Übungen zur Vorlesung „Nichtlineare Dynamik II“, SS 2017

6. Übungsblatt vom 22.06.2017

Scheinkriterien: Je 50 % der Schriftlichen- und Votierpunkte, sowie Vorrechnen.
Schriftliche Abgaben sind in PDF-Form (möglichst ein Dokument) beim Tutor per Mail abzugeben. Dieses soll eventuelle Rechnungen und geforderte Diagramme enthalten und mögliche Fragen beantworten. Die zusätzliche Abgabe von Quellcode ist ebenfalls möglich, ersetzt jedoch nicht die Abgabe der Lösungen in PDF Form, sondern dient der Auffindung möglicher Fehler.

- Matthias Feldmaier: matthias.feldmaier@itp1.uni-stuttgart.de

Abgabe: **09.07.2017** Besprechung: **12.07.2017**

Aufgabe 11: Feynman-Propagator des harmonischen Oszillators 15 (schriftlich) Punkte

Um in der Quantenmechanik Übergangsamplituden zu berechnen, wird ein genäherter Ausdruck für die Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators benötigt. Dabei gilt

$$\psi(\boldsymbol{r},\, t) = U(t)\,\psi(\boldsymbol{r},\, 0) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\, K\left(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, t\right)\psi(\boldsymbol{r},\, 0)$$

mit

$$K\left(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, t\right) = \left\langle \boldsymbol{r}\left|U(t)\right|\boldsymbol{r}'\right\rangle.$$

Betrachtet man nun einen Hamiltonoperator der Form

$$H = T + V = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V,$$

so kommutieren T und V im Allgmeinen nicht. Wenn man jedoch t durch δt ersetzt und den Grenzfall $\delta t \to 0$ betrachtet, gilt nach der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$U(\delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t[T+V]} = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t T} e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t V} + \mathcal{O}\left(\delta t^2\right)$$

und wir können

$$K\left(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, \delta t\right) = \left\langle \boldsymbol{r}\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t T}\right|\boldsymbol{r}'\right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t V(\boldsymbol{r}')} + \mathcal{O}\left(\delta t^2\right)$$

schreiben. Mit der Identität $\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\, |\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|$ folgt

$$\begin{aligned}
\left\langle \boldsymbol{r}\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t T}\right|\boldsymbol{r}'\right\rangle &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\, \exp\left[-\frac{i\delta t}{2\hbar m}p^2\right]\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&= \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\, \exp\left[-\frac{i\delta t}{2\hbar m}p^2\right]\frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right)\right] \\
&= \prod_{j=1}^{d}\left\{\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_j\, \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\delta t}{2m}p_j^2 - p_j\left(r_j - r_j'\right)\right)\right]\right\}.
\end{aligned}$$

Mit dem Fresnel-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, e^{i\alpha x^2} = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, e^{-(\varepsilon - i\alpha)x^2} = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon - i\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}e^{i\frac{\pi}{4}\mathrm{sgn}(\alpha)},$$

wobei $\sqrt{-i} = e^{-i\frac{\pi}{4}}$ gesetzt wird, lässt sich obiges Integral lösen und man erhält

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r} \left| e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t T} \right| \boldsymbol{r}' \right\rangle &= \prod_{j=1}^{d} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\delta t}\left(r_j - r_j'\right)^2\right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{\frac{d}{2}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\delta t}\left(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right)^2\right].\end{aligned}$$

Wir können nun in

$$K\left(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \delta t\right) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{\frac{d}{2}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta t \left(\frac{m}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'}{\delta t}\right)^2 - V\left(\boldsymbol{r}'\right)\right)\right]$$

die klassische Lagrangefunktion identifizieren:

$$\mathcal{L}\left(\boldsymbol{r}', \frac{\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'}{\delta t}\right) = \frac{m}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'}{\delta t}\right)^2 - V\left(\boldsymbol{r}'\right).$$

Bitte wenden!

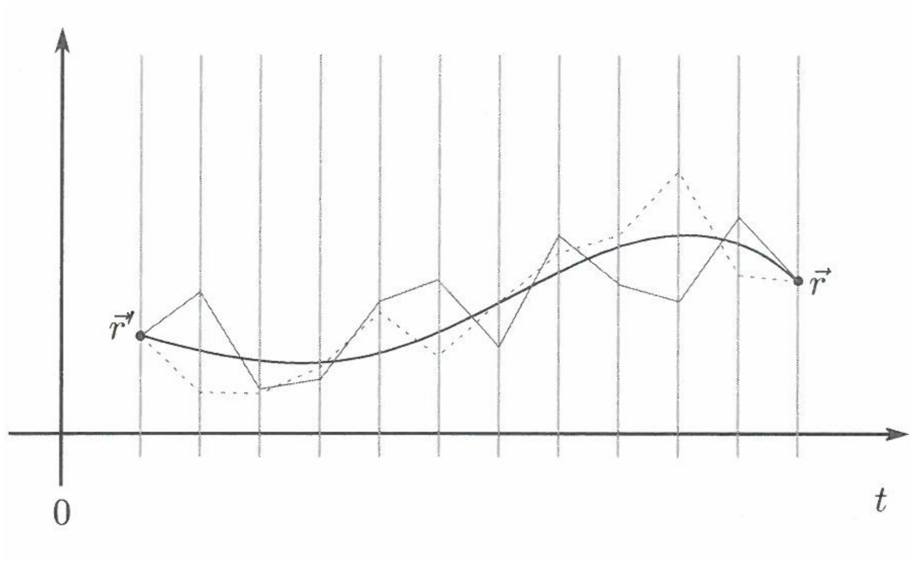

Abbildung 1: Trajektorien zwischen den Punkten $\boldsymbol{r}$ und $\boldsymbol{r}'$, wobei die Bewegung in diskreten Zeitschritten $\delta t \to 0$ erfolgt.

Mit der Relation $U(t_1 + t_2) = U(t_1) \circ U(t_2)$, beziehungsweise

$$\begin{aligned} K\big(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, t_1 + t_2\big) &= \big\langle \boldsymbol{r} \left| U(t_1 + t_2) \right| \boldsymbol{r}' \big\rangle = \big\langle \boldsymbol{r} \left| U(t_1) \circ U(t_2) \right| \boldsymbol{r}' \big\rangle \\ &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'' \, \big\langle \boldsymbol{r} \left| U(t_1) \right| \boldsymbol{r}'' \big\rangle \big\langle \boldsymbol{r}'' \left| U(t_2) \right| \boldsymbol{r}' \big\rangle \\ &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'' \, K\big(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}'',\, t_1\big)\, K\big(\boldsymbol{r}'',\, \boldsymbol{r}',\, t_2\big)\,, \end{aligned}$$

kann abschließend der volle Zeitentwicklungsoperator konstruiert werden ($N\delta t = t$ =konst.):

$$\begin{aligned} K\big(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, t\big) &= \lim_{N\to\infty} \lim_{\delta t \to 0} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \ldots \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-1}\, K\left(\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_N,\, \boldsymbol{r}_{N-1},\, \delta t\right) \ldots K\left(\boldsymbol{r}_2,\, \boldsymbol{r}_1,\, \delta t\right) K\big(\boldsymbol{r}_1,\, \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{r}',\, \delta t\big) \\ &= \lim_{N\to\infty} \lim_{\delta t \to 0} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \ldots \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-1} \prod_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{\frac{d}{2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \delta t \mathcal{L}\left(\boldsymbol{r}_{j-1},\, \frac{\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_{j-1}}{\delta t}\right)\right] \\ &= \lim_{N\to\infty} \lim_{\delta t \to 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{\frac{Nd}{2}} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \ldots \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{N-1} \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \delta t \mathcal{L}\left(\boldsymbol{r}_{j-1},\, \frac{\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_{j-1}}{\delta t}\right)\right] \end{aligned}$$

Der Propagator kann noch in einer kompakten Form geschrieben werden, wobei der Term $D[\boldsymbol{q}]$ die Integration über alle klassischen und nicht-klassischen Wege bezeichnet, die bei $\boldsymbol{r}$ beginnen und bei $\boldsymbol{r}'$ enden (siehe Abbildung 1):

$$K\big(\boldsymbol{r},\, \boldsymbol{r}',\, t\big) = \int D[\boldsymbol{q}] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \, \mathcal{L}\big(\boldsymbol{q}(t')\,,\, \dot{\boldsymbol{q}}(t')\,,\, t'\big)\right] = \int D[\boldsymbol{q}] \exp\left[\frac{i}{\hbar} S\left[\boldsymbol{q}(t)\right]\right]$$

Quelle: S. Wimberger, *Nonlinear Dynamics and Quantum Chaos*, Springer, Heidelberg, 2014.

(a) Der Propagator eines Teilchens in einem (eindimensionalen) harmonischen Potential ist gegeben durch das Pfadintegral

$$K\left(x_0,\, x,\, T\right) = \int_{x_0}^{x} D\left[x\right] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$$

mit der Wirkung

$$S\left[x\left(t\right)\right] = \int_0^T \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2} m\dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right).$$

Zeigen Sie, dass der Propagator in folgender Form geschrieben werden kann:

$$K\left(x_0,\, x,\, T\right) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{kl}(x_0,\, x,\, T)} K\left(0,\, 0,\, T\right).$$

Hierbei bezeichne $S_{kl}\left(x_0,\, x,\, T\right)$ die Wirkung der klassischen Bahn zwischen den Punkten x_0 bei $t = 0$ und x bei $t = T$ (T ist eine beliebige Zeit, keine Periodendauer).

Hinweis: Schreiben Sie $x\left(t\right) = x_{kl}\left(t\right) + y\left(t\right)$ mit der klassischen Bahn $x_{kl}\left(t\right)$. Betrachen Sie zunächst den Ausdruck $S\left[x\left(t\right)\right]$ und zeigen Sie mit der Newtonschen Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators, dass die Wirkung in einen von x_{kl} und einen von y abhängigen Term zerfällt.

(b) Berechnen Sie die Wirkung entlang der klassischen Bahn. Ergebnis:

$$S_{kl}\left(x_0,\, x,\, T\right) = \frac{m\omega}{2\sin\left(\omega T\right)} \left[\left(x^2 + x_0^2\right)\cos\left(\omega T\right) - 2xx_0\right].$$

(c) Berechnen Sie das verbleibende Pfadintegral $K\left(0,\, 0,\, T\right)$.

Hinweis: Da alle Pfade $y\left(0\right) = y\left(T\right) = 0$ erfüllen, lassen sie sich als Fourier-Sinusreihe schreiben: $y\left(t\right) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$. Berechnen Sie damit zunächst die Wirkung $S\left[y\left(t\right)\right]$. Das Integral über y lässt sich nun in ein Integral über die Koeffizienten a_n umschreiben. Die Jacobideterminante ist dabei unabhängig von ω und soll als Konstante J verwendet werden. Teilt man die Zeit T in diskrete Schritte der Länge δt ein, gibt es nur eine endliche Zahl an Koeffizienten und es folgt als Zwischenergebnis

$$K\left(0,\, 0,\, T\right) = \lim_{N\to\infty} \lim_{\delta t\to 0} J \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}a_1}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}a_N}{A} e^{\sum_{n=1}^{N} \frac{im\delta t}{4\hbar}\left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right) a_n^2},\ A = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\delta t}{m}}.$$

Führen Sie die Integrale aus und verwenden Sie

$$\sin\left(\pi z\right) = \pi z \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{n^2}\right).$$

Die verbliebene Konstante J kann zum Schluss durch Vergleich mit der Lösung für ein freies Teilchen

$$K_{\text{frei}}\left(0,\, 0,\, T\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}$$

erhalten werden, indem man $\omega \to 0$ setzt.

Bitte wenden!

Aufgabe 12: Niveauabstoßung **5 Punkte**

Ein Spin-1/2-System möge durch den Hamiltonoperator

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & V \\ V^* & E_0 - \Delta \end{pmatrix},$$

beschrieben werden, wobei $V \in \mathbb{C}$; E_0, $\Delta \in \mathbb{R}$ gelte.

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte von H.

(b) Nehmen Sie an, dass die Variablen $V(\lambda)$, $E_0(\lambda)$ und $\Delta(\lambda)$ von einem reellen Parameter λ abhängen. Argumentieren Sie, dass es im Allgemeinen keinen Wert λ_0 gibt, für den das Spektrum entartet ist.

Hinweis: Wie viele reelle Gleichungen muss λ erfüllen, damit es zu einem entarteten Spektrum kommt? Wie ändert sich die Situation für $V \in \mathbb{R}$?

(c) Plotten Sie die Eigenwerte von H als Funktion von λ für den Fall mit $\Delta(\lambda) = \lambda\Delta_0$ und konstanten Werten von E_0 und V. Wie unterscheidet sich das Spektrum in den Fällen ohne ($|V| = 0$) und mit Kopplung ($|V| \neq 0$)?

Aufgabe 13: Thomas-Femi-Zustandsdichte **5 Punkte**

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Zustandsdichte

$$d(E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,G(E)$$

eines mechanischen Systems in einen glatten Anteil $\bar{d}(E)$ und einen oszillierenden Anteil zerfällt, wobei der glatte Thomas-Fermi-Anteil semiklassisch als Beitrag infinitesimal kurzer Bahnen gedeutet werden kann. Betrachten Sie ein Hamiltonsches System mit drei Freiheitsgraden, bei dem die Hamiltonfunktion die Form

$$H(\vec{p}, \vec{x}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

hat und zeigen Sie, dass für den Thomas-Fermi-Anteil der integrierten Zustandsdichte $\bar{N}(E) = \int_{-\infty}^{E} \bar{d}(E')\mathrm{d}E'$ gilt:

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3p\ \Theta(E - H(\vec{p}, \vec{x})),$$

wenn

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & : \ x > 0 \\ 0 & : \ x < 0 \end{cases}$$

die Heaviside-Funktion bezeichnet. Welche Darstellung ergibt sich daraus für die Zustandsdichte $\bar{d}(E)$?