Mathematische Bissen
- Gruppentheorie für PhysikerInnen -

Übungsblatt 4 (20 Punkte)

Ausgabe 27.05.16 – Abgabe 02.06.16 – Besprechung 03.06.16

▷ Aufgabe 1 (Parität)

Wir verabreden einen *Paritätsoperator*

$$(\mathcal{P}\psi)(x) := \psi(-x)\,. \tag{1}$$

Offensichtlich ist $\mathcal{P}$ *unitär*, $\langle \mathcal{P}\phi, \mathcal{P}\psi\rangle = \langle \phi, \psi\rangle$, und *idempotent*, $\mathcal{P}^2 = \hat{1}$. Wegen Unitarität sind seine Eigenwerte vom Betrag 1, da idempotent sogar $\lambda = \pm 1$. Eigenfuntkionen zum Eigenwerte $\lambda = +1$ sind alle *geraden* Funktionen $\psi(-x) = \psi(x)$. Eigenfunktionen zum Eigenwert $\lambda = -1$ sind alle *ungeraden* Funktionen $\psi(-x) = -\psi(x)$.

Parität ist nützlich, es gilt nämlich der wichtige

Satz (Paritätssatz): Für Hamiltonoperatoren mit spiegelsymmetrischem Potential $V(x) = V(-x)$ haben die Eigenfunktionen definierte Parität, $\varphi_n(-x) = (-1)^n\varphi(x)$, $n = 0, 1, \ldots$. Der Grundzustand $\varphi_0(x)$ ist immer von gerader Parität.

den wir Sie bitten zu beweisen.

▷ Aufgabe 2 (Bloch'sches Theorem)

Wir betrachten einen quantenmechanischen Massepunkt der sich in einem periodischen Potential $V(x+a) = V(x)$ bewegt. Der Hamiltonoperator lautet wie üblich $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$.

Sei $\mathcal{T}_a$ linearer Operator der eine Translation um die Strecke a bewirkt, $(\mathcal{T}_a\phi)(x) = \phi(x+a)$. Zeigen Sie:

(a) $\mathcal{T}_a$ ist unitär. Äquivalent: die Eigenwerte von $\mathcal{T}_a$ sind unimodular, $|\lambda| = 1$, lassen sich daher parametrisieren $\lambda_\kappa = e^{i\kappa a}$ mit reellwertigem κ sog *Kristallimpuls*.

(b) $\left[\mathcal{T}_a, \hat{H}\right] = 0$. Äquivalent: Mit ψ Lösung der stationären Schrödingergleichung $(\hat{H}\psi)(x) = E\psi(x)$ ist auch $\mathcal{T}_a\psi$ ein Lösung zum gleichen Eigenwert E.

Die $\hat{H}$ und $\mathcal{T}_a$ gemeinsamen Eigenfunktionen haben die Form $\phi_\kappa(x) = e^{i\kappa x}u_\kappa(x)$ mit $u_\kappa(x)$ periodisch, $u_\kappa(x+a) = u_\kappa(x)$. Wie lautet die stationäre Schrödingergleichung für die *Bloch-Funktionen* $u_\kappa(x)$?

Bemerkung: Die *Floquetkoeffizienten* $e^{i\kappa a}$ sind periodisch in κ. Man darf den Kristallimpuls daher auf ein beliebiges Intervall der Größe $2\pi/a$ beschränken. Beliebt ist $-\pi/a \leq \kappa < \pi/a$, genannt die *erste Brillouin-Zone*. Zu festem κ gibt es dann einen abzählbar unendlichen Satz diskreter Energien $E_\nu(\kappa)$. Zu festem Band-Index ν bilden die $E_\nu(\kappa)$, $-\pi/a \leq \kappa < \pi/a$, ein Energieband.

▷ **Aufgabe 3 (Baker-Hausdorff-Identität u.a.)**

Gegeben zwei lineare Operatoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ mit Kommutator $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$.

(a) Zeigen Sie für eine genügend gutartige Funktion $f(\cdot)$

$$e^{\hat{A}} f(\hat{B}) e^{-\hat{B}} = f\left(e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}}\right) \tag{2}$$

Hinweis:Benutze Taylorentwicklung von $f(x)$ um $x = 0$. Benutze $\hat{1} = e^{\hat{A}} e^{-\hat{A}}$ für $e^{\hat{A}} \hat{B}^n e^{-\hat{A}} = (e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}})^n$.

(b) Zeigen Sie nun

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \hat{C} + \frac{1}{2!}[\hat{A}, \hat{C}] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{C}]] + \frac{1}{4!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{C}]]] + \ldots \tag{3}$$

Hinweis: Betrachte die Operatorschar $\hat{F}(\theta) := e^{\theta\hat{A}} \hat{B} e^{-\theta\hat{A}}$. Taylerentwicklung um $\theta = 0$ generiert Potenzreihe in $\hat{A}$ deren Wert für $\theta = 1$ interessiert. Offensichtlich $\hat{F}(0) = \hat{B}$. Terme erster und höherer Ordnung folgen aus $d\hat{F}/d\theta = [\hat{A}, \hat{F}]$.

(c) Zeigen Sie schließlich für den Fall dass $\hat{C}$ mit $\hat{A}$, $\hat{B}$ kommutiert

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{C}/2} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{\hat{C}/2} \tag{4}$$

Hinweise: Betrachte Operatorschar $\hat{F}(\theta) = e^{\theta(\hat{A}+\hat{B})}$ und versuche $\hat{F}(\theta)$ in der Form $\hat{F}(\theta) = e^{p\hat{A}} e^{q\hat{B}} e^{r\hat{C}}$ mit θ-abhängigen Koeffizienten $p = p(\theta)$ etc. zu schreiben. Vergleiche (und löse) dazu die Differentialgleichungen $d\hat{F}/d\theta$ der beiden Schreibweisen.