
Moderne Theoretische Physik I

Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 2

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 05.05.2023, 14:00 Uhr

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

Aufgabe 1. Klassische Wirkung (6 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die klassische Wirkung am Beispiel des freien Teilchens diskutiert. In dieser Aufgabe wenden wir uns zwei anderen Beispielen zu.

- (3 Punkte) Betrachten Sie einen harmonischen Oszillator mit der Lagrangefunktion $L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$. Zeigen Sie, dass die klassische Wirkung für ein Zeitintervall $T = t_b - t_a$ mit $x(t_a) = x_a$ und $x(t_b) = x_b$ gegeben ist durch

$$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a]. \quad (1)$$

- (3 Punkte) Finden Sie die klassische Wirkung S_{cl} für ein Teilchen, das sich im Feld einer konstanten Kraft F befindet. Nehmen Sie an, dass der Lagrangian für diesen Fall gegeben ist durch $L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + Fx$. Anmerkung: Sie können dieselben Anfangsbedingungen wie in Aufgabe 1.1 verwenden.

Lösung Aufgabe 1.

- (3 Punkte) The Euler-Lagrange equation for this oscillator is

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

We know the solution for this differential equation is of the form

$$x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

We can use the conditions $x(t_a) = x_a$ and $x(t_b) = x_b$ to solve for the coefficients

$$A = \frac{1}{\sin(\omega[t_b - t_a])} (x_a \sin(\omega t_b) - x_b \sin(\omega t_a)) \quad B = \frac{1}{\sin(\omega[t_b - t_a])} (-x_a \cos(\omega t_b) - x_b \cos(\omega t_a))$$

The expressions for $x(t)$ and $\dot{x}(t)$ are therefore

$$x(t) = \frac{1}{\sin(\omega[t_b - t_a])} [x_a \sin(\omega[t_b - t]) + x_b \sin(\omega[t - t_a])] \\ \dot{x}(t) = \frac{\omega}{\sin(\omega[t_b - t_a])} [-x_a \cos(\omega[t_b - t]) + x_b \cos(\omega[t - t_a])]$$

From here we could directly solve the integral for the classical action

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$$

by direct substitution, but there it is easier to use integration by parts and then the Euler-Lagrange equation to eliminate the integrals, leaving us with boundary terms to evaluate.

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt (\dot{x}(t)^2 - \omega^2 x(t)^2) \\ &= \frac{m}{2} \left(\left[\dot{x}(t)x(t) \right]_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} dt x(t)\ddot{x}(t) \right) - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \omega^2 x(t)^2 \quad \text{integration by parts on the integral of } \dot{x}(t)^2 \\ &= \frac{m}{2} \left(\left[\dot{x}(t)x(t) \right]_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} dt x(t)(-\omega^2 x(t)) \right) - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \omega^2 x(t)^2 \quad \text{replace } \ddot{x}(t) \text{ using Euler-Lagrange} \\ &= \frac{m}{2} (\dot{x}(t_b)x(t_b) - \dot{x}(t_a)x(t_a)) \\ &= \frac{m}{2} (\dot{x}(t_b)x_b - \dot{x}(t_a)x_a) \\ &= \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} \left[(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b \right] \quad \text{defining } T = t_b - t_a \end{aligned}$$

2. (3 Punkte) The Euler-Lagrange equation for this system is

$$m\ddot{x} = f$$

The general solution for this is

$$x(t) = \frac{f}{2m} t^2 + At + B$$

Using the same initial conditions we can solve for the constants

$$A = \frac{1}{t_b - t_a} \left[(x_b - x_a) + \frac{f}{2m} (t_b^2 - t_a^2) \right] \quad B = \frac{x_a t_b - x_b t_a}{t_b - t_a} + \frac{f}{2m} t_a t_b$$

Having applied the initial condition, we arrive at the following expressions for $x(t)$ and $\dot{x}(t)$

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{f}{2m} (t - t_b)(t - t_a) + \frac{1}{t_b - t_a} [x_a(t_b - t) + x_b(t - t_a)] \\ \dot{x}(t) &= \frac{f}{2m} [(t - t_a) + (t - t_b)] + \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} \end{aligned}$$

We can now write the Lagrangian using these expressions, and the result is a bit ugly

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 + fx(t) \\ &= \frac{f^2}{m} t^2 + \left(-\frac{f^2}{m} (t_a + t_b) + 2f \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} \right) t \\ &\quad + \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)^2} + \frac{f^2}{m} \left[\frac{1}{8} (t_b - t_a)^2 + t_a t_b \right] + \frac{f}{2(t_b - t_a)} [(x_a t_a - x_b t_b) + 3(x_a t_b - x_b t_a)] \end{aligned}$$

Since it is only a polynomial in time integration of the Lagrangian is easy. The classical action is then

$$S_{cl} = \int_{t_b}^{t_a} dt \mathcal{L} = -\frac{f^2}{24m} T^3 + \frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{f}{2} (x_b + x_a) T \quad \text{where } T = t_b - t_a$$

The classical action of these system are invariant under time-translation, so we could have used the initial conditions $x(0) = x_a$ and $x(t_b - t_a) = x_b$ and arrived at the same answer.

Aufgabe 2. Wahrscheinlichkeitsverteilungen (8 Punkte)

Eine Menge von Zuständen und die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x)$ beschreiben eine Zufallsvariable x . Die charakteristische Funktion $G(k)$ stellt eine alternative Beschreibung von Zufallsvariablen dar. Mit der charakteristischen Funktion $G(k)$ kann man die Momente einer Verteilung bestimmen. Außerdem ist der natürliche Logarithmus von $G(k)$ die kumulantenenerzeugende Funktion.

- (2 Punkte) Die charakteristische Funktion $G(k)$ ist definiert als die Fourier Transformation der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x)$. Betrachten Sie die charakteristische Funktion einer Zufallsvariable x mit Erwartungswert μ_1 und Varianz σ^2

$$G(k) = e^{-ik\mu_1 - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2}. \quad (2)$$

Berechnen Sie die Verteilung $p(x)$ für diese charakteristische Funktion. Wie heißt diese Verteilung? Zeigen Sie, dass die Verteilung normalisiert ist.

- (6 Punkte) Die momenterzeugende Funktion von zwei Zufallsvariablen x und y kann ausgedrückt werden als

$$G(k_1, k_2) = \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} (ik_2)^{m_2}}{m_1! m_2!} \langle x^{m_1} y^{m_2} \rangle. \quad (3)$$

Betrachten Sie die bivariate Gaußverteilung

$$p(x, y) = \frac{1}{\mathcal{N}} e^{-\frac{1}{2}(ax^2 + 2bxy + cy^2)} \quad (4)$$

wobei $a > 0$ und $(ac - b^2) > 0$. \mathcal{N} ist eine Konstante, die die Normalisierung von $G(k_1, k_2)$ in $k_1 = k_2 = 0$ sicherstellt. Berechnen Sie die charakteristische Funktion und bestimmen Sie \mathcal{N} , die kumulantenenerzeugende Funktion und die Kovarianzmatrix, wobei die Elemente der Kovarianzmatrix definiert sind als

$$V_{ij} = \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle = - \left. \frac{d}{dk_i} \frac{d}{dk_j} \ln G(k_1, k_2) \right|_{k_1=k_2=0} \quad (5)$$

wobei $i, j \in \{1, 2\}$ mit $x_1 = x$ und $x_2 = y$. Die off-diagonalen Elemente der Kovarianzmatrix stellen ein Maß der Korrelationen dar. Sind die beiden Zufallsvariablen in unserem Beispiel korreliert?

Lösung Aufgabe 2.

- one point for:

$$\begin{aligned} p(x) &= \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} e^{-ik\mu_1 - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2} = e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu_1)^2} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{\sigma^2}{2} [k - \frac{i}{\sigma^2}(x-\mu_1)]^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu_1)^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\sigma^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu_1)^2} \end{aligned}$$

where we used $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x+b)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$.

0.5 points for: Gaussian distribution and 0.5 points for normalization:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int dx e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x+\mu_1)^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sqrt{2\pi\sigma^2} = 1$$

2. characteristic function (1.5 points)

$$\begin{aligned}
G(k_1, k_2) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int dx \int dy e^{-ik_1x} e^{-ik_2y} e^{-\frac{1}{2}(ax^2+2bxy+cy^2)} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \int dx e^{-ik_1x - \frac{a}{2}x^2} e^{+\frac{1}{2c}(bx+ik_2)^2} \int dy e^{-\frac{c}{2}(y+\frac{1}{c}(bx+ik_2))^2} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2\pi}{c}} \int dx e^{-\frac{a}{2}x^2 - ik_1x} e^{+\frac{1}{2c}(bx+ik_2)^2} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2\pi}{c}} e^{-\frac{1}{2c}k_2^2} e^{-\frac{[ac-b^2]}{2c} \left(+\frac{c^2}{[ac-b^2]^2} \{k_1 - \frac{b}{c}k_2\}^2 \right)} \int dx e^{-\frac{[ac-b^2]}{2c} \left(x + i\frac{c}{[ac-b^2]} \{k_1 - \frac{b}{c}k_2\} \right)^2} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{2\pi}{\sqrt{[ac-b^2]}} e^{-\frac{1}{2c}k_2^2} e^{-\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1 - \frac{b}{c}k_2\}^2} = \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{2\pi}{\sqrt{[ac-b^2]}} e^{-\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1^2 - 2\frac{b}{c}k_1k_2 + \frac{b^2}{c^2}k_2^2\} - \frac{1}{2c}k_2^2}
\end{aligned}$$

(0.5 points):

$$G(k_1 = 0, k_2 = 0) = 1 = \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{2\pi}{\sqrt{[ac-b^2]}} \Rightarrow \mathcal{N} = \frac{2\pi}{\sqrt{[ac-b^2]}}$$

the covariance matrix contains all second central moments/ second cumulants. The cumulant generating function becomes

$$\ln G(k_1, k_2) = -\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1^2 - 2\frac{b}{c}k_1k_2 + \frac{b^2}{c^2}k_2^2\} - \frac{1}{2c}k_2^2$$

the elements of the covariance matrix can be derived via the derivatives

$$\langle\langle x^{n_1} y^{n_2} \rangle\rangle = \langle x^{n_1} y^{n_2} \rangle - \langle x^{n_1} \rangle \langle y^{n_2} \rangle = (i)^{-n_1} (i)^{-n_2} \frac{d^{n_1}}{dk_1^{n_1}} \frac{d^{n_2}}{dk_2^{n_2}} \ln G(k_1, k_2) \Big|_{k_1=k_2=0}$$

which gives us (1 point each)

$$\begin{aligned}
\langle\langle x^2 \rangle\rangle &= (i)^{-2} \frac{d^2}{dk_1^2} \ln G(k_1, k_2) \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= (i)^{-2} \frac{d^2}{dk_1^2} \left[-\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1^2 - 2\frac{b}{c}k_1k_2 + \frac{b^2}{c^2}k_2^2\} - \frac{1}{2c}k_2^2 \right] \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= \frac{c}{2[ac-b^2]} \frac{d}{dk_1} \left[\{2k_1 - 2\frac{b}{c}k_2\} \right] \Big|_{k_1=k_2=0} = \frac{c}{[ac-b^2]} \\
\langle\langle y^2 \rangle\rangle &= (i)^{-2} \frac{d^2}{dk_2^2} \ln G(k_1, k_2) \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= -\frac{d^2}{dk_2^2} \left[-\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1^2 - 2\frac{b}{c}k_1k_2 + \frac{b^2}{c^2}k_2^2\} - \frac{1}{2c}k_2^2 \right] \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= -\frac{d}{dk_2} \left[-\frac{c}{2[ac-b^2]} \{-2\frac{b}{c}k_1 + 2\frac{b^2}{c^2}k_2\} - \frac{1}{c}k_2 \right] \Big|_{k_1=k_2=0} = \frac{a}{[ac-b^2]}
\end{aligned}$$

and the cross-correlator (1 point):

$$\begin{aligned}
\langle\langle xy \rangle\rangle &= (i)^{-2} \frac{d}{dk_1} \frac{d}{dk_2} \ln G(k_1, k_2) \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= \frac{d}{dk_1} \frac{d}{dk_2} \left[\frac{c}{2[ac-b^2]} \{k_1^2 - 2\frac{b}{c}k_1k_2 + \frac{b^2}{c^2}k_2^2\} + \frac{1}{2c}k_2^2 \right] \Big|_{k_1=k_2=0} \\
&= \frac{d}{dk_1} \left[\frac{c}{2[ac-b^2]} \{-2\frac{b}{c}k_1 + 2\frac{b^2}{c^2}k_2\} + \frac{1}{c}k_2 \right] \Big|_{k_1=k_2=0} = -\frac{b}{[ac-b^2]}
\end{aligned}$$

leading to the covariance matrix (0.5 points)

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \langle\langle x^2 \rangle\rangle & \langle\langle xy \rangle\rangle \\ \langle\langle yx \rangle\rangle & \langle\langle y^2 \rangle\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{[ac - b^2]} \begin{pmatrix} c & -b \\ -b & a \end{pmatrix}$$

from the off-diagonal elements we see that both variables are correlated (0.5 points)

Aufgabe 3. Wellenpaket und Kontinuitätsgleichung

Auf dem letzten Blatt haben wir die klassische Wellengleichung betrachtet. Die Wellenfunktionen, die wir in der Quantenmechanik betrachten, verhalten sich ein bisschen anders. In dieser Aufgabe wollen wir ein Gefühl für die quantenmechanischen Wellenfunktionen bekommen. Dafür betrachten wir die zeitabhängige Wellenfunktion (mit $\sigma > 0$)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{\sigma \left(1 + i \frac{\hbar t}{2m\sigma^2}\right)}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma^2 \left(1 + i \frac{\hbar t}{2m\sigma^2}\right)}\right). \quad (6)$$

- (1 Punkt) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ zu allen Zeiten auf 1 normiert ist.
- (2 Punkt) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ die Schrödingergleichung eines freien Teilchens erfüllt. Diese ist gegeben durch

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x, t). \quad (7)$$

- (1 Punkt) Skizzieren Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ zu verschiedenen Zeitpunkten $t' = \frac{t}{\tau}$, wobei $\tau = \frac{2m\sigma^2}{\hbar}$. Wie verändert sich die Form des Wellenpakets für große Zeiten?
- (2 Punkte) Berechnen Sie den Wahrscheinlichkeitsstrom (hier in einer Dimension)

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(x, t) \partial_x \psi(x, t) - (\partial_x \psi^*(x, t)) \psi(x, t)] \quad (8)$$

und zeigen Sie schließlich, dass die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho(x, t) + \partial_x j(x, t) = 0 \quad (9)$$

erfüllt. (Tipp: Wenn Sie viel rechnen wollen, berechnen Sie die Ableitungen explizit. Wenn sie wenig rechnen wollen, zeigen Sie, dass mit Erfüllung der Schrödingergleichung, auch die Kontinuitätsgleichung gilt). Wie interpretieren Sie die Kontinuitätsgleichung?

Lösung Aufgabe 3.

- (1 Punkte) Die Wellenfunktion ist normiert, wenn gilt, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1. \quad (10)$$

Für die angegebene Wellenfunktion gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi\beta_t}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2\beta_t}} \quad (11)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \quad (12)$$

$$= 1 \quad (13)$$

wobei $\beta_t = 1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma^2}\right)^2$. Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zu einer Zeit t irgendwo Raum zu finden, ist 1.

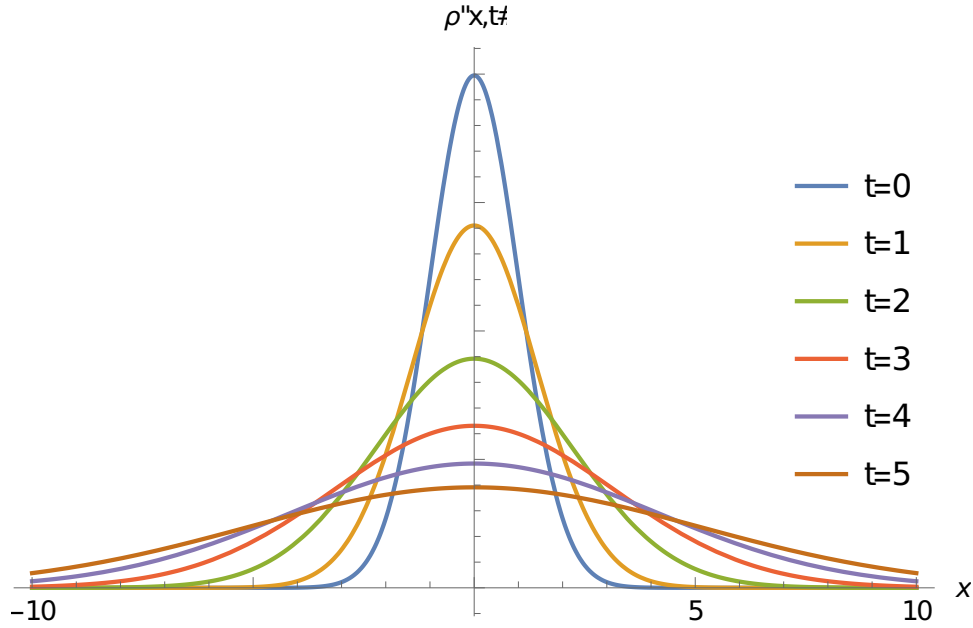


Figure 1: Das Wellenpaket zerfließt für große Zeiten t' .

2. (2 Punkte) Wir setzen die Wellenfunktion in die Schrödingergleichung ein. Dafür berechnen wir zunächst die linke Seite der Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \left(1 - \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \frac{1}{(1+i\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})}\right) \frac{\hbar^2}{4m\sigma^2(1+i\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})}\psi(x,t). \quad (14)$$

Die rechte Seite der Schrödingergleichung ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) = \left(1 - \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \frac{1}{(1+i\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})}\right) \frac{\hbar^2}{4m\sigma^2(1+i\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})}\psi(x,t) \quad (15)$$

und damit identisch mit der linken Seite. Somit erfüllt die Wellenfunktion die Schrödingergleichung.

3. (1 Punkte) Wir skizzieren das Wellenpaket für verschiedene Zeiten $t' = \frac{t}{\tau}$ (s. Abb. 1). Für kleine Zeiten $t < \tau$ zerfließt das Wellenpaket erst langsam, für große Zeiten $t > \tau$ dann immer schneller.
4. (2 Punkte) Aus Aufgabe 3.1 kennen wir schon die Wahrscheinlichkeitsdichte. Wir schreiben die Zeitableitung als

$$\partial_t\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\partial_t\psi(x,t) + (\partial_t\psi^*(x,t))\psi(x,t). \quad (16)$$

Für die Ableitung des Wahrscheinlichkeitsstroms gilt

$$\partial_x j(x,t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(x,t)\partial_x^2\psi(x,t) - (\partial_x^2\psi^*(x,t))\psi(x,t)]. \quad (17)$$

Nun setzen wir beides in die Kontinuitätsgleichung ein und sortieren die Terme um

$$\partial_t\rho(x,t) + \partial_x j(x,t) = \psi^*(x,t) \left[\partial_t\psi(x,t) + \frac{\hbar}{2im}\partial_x^2\psi(x,t) \right] \quad (18)$$

$$+ \psi(x,t) \left[\partial_t\psi^*(x,t) - \frac{\hbar}{2im}\partial_x^2\psi^*(x,t) \right] \quad (19)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\psi^*(x,t) \left[i\hbar\partial_t\psi(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) \right] \quad (20)$$

$$+ \frac{i}{\hbar}\psi(x,t) \left[-i\hbar\partial_t\psi^*(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi^*(x,t) \right]. \quad (21)$$

In den eckigen Klammer steht nun die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) = 0 \quad (22)$$

bzw. die komplex konjugierte Schrödingergleichung

$$-i\hbar\partial_t\psi^*(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi^*(x,t) = 0. \quad (23)$$

Damit muss gelten, dass

$$\partial_t\rho(x,t) + \partial_x j(x,t) = 0 \quad (24)$$

für alle Wellengleichungen, die die Schrödingergleichung erfüllen. Intuitiv können wir die Kontinuitätsgleichung verstehen: Betrachten wir die Wellenfunktion eines Teilchens in ein Volumen V . Der erste Term beschreibt die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeit, in diesem Volumen ein Teilchen zu finden. Der zweite Term beschreibt den Wahrscheinlichkeitsfluss durch die Oberfläche dieses Volumens. Fließt Wahrscheinlichkeit aus dem Volumen raus, sinkt die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in diesem Volumen zu finden und umgekehrt.