Heiko Dumlich, Max Hoffmann 10. Mai 2007

3. Übungsblatt Atom- und Molekülphysik

3.1

Es sind Erwartungswerte und Mittelwerte zu berechnen und zu vergleichen. Wir definieren:

Erwartungswert: $\langle x \rangle = \dfrac{\int_a^b x\, f(x)\, dx}{\int_a^b f(x) dx}$

Mittelwert: $\bar{x} = \frac{1}{(b-a)} \int_a^b x\, dx$, bzw. diskret $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$.

a) $f(x) = x$, $I = [0, b]$, Normierung: $\int_0^b x\, dx = 1 \Rightarrow b = \sqrt{2}$.

Erwartungswert: $\langle x \rangle = \dfrac{\int_0^b x^2 dx}{\int_0^b x\, dx} = \dfrac{\frac{1}{3}[x^3]_0^b}{\frac{1}{2}[x^2]_0^b} = \frac{2}{3} b \overset{b=\sqrt{2}}{=} \sqrt{\frac{8}{9}}$.

Mittelwert: $\bar{x} = \frac{1}{b} \int_0^b x\, dx = \frac{1}{b} \frac{b^2}{2} = \frac{b}{2} \underset{b=\sqrt{2}}{=} \sqrt{\frac{1}{2}}$.

Vergleich: $\langle x \rangle \neq \bar{x}$.

b) $g(x) = c$, $I = [a, b]$, Normierung: $\int_a^b c\, dx = 1 \Rightarrow c = \frac{1}{(b-a)}$.

Erwartungswert: $\langle x \rangle = \dfrac{\int_a^b x c\, dx}{\int_a^b c\, dx} = \dfrac{\int_a^b x\, dx}{\int_a^b 1\, dx} = \dfrac{[\frac{1}{2}x^2]_a^b}{(b-a)} = \frac{1}{2} \frac{b^2 - a^2}{(b-a)} = \frac{b+a}{2}$.

Mittelwert: $\bar{x} = \frac{1}{(b-a)} \int_a^b x\, dx = \frac{b+a}{2}$.

Vergleich: $\langle x \rangle = \bar{x}$, wie erwartet, da konstante Funktion!

c) diskret: $h(1) = 1$, $h(2) = 2$, $h(3) = 1$, sonst null. Delta-Funktionen $h(x) = \delta(x-1) + 2\delta(x-2) + \delta(x-3)$.

Erwartungswert: $\langle x \rangle = \dfrac{\int_{-\infty}^{\infty} x\, h(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx} = \dfrac{1 + 2 \cdot 2 + 3}{1+2+1} = \frac{8}{4} = 2$.

Mittelwert: $\bar{x} = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{3} x_n = \frac{1+2+3}{3} = \frac{6}{3} = 2$

Vergleich: $\langle x \rangle = \bar{x}$, wie erwartet, auf Grund der Symmetrie!

d) diskret: $h(1) = 1$, $h(2) = 2$, $h(4) = 1$, sonst null. $\Rightarrow h(x) = \delta(x-1) + 2\delta(x-2) + \delta(x-4)$.

Erwartungswert: $\langle x \rangle = \dfrac{\int_{-\infty}^{\infty} x\, j(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} j(x) dx} = \dfrac{1 + 2 \cdot 2 + 4}{1+2+1} = \frac{9}{4}$.

Mittelwert: $\bar{x} = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{3} x_n = \frac{1+2+4}{3} = \frac{7}{3}$.

Vergleich: $\langle x \rangle \neq \bar{x}$.

Gesamtvergleich: Für a) und d) sind Mittel- und Erwartungswerte verschieden, für b) und c) identisch, dies folgt aus der Wichtung und der Asymmetrie.

3.2

Z: Eigenwerte zu hermitischen Operatoren sind stets reell.

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ hermitesch, mit Eigenwerten

$\hat{A}|a\rangle = \alpha|a\rangle$ $\langle a|\hat{A}^\dagger = \alpha^*$.

$\Rightarrow \quad \alpha\langle a|a\rangle = \langle a|\alpha|a\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = \langle a|\alpha^*|a\rangle = \alpha^*\langle a|a\rangle$

$\Rightarrow \quad \alpha = \alpha^*$ $\square$, d.h. $\alpha \in \mathbb{R}$, da $\alpha = \alpha^*$ nur für reelle Zahlen gelten kann, wobei * komplexe Konjugation bedeutet. D.h. die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell.

3.3

Z: Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten eines hermiteschen Operators orthogonal sind.

$\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ hermitesch, mit Eigenwerten

$\hat{O}|a\rangle = \alpha|a\rangle$, $\hat{O}|b\rangle = \beta|b\rangle$, bzw. $\langle b|\hat{O}^\dagger = \beta^*\langle b| \overset{\text{s. 3.2}}{=} \beta\langle b|$

$\Rightarrow \quad 0 = \hat{O} - \hat{O} = \langle b|\hat{O} - \hat{O}|a\rangle = \langle b|\hat{O}^\dagger - \hat{O}|a\rangle = (b-a)\langle b|a\rangle$

Fallunterscheidung:

$b = a \quad \Rightarrow \quad 0 = \underbrace{(a-a)}_{=0}\langle a|a\rangle$

$b \neq a \quad \Rightarrow \quad 0 = \underbrace{(b-a)}_{\neq 0}\underbrace{\langle b|a\rangle}_{=0}$,

da für $b \neq a$ $(b-a) \neq 0$ ist, muss das Skalarprodukt 0 werden, aber dies ist gerade die zu zeigende Orthogonalität. $\square$

3.4

$|a\rangle$ sei Eigenzustand von H mit $H|a\rangle = \alpha|a\rangle$. Es gilt $[H,U] = 0$.

$\Rightarrow \quad H(U|a\rangle) = UH|a\rangle = \alpha(U|a\rangle) \quad \Rightarrow \quad |b\rangle = U|a\rangle$ ist Eigenzustand zu H mit Eigenwert α. $\Rightarrow$ $H|b\rangle = \alpha|b\rangle$, mit α nicht-entartet $\Rightarrow |b\rangle = \beta|a\rangle \Leftrightarrow U|a\rangle = \beta|a\rangle \Leftrightarrow |a\rangle$ Eigenzustand zu U.

3.4) counter example

Let

$$\hat{H} \doteq \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ and } \hat{U} \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

linear operators.

Those two operators fulfill the commutator relation

$$[\hat{H}, \hat{U}] = 0 .$$

But $\hat{H}$ doesn't have any eigenvectors or rather eigenfunctions. The definition of eigenvector

$$\hat{H}\vec{v} = \lambda \vec{v}$$

yields

$$x = -\lambda y$$
$$y = \lambda x$$

which either allows $x = y = 0$ but that is no eigenvector or $\lambda = 0$ which can't be true either since $\hat{H}$ is unitary. Since $\hat{H}$ has no eigenfunctions, it cannot have common eigenfunctions with $\hat{U}$. In conclusion the proposition is false.

<u>Remark</u>: I am aware of the fact that the problem probably refers to hermite operators and that one can expand eigenvectors of a hermite operator in terms of eigenvectors of any other hermite operator within one Hilbert space. However this was not given at all. I am happy to comment on this personally.

3.5

Es ist zu zeigen, dass für die Gruppengeschwindigkeit v_{gr} mit $v_{gr} = \frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt}$, der Ausdruck $\langle \vec{\nabla}_k \omega \rangle$ äquivalent ist.

Es gilt:

$$\frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle i\vec{\nabla}_k\rangle = \frac{d}{dt}\langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle$$

$$= \langle\dot{\tilde{\psi}}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle + \langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\dot{\tilde{\psi}}\rangle .$$

Mit $\tilde{\psi}(\omega,t) = \int d\vec{r}\ \psi(\vec{r})\ e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ folgt für die Zeitableitung (wir nutzen Leibniz $\frac{d}{dt}\int d\vec{r}\ldots = \int d\vec{r}\,\frac{d}{dt}$):

$$\frac{d}{dt}\tilde{\psi}(\omega,t) = -i\omega\int d\vec{r}\ \psi(\vec{r})\ e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = -i\omega\,\tilde{\psi}(\omega,t) ,$$

d.h. $|\dot{\tilde{\psi}}\rangle = -i\omega|\tilde{\psi}\rangle$ und $\langle\dot{\tilde{\psi}}| = i\omega\langle\tilde{\psi}|$. Gehen wir damit ein, erhalten wir:

$$\frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt} = \langle\dot{\tilde{\psi}}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle + \langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\dot{\tilde{\psi}}\rangle$$

$$= i\omega\langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle + \langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k\left(-i\omega|\tilde{\psi}\rangle\right) \text{, Ausführen}$$

der Produktregel ⇒ (da $\omega = \omega(k)$)

$$= i\omega\langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle + \langle\tilde{\psi}|\vec{\nabla}_k(\omega)|\tilde{\psi}\rangle - i\omega\langle\tilde{\psi}|i\vec{\nabla}_k|\tilde{\psi}\rangle$$

$=0$

$$= \langle\tilde{\psi}|\vec{\nabla}_k(\omega)|\tilde{\psi}\rangle = \langle\vec{\nabla}_k\,\omega\rangle \qquad \square$$

3.6) A gaussian intensity distribution is given by

$$I(t) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t}{\tau_a}\right)^2} = e^{-\frac{1}{2\tau_a^2}t^2}$$

The distribution in terms of ω is a fourier transform of the former:

$$\tilde{I}(\omega) = \int dt\, e^{-\frac{1}{2\tau_a^2}t^2 + it\omega}$$

Now we have to do some serious substituting to solve this gaussian integral. Let's first complete the square:

$$-\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{t}{\tau_a} - \frac{i\tau_a\omega}{\sqrt{2}}\right)^2 = -\frac{1}{2\tau_a^2} + it\omega + \frac{\tau_a^2\omega^2}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\tau_a^2}t^2 + it\omega = -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{t}{\tau_a} - \frac{i\tau_a\omega}{\sqrt{2}}\right)^2 - \frac{\tau_a^2\omega^2}{2}$$

And now we substitute

$$\tilde{t} = \frac{t}{\sqrt{2}\tau_a} - \frac{i\tau_a\omega}{2} \Rightarrow dt = \sqrt{2}\tau_a d\tilde{t}$$

$$\Rightarrow \tilde{I}(\omega) = e^{-\frac{\tau^2\omega^2}{2}}\sqrt{2}\tau_a \int d\tilde{t}\, e^{-\tilde{t}^2}$$

$$= \sqrt{2\pi}\,\tau_a e^{-\tau^2\omega^2/2}$$

$I(t)$ has its maximum at $t = 0$: $I(0) = 1$

Searching for FWHM we demand

$$I(t) \stackrel{!}{=} 1/2$$

$$e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t}{\tau_a}\right)^2} = \frac{1}{2} \quad \Big| \ln()$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{t}{\tau_a}\right)^2 = \ln 2$$

$$\Rightarrow \quad t_{1/2} = \pm \tau_a \sqrt{2\ln 2}$$

$\hat{I}(\omega)$ also has its peak at $\omega = 0$: $\hat{I}(0) = \sqrt{2\pi}\,\tau_a$

Since scaling is irrelevant here we simply demand

$$e^{-\tau_a^2\omega^2/2} = 1/2 \quad \Big| \ln()$$

$$\Rightarrow \quad \omega^2\tau_a^2 = 2\ln 2$$

$$\omega_{1/2} = \pm \frac{\sqrt{2\ln 2}}{\tau_a}$$

<u>Addendum:</u> The definition of c_B in the manuscript is too large by a factor 2. Also for $\tilde{I}(\omega)$ one only considers the spectrum which yields another factor 2. This results in the same c_B as if one takes the <u>wrong</u> definition with HWHM both times. The arithmetical steps are identical each time.