-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V]\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

Schreibt man die Wellenfunktion in der Fourierdarstellung erhält man

$$\int \frac{dk}{2\pi}[(\hbar^2 k^2/2m) - (E - V)]\psi_k e^{ikx} = 0 \tag{2}$$

Damit lautet die Energie-Impulsbeziehung [1]

$$\hbar^2 k^2/2m = E - V \qquad \text{oder} \qquad k = \pm\sqrt{2m(E-V)/\hbar^2} \tag{3}$$

die entsprechende Wellenfunktion ist eine ebene Welle.

Die Energie-Impuls-Beziehung für $E < V$ besitzt nun komplexe Lösungen mit $\kappa = \pm i\sqrt{2m|E-V|/\hbar^2}$. Diese führen zu exponentiellen Lösungen, welche als evaneszente Moden zulässig werden (später in dieser Vorlesung).

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

$$\int dx\, \psi_q(x)^* \psi_k(x) = \delta(q - k). \tag{4}$$

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.

---

[1] Eigentlich ist es eine Energie-Wellenzahl-Beziehung. Mit $p = \hbar k$ sind die beiden zueinander verwandt.

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

$$\phi(k) = \langle k|\phi\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-k^2/(4\sigma^2)}. \tag{5}$$

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

Lösungsskizze:

a) Das Eigenwertproblem für den Wellenzahloperator ist in der Realraumdarstellung

$$-i\frac{\partial}{\partial x}\psi_k(x) = k\psi_k(x) \tag{6}$$

und lässt sich mittels Exponentialansatz $\psi_k(x) = Ae^{\lambda k}$ lösen. Man findet durch Einsetzen, $\lambda = ik$, i.e.

$$\psi_k(x) = \langle x|k\rangle = Ae^{ikx} \tag{7}$$

Die Normierungskonstante A finden wir durch

$$\delta(q-k) = \int dx\psi_q(x)^*\psi_k(x) \tag{8}$$

$$= |A|^2 \int dx e^{i(k-q)} = |A|^2 2\pi\delta(q-k). \tag{9}$$

Somit ist die Wellenzahl-Eigenfunktion in der Realraumdarstellung gegeben durch

$$\psi_k(x) = \langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}. \tag{10}$$

Hinweis: Streng genommen sind die gefundenen Zustände (ebene Wellen) auf einem unbegrenzten Integrationsbereich *nicht* normierbar. In der Vorlesung wird bisher ein endliches Volumen gewählt, welche dann in die Normierung einfließt. Wir behalten im Hinterkopf, dass die Wellenvektoren genau genommen diskret sind, und deswegen insbesondere $\delta(k-k) \overset{V\text{endlich}}{\Rightarrow} \delta_{k,k} = 1$

b) Es ist

$$\hat{\mathbb{I}} = \sum_n |n\rangle\langle n| = \int dx|x\rangle\langle x| = \int dk|k\rangle\langle k|. \tag{11}$$

Einsetzen der Identität in der Ortsdarstellung ergibt

$$\langle q|\hat{\mathbb{I}}|k\rangle = \int dx\langle q|x\rangle\langle x|k\rangle = \int dx\psi_q^*(x)\psi_k(x) = \delta(q-k) = \langle q|k\rangle. \tag{12}$$

c) Laut Aufgabenstellung gilt

$$\hat{A}|n\rangle = A_n|n\rangle. \tag{13}$$

Da $\{|n\rangle\}$ eine Basis ist, nutzen wir die Identitätsdarstellung $\hat{\mathbb{I}} = \sum_n |n\rangle\langle n|$,

$$\hat{A} = \hat{A}\hat{\mathbb{I}} = \sum_n \hat{A}|n\rangle\langle n| = \sum_n A_n|n\rangle\langle n| \tag{14}$$

d) Man findet durch Einsetzen der passenden Identität:

$$|x\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|x\rangle = \int dx'|x'\rangle\delta(x'-x) = |x\rangle, \tag{15}$$

$$|x\rangle = \int dk|k\rangle\langle k|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dke^{-ikx}|k\rangle, \tag{16}$$

$$|k\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dxe^{ikx}|x\rangle, \tag{17}$$

$$|k\rangle = \int dk'|k'\rangle\langle k'|k\rangle = \int dk'|k'\rangle\delta(k'-k) = |k\rangle. \tag{18}$$

e) Die Ortsraumdarstellung eines allgemeinen Operators $|\phi\rangle$ ist gegeben durch $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$. Eine Entwicklung in der Ortsraumbasis ergibt

$$|\phi\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|\phi\rangle = \int dx\phi(x)|x\rangle. \tag{19}$$

f) Die Ortsraumdarstellung des Operators ist

$$\phi(x) = \langle x|\phi\rangle = \int dk\langle x|k\rangle\langle k|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dke^{ikx}\phi(k) \tag{20}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\int dke^{ikx-k^2/(4\sigma^2)} \tag{21}$$

$$= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\sigma}e^{-x^2\sigma^2} \tag{22}$$

Der Wechsel vom Wellenzahl- in den Ortsraum entspricht also (bis auf Kombinationen mit 2π) exakt der auf dem letzten Blatt besprochenen Fouriertransformation.

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

$$\int dx\, \phi_q^*(x)\phi_k(x) = \delta(q-k), \qquad \text{und} \qquad \int dk\, \phi_k^*(x)\phi_k(y) = \delta(x-y), \tag{23}$$

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

$$\psi(x,t) = \int dk a_k\phi_k(x,t) = \int dk a_k\phi_k(x)\chi_k(t), \tag{24}$$

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

$$a_k = \int dx\phi_k^*(x)\psi(x,t=0). \tag{25}$$

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

$$\langle k|\psi\rangle = \psi(k,t=0) = e^{-\frac{1}{4}a^2k^2} \tag{26}$$

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

Lösungsskizze:

a) Durch Einsetzen des Ansatzes findet man

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x)\right)\chi(t) = \phi(x)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t)\right) \tag{27}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x)\right)}{\phi(x)} = \frac{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t)\right)}{\chi(t)} = E, \tag{28}$$

wobei $E = \text{const.}$, da es sich um Funktionen verschiedener Variablen handelt. Dass E die Energie ist, sieht man etwa aus einer Dimensionsanalyse. Wir erhalten also

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = E\chi(t) \tag{29}$$

und die stationäre Schrödingergleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) = E\phi(x). \tag{30}$$

Die Zeitentwicklung ist eine lineare, homogene DGL erster Ordnung, also machen wir einen Ansatz $\chi(t) = Ae^{\lambda t}$. Durch Einsetzen erhalten wir $\lambda = -i\frac{E}{\hbar}$ und durch die Anfangsbedingung $A = 1$, also

$$\chi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \tag{31}$$

b) Die stationäre Schrödingergleichung nimmt die Form

$$\hat{k}^2\phi_k(x) = \frac{2mE_k}{\hbar^2}\phi_k(x) \tag{32}$$

an. Da $\hat{k}\phi_k(x){=}k\phi_k(x)$ die Lösung $\phi_k(x){=}e^{ikx}$ besitzt (siehe Aufgabe 1a), gilt

$$\hat{k}^2\phi_k(x) = k^2\phi_k(x) = \frac{2mE_k}{\hbar^2}\phi_k(x). \tag{33}$$

Somit ist $\phi_k(x) = e^{ikx}$ auch eine Eigenfunktion der stationären, freien Schrödingergleichung und wir finden $E_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$. Ebenso ist auch $\phi_{-k}(x) = e^{-ikx}$ eine Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert. Die Normierung bedingt, dass

$$\phi_k(x) = \langle x|k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \tag{34}$$

$$\phi_{-k}(x) = \langle x|-k\rangle = \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \tag{35}$$

Wenn wir positive und negative k zulassen, bilden $\{\phi_k(x)\}$ eine Eigenbasis.

Alternativ kann die stationäre Schrödingergleichung ist eine lineare, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung verstanden werden. Diese hat zwei linear unabhängige Lösungen, die wir durch den Ansatz $\phi_\lambda(x) = Ae^{\lambda x}$ finden.

Da $E = E_k$ in der ststionären Schrödingergleichung und der Zeitentwicklung die gleiche konstante ist, erhält man

$$\phi_k(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx-i\frac{E_k}{\hbar}t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \tag{36}$$

c) Zunächst multipliziert man die angegebene Gleichung von links mit $\phi_q^*(x)$, dann integriert man beide Seiten über x um zu erhalten

$$\int dx\phi_q^*(x)\psi(x,t) = \int dx\int dk a_k\phi_q^*(x)\phi_k(x)\chi_k(t) \tag{37}$$

$$\underset{\text{Vollständigkeit}}{=}\int dk a_k\delta(k-q)\chi_k(t) = a_q\chi_q(t). \tag{38}$$

Da a_q nicht von der Zeit anhängen, gilt insbesondere

$$a_q\chi_q(t=0) = a_q = \int dx\phi_q^*(x)\psi(x,t=0). \tag{39}$$

d) Man kann leicht durch einsetzen prüfen, dass die $\phi_k(x)$ gerade die (korrekt normierten) Eigenfunktionen des Wellenzahloperators sind, also $\phi_k(x) = \langle x|k\rangle$. Damit kann man die a_k schreiben als

$$a_k = \int dx \phi_k^*(x)\psi(x, t = 0) = \int dx \langle k|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \langle k|\psi\rangle = \psi(k, t = 0). \tag{40}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dk \psi(k, t = 0)\phi_k(x)\chi_k(t) &(41)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{-\frac{1}{4}a^2k^2+ikx-i\frac{\hbar}{2m}k^2t} &(42)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2\pi(\frac{a^2}{2} - i\frac{\hbar}{m}t)}{\frac{a^4}{4} + \frac{\hbar^2}{m^2}t^2}} e^{\frac{x^2}{2}\left(\frac{-\frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar}{m}t}{\frac{a^4}{4}+\frac{\hbar^2}{m^2}t^2}\right)} &(43) \end{aligned}$$

Die Breite σ einer Normalverteilung steckt im Exponenten als $e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$, wir betrachten also nur den Exponenten und erhalten

$$|\psi(x, t)|^2 \propto e^{\frac{x^2}{2}\left(\frac{-\frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar}{m}t}{\frac{a^4}{4}+\frac{\hbar^2}{m^2}t^2}\right)} \times e^{\frac{x^2}{2}\left(\frac{-\frac{a^2}{2}-i\frac{\hbar}{m}t}{\frac{a^4}{4}+\frac{\hbar^2}{m^2}t^2}\right)} = e^{\left(\frac{-a^2x^2}{2\left(\frac{a^4}{4}+\frac{\hbar^2}{m^2}t^2\right)}\right)}. \tag{44}$$

Somit ist die Breite $\sigma = \sqrt{\frac{\left(\frac{a^4}{4}+\frac{\hbar^2}{m^2}t^2\right)}{a^2}}$, i.e. mit zunehmender Zeit wird das Wellenpaket breiter; es zerfließt.

Kommentar:

Eine Gleichung aus der klassischen Physik, die von sehr ähnlicher Form wie die Schrödingergleichung ist, ist die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = a\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t), \tag{45}$$

die die räumliche und zeitliche Ausbreitung der Temperatur $u(x, t)$ in einem Medium mit Temperaturleitfähigkeit a beschreibt. Anders als die Schrödingergleichung, ist dies eine reelle Gleichung und die Lösung $u(x, t)$ ist eine messbare Größe. Das angegebene Gaußpaket ist ebenfalls eine Lösung dieses Problems, die Zeitentwicklung ist analog zur Schrödingergleichung, jedoch mit reellem Exponenten. Hier nehmen wir am Ende nicht das Betragsquadrat, sondern erhalten für $u(x, t)$ eine Breite $\sigma \propto \sqrt{t}$. Dies wird als diffusives Verhalten bezeichnet.

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.

Lösungsskizze:

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

b) $[\hat{A},\hat{A}] = \hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A} = 0$ und $[\hat{A},c] = \hat{A}c - c\hat{A} = 0$

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

d) Die drei einzelnen Terme der Jacobi Identität

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] = [\hat{A},\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} \tag{46}$$
$$[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] = [\hat{B},\hat{C}\hat{A} - \hat{A}\hat{C}] = \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} \tag{47}$$
$$[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = [\hat{C},\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}] = \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} \tag{48}$$

addieren sich tatsächlich zu Null auf.

In der (klassischen) Hamilton Mechanik besitzt die Poisson-Klammer

$$\{f,g\} = \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right] \tag{49}$$

[$f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p};t)$ und $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p};t)$ sind Funktionen der konjugierten Variablen $\boldsymbol{q}$ und $\boldsymbol{p}$] genau dieselbe Eigenschaft.

e) Für $m = 1$ gelten die Identitäten $[\hat{A}^m,\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ und $m\hat{A}^{m-1}[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ und damit ist $[\hat{A}^m,\hat{B}] = m\hat{A}^{m-1}[\hat{A},\hat{B}]$ trivial erfüllt. Gilt die Beziehung für ein $m \geq 1$, multiplizieren wir $\hat{A}$ von links und erhalten

$$\hat{A}[\hat{A}^m,\hat{B}] = \hat{A}^{m+1}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m = m\hat{A}^m[\hat{A},\hat{B}] \tag{50}$$

Addiert man nun $\hat{A}^m[\hat{A},\hat{B}]$ dazu, wird die letzte Gleichheit zu

$$\hat{A}^{m+1}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m + \hat{A}^m[\hat{A},\hat{B}] = (m+1)\hat{A}^m[\hat{A},\hat{B}] \tag{51}$$

Es genügt also nun zu zeigen, dass sich – wenn $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = 0$ gilt – die linke Seite der Gleichung zu $[\hat{A}^{m+1},\hat{B}]$ vereinfacht. Aus $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = 0$ folgt sofort auch $[[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}^n] = 0$ für $n \in \mathbb{N}$. Damit ist $\hat{A}^m(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{A}^m$ und die letzten zwei Terme auf der linken Seite von Gl. (51) vereinfachen sich zu $-\hat{B}\hat{A}^{m+1}$. Damit ist das gewünschte Ergebnis gezeigt.

Die zweite Identität ist zur ersten dual wenn man berücksichtigt, dass $[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = [[\hat{B},\hat{A}],\hat{B}]$ und die (zu beweisende) Identität lautet $[\hat{B}^n,\hat{A}] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{B},\hat{A}]$. Vertauschen von $\hat{A} \leftrightarrow \hat{B}$ und $n \to m$ gibt uns dann sofort das Ergebnis.

Es ist ratsam (hier und im weiteren Verlauf der Vorlesung) neue Identitäten aus bereits bekannten Identitäten herzuleiten. Damit wird eine Menge Arbeit erspart.

f) Es ist $f(t) = e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$, wobei die Exponentialfunktion

$$f_{\hat{A}}(t) = e^{t\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\hat{A})^n}{n!}, \tag{52}$$

als Taylorreihe zu verstehen ist. Die Ableitung nach t erfolgt dann in dieser Form

$$\frac{\partial f_{\hat{A}}(t)}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{nt^{n-1}\hat{A}^n}{n!} = \hat{A}f_{\hat{A}}(t) = f_{\hat{A}}(t)\hat{A}. \tag{53}$$

Bei der Funktion $f(t)$ nutze man die Kettenregel, und beachte dabei, dass hier die Operatorreihenfolge ($\hat{A}$ und $\hat{B}$) nicht vertauscht werden darf. Es gilt dann

$$\partial f(t)/\partial t = \hat{A}e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} + e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{t\hat{B}} = (\hat{A} + e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}})f(t). \tag{54}$$

Im letzten Schritt haben wir die Identität $e^{-t\hat{A}}e^{t\hat{A}} = 1$ genutzt (dies zu zeigen ist auch eine hübsche Aufgabe). Wir nutzen wieder die Taylorschreibweise der Exponentialfunktion und finden

$$[e^{t\hat{A}}, \hat{B}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!}[\hat{A}^n, \hat{B}] = \sum_{n=0}^{\infty} n\frac{t^n\hat{A}^{n-1}}{n!}[\hat{A}, \hat{B}] = te^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}] = t[\hat{A}, \hat{B}]e^{t\hat{A}} \tag{55}$$

Hier kam das Ergebnis aus der obigen Teilaufgabe zur Anwendung. So erhält man wie gewünscht

$$\partial f(t)/\partial t = (\hat{A} + \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}])f(t). \tag{56}$$

Aus den Eigenschaften $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ folgt auch $[\hat{A} + \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$. Damit lässt sich die Differentialgleichung lösen durch

$$f(t) = e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{\frac{1}{2}t^2[\hat{A},\hat{B}]}. \tag{57}$$

Beachte dass die Anfangsbedingung $f(t = 0) = 1$ erfüllt ist. Damit haben wir zwei äquivalente Darstellungen derselben Funktion gefunden die für alle t gelten muss. Es gilt somit bei $t = 1$, dass

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}. \tag{58}$$

Multipliziert man noch $e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ von rechts an diese Gleichung ist die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel bewiesen.