Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 1

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 28.04.2023, 14:00 Uhr

Das Übungsblatt wird in Gruppen von maximal 3 Personen bearbeitet. Die Abgabe erfolgt digital über ILIAS.

Aufgabe 1. Klassische Wellengleichung (9 Punkte)

In diesem Semester werden uns häufig Fouriertransformation begegnen. Wir verwenden die Definitionen auf Seite 13 des Skripts von Prof. Dr. T. Brandes, das auf der ILIAS-Seite zum Kurs zu finden ist. Für die Transformation zwischen Orts- (x) und Impulsraum (k) wird die folgende Konvention verwendet:

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx} \quad \text{Fourier-Transformierte von } f(x)$$
$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{f}(k)\, e^{ikx} \quad \text{inverse Fouriertransformation}$$

Bei der Transformation zwischen Zeit (t) und Frequenz (ω) gilt die Definition:

$$\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, f(t)\, e^{i\omega t} \quad \text{Fourier-Transformierte von } f(t)$$
$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{f}(\omega)\, e^{-i\omega t} \quad \text{inverse Fouriertransformation.}$$

1. Berechnen Sie die Fouriertransformationen von
   (a) (1 Punkt) $f_1(x) = \delta(x)$ und $\tilde{f}_2(k) = \delta(k)$
   (b) (1 Punkt) $f_3(x) = 1$ und $\tilde{f}_4(k) = 1$
   (c) (1 Punkt) $f_5(x) = \cos(k_0 x)$
   (d) (2 Punkte) $\tilde{f}_6(k) = e^{-ak^2/2}$ wobei $a \in \mathbb{R}$ und $a > 0$

2. (2 Punkte) Zeigen Sie, dass die Fouriertransformierte der Funktion $f_7(x) = -i\dfrac{\partial g(x)}{\partial x}$ für allgemeines differenzierbares $g(x)$ gegeben ist durch
$$\tilde{f}_7(k) = k\tilde{g}(k)\,,$$
wobei $\tilde{g}(k)$ die Fouriertransformierte der Funktion $g(x)$ ist. Nehmen Sie an, dass $\lim_{x\to\pm\infty} g(x) = 0$.

3. (2 Punkte) Zuletzt betrachten wir die klassische Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}.$$

Zeigen Sie, dass die Gleichung

$$\psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega)\, e^{i(kx-\omega t)}$$

eine Lösung der klassischen Wellengleichung ist. Was ist der Zusammenhang zwischen ω und k?

Lösung Aufgabe 1.

1. Solve the Fourier transform integrals

   (a) Recall from the first assignment that $\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \delta(y) g(y) = g(0)$. For the Fourier transform the integral is then just $e^0 = 1$. Explicitly:

   $$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f_1(x) e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) e^{-ikx} = e^0 = 1.$$

   Similarly for the inverse Fourier transform:

   $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{f}_2(k) e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \delta(k) e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}.$$

   (b) The solution here is to start with the inverse Fourier transform of $\tilde{f}_2(k) = \delta(k)$ which we know is $1/2\pi$ from the previous problem. Since the inverse Fourier transform of a delta distribution is a constant, and the function $f_3(x) = 1$ is also a constant, we can argue that the Fourier transform of a constant must be proportional to a delta distribution. The solution is simply:

   $$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f_3(x) e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} = 2\pi\delta(k).$$

   The inverse Fourier transform of $\tilde{f}_4(k) = 1$ is obtained using an identical argument, but in this case we use the Fourier transform for $f_1(x) = \delta(x)$ from the previous problem to argue that the inverse Fourier transform of $\tilde{f}_4(k) = 1$ must be proportional to a delta distribution. The solution is then:

   $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \tilde{f}_4(k) e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, e^{ikx} = \delta(x).$$

   (c) To solve the Fourier transform of $f_5(x) = \cos(k_0 x)$ we apply the result for the Fourier transform of $f_3(x) = 1$. The solution is:

   $$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \cos(k_0 x) e^{-ikx} &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \left(e^{ik_0 x} + e^{-ik_0 x}\right) e^{-ikx} \\ &= \frac{1}{2}\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(k-k_0)x} + \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(k+k_0)x}\right) \\ &= \pi\left[\delta(k-k_0) + \delta(k+k_0)\right]\end{aligned}$$

   The result follows from the fact that both integrals are equivalent to performing the Fourier transform of 1, the only difference is that the added complex exponentials result in a shift in k-space.

(d) To solve the Fourier transform of a Gaussian function we will "complete the square" (Quadratische Ergänzung) in the exponential. then perform a change of variable, and finally use the known result for a Gaussian integral from the previous assignment.

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}_6(k) e^{ikx} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ak^2/2} e^{ikx} \\
&= e^{-x^2/2a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp\left[-\frac{a}{2}\left(k - i\frac{x}{a}\right)^2\right] \quad \text{Complete the square in the exponential} \\
&= e^{-x^2/2a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} e^{-az^2/2} \quad \text{Change of variables, } z = k - ix/a \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-x^2/2a} \quad \text{Use the known result for a Gaussian integral}
\end{aligned}$$

Although the variable z is complex, the Gaussian integral will converge so long as $a \in \mathbb{R}$ and $a > 0$.

2. This is solved by using integration by parts. We are given that $\tilde{g}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x) e^{-ikx}$. The solution is:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-i\frac{\partial g(x)}{\partial x}\right) e^{-ikx} &= \left[-i \lim_{x\to\infty} g(x) e^{-ikx}\right] - \left[-i \lim_{x\to-\infty} g(x) e^{-ikx}\right] + i \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x) \frac{\partial}{\partial x} e^{-ikx} \\
&= i \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x)(-ik) e^{-ikx} \quad \text{The boundary terms disappear since } \lim_{x\to\pm\infty} g(x) = 0 \\
&= k\tilde{g}(k)
\end{aligned}$$

3. The solution is just to show that the function provided satisfies the wave equation. The derivatives are:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) &= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega)\, \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(kx-\omega t)} = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega)\, (ik)^2 e^{i(kx-\omega t)} \\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x,t) &= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega)\, \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{i(kx-\omega t)} = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega)\, \frac{1}{c^2}(-i\omega)^2 e^{i(kx-\omega t)}
\end{aligned}$$

These two quantities must be equal in order to satisfy the wave equation, which means the following must be true

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x,t) = 0 \Rightarrow \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \tilde{\psi}(k,\omega) \left[-k^2 + \frac{1}{c^2}\omega^2\right] e^{i(kx-\omega t)} = 0$$

and so k and ω are related as follows:

$$k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \Rightarrow k = \pm\frac{\omega}{c}.$$

Aufgabe 2. Eindimensionaler harmonischer Oszillator (7 Punkte)

In dieser Aufgabe wiederholen wir Rechnungen, die Sie aus der klassischen Mechanik kennen. Wir betrachten einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit kinetischer Energie $T = \frac{m}{2}\dot{x}^2$ und potentieller Energie $V = \frac{m\Omega^2}{2}x^2$.

1. (1 Punkt) Wie lauten die Lagrange- und Hamiltonfunktion?

2. (4 Punkte) Stellen Sie in beiden Formalismen die Bewegungsgleichungen auf und lösen Sie eine von diesen (Lagrange oder Hamilton) für $x(t)$ und $p(t)$. Geben Sie deren Lösungen für die Anfangsbedingungen $x(t = 0) = x_0$ und $p(t = 0) = p_0$ an.

3. (2 Punkte) Drücken Sie die Hamiltonfunktion durch die zeitabhängigen Lösungen $x(t)$ und $p(t)$ aus Aufgabe 2.2 aus. Was fällt Ihnen bezüglich der Zeitabhängigkeit dieser Hamiltonfunktion auf? Was ist die physikalische Interpretation dieses Ergebnisses?

Lösung Aufgabe 2.

1. Die Lagrange-Funktion setzt sich aus kinetischer und potentieller Energie zusammen:
$$\mathcal{L}(\dot{x},x) = T - V = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\Omega^2}{2}x^2$$
$$\mathcal{H}(p,x) = \dot{x}p - \mathcal{L} = \dot{x}\cdot\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}} - \mathcal{L} = \dot{x}\cdot m\dot{x} - \mathcal{L} = m\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\Omega^2}{2}x^2 = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\Omega^2}{2}x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}x^2$$

2. Bewegungsgleichung aus Lagrange-Funktion:
$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{x}) = m\ddot{x}\\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x} &= -m\Omega^2 x\end{aligned}$$
Die Lagrange-Gleichung lautet:
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x} = 0$$
Damit gilt also:
$$m\ddot{x} + m\Omega^2 x = 0$$
Bewegungsgleichung aus Hamilton-Funktion:
Wir berechnen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:
$$\begin{aligned}\dot{x} &= \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}\\ \dot{p} &= -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial x} = -m\Omega^2 x\end{aligned}$$
Also folgt auch hier:
$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} = \frac{-m\Omega^2 x}{m} \quad\Leftrightarrow\quad \ddot{x} + \Omega^2 x = 0$$
Es handelt sich um eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung. Das charakterischtische Plynom dieser Gleichung lautet:
$$\lambda^2 + \Omega^2 = 0 \quad \Rightarrow \lambda = \pm i\Omega$$
Damit erhalten wir als Fundamentalsystem der Differentialgleichung:
$$x(t) = A'\exp(i\Omega t) + B'\exp(-i\Omega t) = A\sin(\Omega t) + B\cos(\Omega t)$$
Mit $\dot{x} = p/m$ erhalten wir einen Ausdruck für den Impuls
$$p(t) = m\Omega\left[A\cos(\Omega t) - B\sin(\Omega t)\right]$$
Die Anfangsbedingung ergibt
$$x(0) = B \Rightarrow B = x_0 \qquad p(0) = m\Omega A \Rightarrow A = \frac{p_0}{m\Omega}$$
Die vollständige Lösung ist damit
$$x(t) = x_0\cos(\Omega t) + \frac{p_0}{m\Omega}\sin(\Omega t) \qquad p(t) = p_0\cos(\Omega t) - m\Omega x_0\sin(\Omega t)$$

3. Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators ist $\mathcal{H}(x,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2$. Wir suchen die explizite Form für $\mathcal{H}(x(t),p(t))$. Dies ergibt einfach durch Einsetzen
$$\mathcal{H}(x(t),p(t)) = \frac{1}{2m}p(t)^2 + \frac{m\omega^2}{2}x(t)^2 = \frac{1}{2m}p_0^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_0^2 = \mathcal{H}(x(0),p(0))$$
Das Ergebnis ist eine zeitlich konstante Hamiltonfunktion, was wir für ein System ohne explizite Zeitabhängigkeit zu erwarten ist. Die physikalische Interpretation ist, dass der Hamiltonian, den wir mit der Gesamtenergie des Systems in Verbindung bringen ($\mathcal{H} = E_{\text{tot}}$), eine Erhaltungsgröße ist.

Aufgabe 3. Schwarzkörperstrahlung (4 Punkte)

Die spektrale Dichte, die die Strahlung eines schwarzen Körpers beschreibt, ist gegeben durch die Planck Funktion. Wie wir in der Vorlesung gesehen haben kann die Planck Funktion für eine bestimmte Wellenlänge λ bei einer Temperatur T geschrieben werden als:

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}$$

In dieser Gleichung beschreibt h die Planck Konstante, k_B die Boltzmann Konstante und c die Lichtgeschwindigkeit.

1. (2 Punkte) Bevor Planck die korrekte spektrale Beschreibung der Schwarzkörperstrahlung entdeckte, fanden zwei englische Physiker, Lord Rayleigh und James Jeans, eine Formel, die nur im Bereich langer Wellenlängen angewendet werden kann. Leiten Sie das Rayleigh-Jeans Gesetz her, indem Sie die Planck Funktion im Grenzfall großer Wellenlängen $\lambda \gg hc/k_B T$ auswerten. Die Planck Konstante wird in dieser Lösung verschwinden. Das Rayleigh-Jeans Gesetz ist ein klassisches Ergebnis, das die "Ultraviolettkatastrophe", die bei kurzen Wellenlängen auftritt, nicht vermeiden kann.

2. (2 Punkte) Erinnern Sie sich, dass die Frequenz ν und die Wellenlänge λ des Lichts der Relation $\nu\lambda = c$ gehorchen. Bestimmen Sie die Form der Planck Funktion in Bezug auf die Frequenz ν bei Temperatur T, $B_\nu(T)$, indem Sie die oben gegebene Formel für $B_\lambda(T)$ benutzen. Tipp: Integration der Planck Funktion ergibt die Intensität der Schwarzkörperstrahlung. Die Strahlungsintensität über eine Wellenlängenintervall (λ_1, λ_2), was durch folgendes Integral gegeben ist

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda\, B_\lambda(T)\,,$$

muss dasselbe Ergebnis liefern, wie die Strahlungsintensität, die Sie durch Integration von $B_\nu(T)$ über das entsprechende Frequenzintervall erhalten.

Lösung Aufgabe 3.

1. For this problem we use the Taylor expansion for the exponential function $e^x = 1 + x + \ldots$ where $x = hc/\lambda k_B T$. Assuming that $\lambda \gg hc/k_B T$ is equivalent to assuming that $x \ll 1$, so we truncate the Taylor expansion to linear order since the higher order terms are assumed to be very small. The result is therefore

$$\frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \Rightarrow \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{1 + \left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} = \frac{2ck_B T}{\lambda^4}$$

which is the Rayleigh-Jeans Law.

2. For the wavelength interval (λ_1, λ_2), the related frequency interval is (ν_2, ν_1), where $\lambda_1\nu_1 = \lambda_2\nu_2 = c$. Note that the order has swapped, due to the fact that if $\lambda_1 < \lambda_2$ then $\nu_1 > \nu_2$. The following integrals should therefore be the same:

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda\, B_\lambda(T) = \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, B_\nu(T)$$

and the solution is obtained by a change of variables in the integral. The solution is then

$$\begin{aligned}
\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda\, B_\lambda(T) &= \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda\, \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \\
&= \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, \frac{2hc^2}{[c/\nu]^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{[c/\nu] k_B T}\right) - 1} \left(\frac{d}{d\nu}\frac{c}{\nu}\right) \\
&= \int_{\nu_2}^{\nu_1} d\nu\, \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \qquad \text{Note that the limits of integration have been swapped}
\end{aligned}$$

The Planck Formula in terms of frequency must therefore be:

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}.$$

If we had just performed a simple substitution $\lambda = c/\nu$ in the original expression the result would not be correct since the units would be the same. $B_\lambda(T)$ expresses spectral radiance per unit wavelength, and it does not make sense for $B_\nu(T)$ to also express spectral radiance in the same units; $B_\nu(T)$ must express spectral radiance per unit wavelength and so must have different units. Since frequency and wavelength have an inverse relationship, the scaling for the two functions is going to be very different.