

Übung 1. Dirac notation

Lernziel: Practise using the Dirac notation.

1.1. Identity operator Write down the identity operator for a given set of basis states $|n\rangle$. Also write it down for the position and momentum basis states $|x\rangle$ and $|p\rangle$.

Lösung

$$I = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

$$I = \int_x dx |x\rangle\langle x|$$

1.2. Observables Given an observable A with spectrum A_n and basis states $|n\rangle$ write down the operator \hat{A} in Dirac notation.

Lösung

$$A = \sum_n A_n |n\rangle\langle n|$$

1.3. Expanding in a basis Expand $|x\rangle$ in position and momentum basis states, do the same for $|p\rangle$.

Lösung

$$|x\rangle = I|x\rangle = \int dx' |x'\rangle\langle x'|x\rangle \quad (\text{L.1})$$

$$= \int dx' \delta(x' - x) |x'\rangle = |x\rangle \quad (\text{L.2})$$

$$|x\rangle = I|x\rangle = \int dp |p\rangle\langle p|x\rangle = \quad (\text{L.3})$$

$$\int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} |p\rangle = \quad (\text{L.4})$$

$$|p\rangle = I|p\rangle = \int dx' |x'\rangle\langle x'|p\rangle = \quad (\text{L.5})$$

$$\int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx'/\hbar} |x'\rangle \quad (\text{L.6})$$

$$|p\rangle = I|p\rangle = \int dp' |p'\rangle \langle p'|p\rangle = \tag{L.7}$$

$$\int dp' \delta(p - p') |p'\rangle \tag{L.8}$$

1.4. Representation Write down a general state $|\psi\rangle$ in position representation and then expand it in the position basis $|x\rangle$.

Lösung

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle \tag{L.9}$$

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle \tag{L.10}$$

1.5. A simple example Given $\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-x^2/(4\sigma^2)}$ expand $|\psi\rangle$ in the momentum basis $|p\rangle$.

Lösung

$$\psi = \int dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle = \tag{L.11}$$

$$\int dp \int dx |p\rangle \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \tag{L.12}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \int dx e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-x^2/(4\sigma^2)} = \tag{L.13}$$

$$\left(\frac{2\sigma^2}{\hbar^2\pi}\right)^{1/4} \int dp e^{\frac{-\sigma^2 p^2}{\hbar^2}} |p\rangle \tag{L.14}$$

Übung 2. Zeitumkehr und Parität in der Streumatrix

Lernziel: Bei Streuexperimenten äussern sich gewisse Symmetrien durch eine besondere Struktur der S-Matrix. Es wird hier die Zeitumkehr und Paritätstransformation betrachtet.

Die Streumatrix verbindet die einfallenden mit den auslaufenden Amplituden via

$$\Psi_{\text{out}} = \begin{pmatrix} b \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ B \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a \\ B \end{pmatrix} = S \Psi_{\text{in}}. \tag{1}$$

(a) Zeige, dass die Beziehung $t = t'$ gilt, falls das Streuexperiment zeitumkehrinvariant ist.

Hinweis: Zeige zuerst, dass für zeitumkehrinvariante Systeme mit $\psi(x, t)$ sogleich auch $\psi^(x, t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung ist.*

(b) Zeige, dass für ein symmetrisches Streupotential (Parität) die Beziehung $r = r'$ gilt.

(c) Diagonalisiere schlussendlich die Streumatrix S eines zeitumkehr- und paritätsinvarianten Systems.

Lösung

- (a) Sei $\psi(x, t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung. Ist das System zeitumkehrinvariant, so ist per Definition auch $\psi(x, -t)$ eine Lösung, d.h.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, -t) = H\psi(x, -t), \quad (\text{L.15})$$

wobei H der (Hermitesche) Hamiltonoperator des Systems ist. Dann gilt nach Umbenennung $-t \rightarrow t$,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t). \quad (\text{L.16})$$

Unter komplexer Konjugation finden wir, dass $\psi^*(x, t)$ auch eine Lösung der ursprüngliche Schrödingergleichung ist, also

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) = H\psi^*(x, t). \quad (\text{L.17})$$

Für die rechte Seite haben wir $(H\psi(x, t))^* = H\psi^*(x, t)$ benutzt. Dies folgt aus der Hermitizität des Hamilton-Operators.¹

Die Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihre komplex konjugierte sind

$$\psi(x) = \begin{cases} a e^{ikx} + b e^{-ikx} & x < 0 \\ A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x > 0; \end{cases} \quad \psi^*(x) = \begin{cases} a^* e^{-ikx} + b^* e^{ikx} & x < 0 \\ A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} & x > 0, \end{cases} \quad (\text{L.18})$$

und somit erkennt man aus den jeweiligen einfallenden und auslaufenden Wellen, dass diese Transformation äquivalent dazu ist, dass man Ψ_{out} durch Ψ_{in}^* und Ψ_{in} durch Ψ_{out}^* ersetzt.

Unter diese Transformation erhalten wir die Beziehung $\Psi_{\text{in}}^* = S \Psi_{\text{out}}^*$. Weil weiter gilt $\Psi_{\text{out}} = S \Psi_{\text{in}}$ und die S-Matrix unitär ist, finden wir $\Psi_{\text{in}} = S^{-1} \Psi_{\text{out}} = S^\dagger \Psi_{\text{out}}$, und schlussendlich

$$(S^\dagger)^* = S. \quad (\text{L.19})$$

Deshalb gilt $S = S^T$, d.h. S ist symmetrisch; dann ist $t = t'$.

- (b) Unter der Paritätstransformation (i.e. $x \rightarrow -x$) transformiert eine einfallende Welle von links zu einer einfallenden Welle von rechts (ebenso für auslaufende Wellen). Das heisst $a \leftrightarrow B$ und $A \leftrightarrow b$ und es transformieren sich

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{in}} &\rightarrow \sigma_X \Psi_{\text{in}} \\ \Psi_{\text{out}} &\rightarrow \sigma_X \Psi_{\text{out}} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{L.20})$$

Ist das System paritätsinvariant, muss die Transformation (L.20) die Streumatrix unverändert lassen, d.h. $\sigma_X \Psi_{\text{out}} = S \sigma_X \Psi_{\text{in}}$. Mit $\sigma_X^{-1} = \sigma_X$ und der ursprüngliche Gleichung $\Psi_{\text{out}} = S \Psi_{\text{in}}$ erhalten wir alsdann,

$$S = \sigma_X S \sigma_X, \quad (\text{L.21})$$

und somit $r = r'$.

¹We can think of a time reversal operator as a complex conjugation. Then time reversal symmetry corresponds to $TH|\psi\rangle = HT|\psi\rangle$, hence $(H\psi(x, t))^* = H\psi^*(x, t)$.

- (c) Die Streumatrix eines paritätsinvarianten und zeitumkehrinvarianten Systems ist gemäss Teilübungen (a) und (b),

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix} = r\mathbb{1} + \begin{pmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{pmatrix} =: r\mathbb{1} + K. \quad (\text{L.22})$$

Offensichtlich haben S und K dieselben Eigenvektoren. Diagonalisiert man K mit der Bedingung $\det(K - \lambda\mathbb{1}) = 0$, dann bekommt man

$$\lambda^2 - t^2 = 0, \quad (\text{L.23})$$

und also $\lambda = \pm t$.

Ein Eigenvektor in der Form $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ muss

$$\begin{pmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (\text{L.24})$$

erfüllen und somit $t/\lambda = \alpha/\beta$. Normierte Eigenvektoren von S sind dann gegeben durch

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{zu } \lambda = r + t; \quad (\text{L.25})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{zu } \lambda = r - t. \quad (\text{L.26})$$

(Beobachte, dass die Eigenwerte von S und von K sich um eine Verschiebung r unterscheiden.)

Übung 3. Heisenbergsche Unschärferelation für allgemeine Observablen.

Lernziel: Die bekannte Heisenbergsche Unschärferelation betrifft die spezifischen Observablen x und p . Wir beweisen eine allgemeinere Form der Unschärferelation, die für ein beliebiges Paar von Observablen gilt.

Seien A und B zwei Observablen. Die Standardabweichung der Observable A (bzw. B) bezüglich einem Zustand $|\psi\rangle$ ist gegeben durch $\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$. Zeige die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle|. \quad (2)$$

Hinweise: Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung für zwei Zustände $|\phi\rangle$ und $|\chi\rangle$ lautet

$$|\langle \phi | \chi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \langle \chi | \chi \rangle. \quad (3)$$

Zeige die Relation (2) zuerst für Observablen A und B deren Erwartungswerte verschwinden, d.h. $\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0$. Leite nun die allgemeine Beziehung aus diesem Spezialfall her.

Lösung Es gibt verschiedene Methoden, diese Ungleichung zu zeigen. Hier geben wir zwei alternativen Methoden.

1. Methode: Sei der Zustand $|\phi\rangle = (A + i\lambda B)|\psi\rangle$ für ein $\lambda \in \mathbb{R}$. Die Norm eines Zustands ist immer positiv:

$$0 \leq \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | (A^\dagger - i\lambda B^\dagger)(A + i\lambda B) | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle + \lambda \langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | B^2 | \psi \rangle. \quad (\text{L.27})$$

Beobachte, dass die Koeffizienten in diesem Polynom in λ reell sind (insbesondere, $i[A, B]$ ist hermitesch, da ein Kommutator zweier hermiteschen Operatoren antihermitesch ist). Dieses Polynom zweiter Ordnung muss immer positiv sein, und soll somit keine (oder höchstens eine) Lösung haben. Die Diskriminante muss dann negativ sein:

$$0 \geq \langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle^2 - 4 \langle \psi | A^2 | \psi \rangle \langle \psi | B^2 | \psi \rangle; \quad (\text{L.28})$$

dies führt jetzt auf

$$\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2. \quad (\text{L.29})$$

Beobachte, dass wir das Resultat jetzt schon bewiesen haben, wenn die Erwartungswerte von A und B verschwinden: es gilt dann $\langle A^2 \rangle = \Delta A^2$ und $\langle B^2 \rangle = \Delta B^2$.

Für allgemeine Observablen verschieben wir $A \rightarrow A - \langle A \rangle \mathbb{1}$ und $B \rightarrow B - \langle B \rangle \mathbb{1}$. Dann transformieren sich $\langle A^2 \rangle \rightarrow \langle (A - \langle A \rangle \mathbb{1})^2 \rangle = \Delta A^2$, $\langle B^2 \rangle \rightarrow \Delta B^2$ und $[A, B] \rightarrow [A - \langle A \rangle \mathbb{1}, B - \langle B \rangle \mathbb{1}] = [A, B]$. Wir haben jetzt das erwünschte Resultat:

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{2} \langle i[A, B] \rangle^2. \quad (\text{L.30})$$

2. Methode (mit Cauchy-Schwarz): Es gilt

$$\frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle| = \frac{1}{2} |i \langle \psi | (AB - BA) | \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | BA | \psi \rangle| \leq |\langle \psi | AB | \psi \rangle| \quad (\text{L.31})$$

wegen die Dreiecksungleichung und $\langle \psi | BA | \psi \rangle = (\langle \psi | AB | \psi \rangle)^*$. Verwenden wir Cauchy-Schwarz mit $|\phi\rangle = A|\psi\rangle$ und $|\chi\rangle = B|\psi\rangle$, dann ergibt sich (A und B sind Hermitisch)

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \psi | AA | \psi \rangle} \sqrt{\langle \psi | BB | \psi \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle} \sqrt{\langle B^2 \rangle}. \quad (\text{L.32})$$

Das Resultat für Observablen mit verschwindenden Erwartungswerten folgt somit. Sonst, gibt die gleiche Verschiebung wie vorher dann das erwünschte Resultat für allgemeine Observablen.

Bemerkung: der Faktor i in der Unschärferelation ist zwar kosmetisch, aber da $i[A, B]$ ein hermitescher Operator ist, stellt es visuell sicher, dass $\langle i[A, B] \rangle$ reell ist.

Übung 4. Strom und Impuls

Lernziel: In dieser Übung lernen wir mehr über die Stromdichte und ihre Abhängigkeit von der Wellenfunktion.

Sei $\hbar = 2m = 1$. Ein Teilchen auf der Geraden hat

$$j(x) = 2\Im \overline{\psi(x)} \psi'(x)$$

als Erwartungswert des Stroms bei x . Es handelt sich um eine lokale Eigenschaft von $\psi(x)$, im Unterschied zu jenem des Impulses $p = k$. Falls $\psi(x) = |\psi(x)| e^{i\phi(x)}$, zeige dass $j(x)$ proportional zu $\partial_x \phi(x)$ ist.

Lösung

$$\begin{aligned} \overline{\psi(x)} &= |\psi(x)| e^{-i\phi(x)} \\ \psi'(x) &= (\partial_x |\psi(x)| + i \partial_x \phi(x) |\psi(x)|) e^{i\phi(x)} \end{aligned}$$

$$j(x) = 2\text{Im}(\overline{\psi(x)}\psi'(x)) = \tag{L.33}$$

$$2\text{Im}(|\psi(x)|\partial_x|\psi(x)| + i\partial_x\phi(x)|\psi(x)|^2) = \tag{L.34}$$

$$2\partial_x\phi(x)|\psi(x)|^2 \tag{L.35}$$

We can see here that we have a probability density $|\psi(x)|^2$ multiplied by the gradient of the phase. A current is a density times a velocity field, which means that velocity is created by a gradient in the phase.

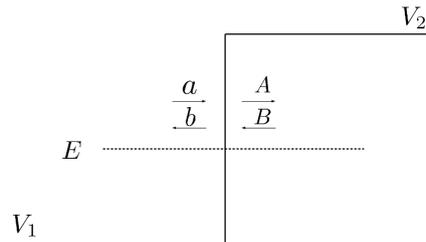
Übung 5. Transfermatrix Formalismus.

Lernziel: In dieser Aufgabe wird gezeigt, wie die behandelte eindimensionale Potentialstufe aus Kapitel 3.3 im Skript zu einem nützlichen Formalismus zur Betrachtung allgemeiner, stückweise stetiger Potentiale erweitert werden kann. Wir werden sehen, dass sich die Propagation eines Teilchens durch ein solches Potential mit einfacher Matrizenmultiplikation der komplexen Amplituden beschreiben lässt.

Zuerst betrachten wir nochmals ein Teilchen der Energie E an einer Potentialstufe,

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{falls } x < 0 \\ V_2 & \text{falls } x \geq 0, \end{cases} \tag{4}$$

mit $V_1 < V_2$ (siehe Skizze).



Skizze zur Potentialstufe für den Fall $V_1 > E > V_2$.

Wir setzen die Wellenfunktion links und rechts der Potentialstufe folgendermassen an:

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{\lambda_1 x} + be^{-\lambda_1 x} & \text{falls } x < 0 \\ Ae^{\lambda_2 x} + Be^{-\lambda_2 x} & \text{falls } x \geq 0, \end{cases} \tag{5}$$

wobei wir gesehen haben, dass λ_i reelle oder komplexe Werte annimmt, je nachdem ob $E < V_i$ oder $E > V_i$ gilt.

(a) Die Amplituden a, b hängen linear von den Amplituden A, B ab,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \tag{6}$$

wobei $M \in \text{M}(2 \times 2, \mathbb{C})$. Benutze die üblichen Stetigkeitsbedingungen an der Sprungstelle um die Koeffizienten von M für die Fälle $E < V_1$, $V_1 < E < V_2$ und $V_2 < E$ zu bestimmen. Was passiert wenn $V_1 < E < V_2 \rightarrow \infty$?

(b) Sei nun $V_1 > V_2$. Gib wiederum die Koeffizienten von M für die genannten 3 Fälle an.

(c) Nun fehlen noch die Matrizen, welche die Propagation im konstanten Potential zwischen den Sprungstellen beschreiben. Wir betrachten ein über eine Strecke w konstantes Potential V (siehe Skizze). Wie lauten die Amplituden a, b in Abhängigkeit von A, B ? Unterscheide die Fälle $E > V$ und $E < V$.

$V_2 < E < V_1$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_2}{i\alpha_1} & 1 - \frac{k_2}{i\alpha_1} \\ 1 - \frac{k_2}{i\alpha_1} & 1 + \frac{k_2}{i\alpha_1} \end{pmatrix} \quad (\text{L.41})$$

$V_2 < V_1 < E$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{pmatrix} \quad (\text{L.42})$$

(c) Eine Verschiebung der Wellenfunktion um w in negative x-Richtung ergibt für $E < V$

$$M = \begin{pmatrix} e^{\alpha w} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha w} \end{pmatrix} \quad (\text{L.43})$$

und für $E > V$

$$M = \begin{pmatrix} e^{-ikw} & 0 \\ 0 & e^{ikw} \end{pmatrix}. \quad (\text{L.44})$$

(d) Die totale Transfermatrix kann als Produkt der Matrizen für eine Potentialstufe, gefolgt von einer für freie Propagation und noch einer für eine Potentialstufe geschrieben werden.

$$M = M_- M_w M_+$$

Wir definieren $\alpha = \sqrt{2m(V - E)}/\hbar$, $k = \sqrt{2m(E)}/\hbar$ und $\beta = k/\alpha$ und können dann die drei Matrizen wie folgt schreiben.

$$M_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i\beta & 1 + i\beta \\ 1 + i\beta & 1 - i\beta \end{pmatrix} \quad (\text{L.45})$$

$$M_w = \begin{pmatrix} e^{-ikw} & 0 \\ 0 & e^{ikw} \end{pmatrix}. \quad (\text{L.46})$$

$$M_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + i\beta^{-1} & 1 - i\beta^{-1} \\ 1 - i\beta^{-1} & 1 + i\beta^{-1} \end{pmatrix} \quad (\text{L.47})$$

Indem wir das Produkt der drei Matrizen berechnen, erhalten wir die Transfermatrix für das Gesamtsystem:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \cos(kw) + (\beta^{-1} - \beta) \sin(kw) & (\beta^{-1} + \beta) \sin(kw) \\ -(\beta^{-1} + \beta) \sin(kw) & 2 \cos(kw) + (\beta - \beta^{-1}) \sin(kw) \end{pmatrix} \quad (\text{L.48})$$

- (e) Wir berechnen jetzt das Spektrum des Potentials aus Aufgabe (d). Da das Potential mit dem Paritätsoperator kommutiert, reicht es wenn wir die geraden und ungeraden Lösungen finden.² Die Lösung muss normalisierbar sein und deshalb ist die Wellenfunktion links vom Potential $Ae^{\alpha x}$ und rechts $\pm Ae^{-\alpha x}$ für gerade beziehungsweise ungerade Lösungen. Innerhalb der Potentialbarriere ist die Lösung $B \cos(kx)$ (gerade) und $B \sin(kx)$ (ungerade).

Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung ergeben die folgenden Randbedingungen für die geraden Lösungen:

$$Ae^{-\alpha w/2} = B \cos(kw/2) \quad (\text{L.49})$$

$$-\alpha Ae^{-\alpha w/2} = -kB \sin(kw/2) \quad (\text{L.50})$$

Division ergibt:

$$\alpha = k \tan(kL/2)$$

Analog erhalten wir für die ungeraden Lösungen:

$$\alpha = -k \cot(kL/2)$$

Diese Gleichungen können graphisch gelöst werden und wir haben immer mindestens eine Lösung.

Ein Vergleich mit der Transfermatrix aus Aufgabe (d) zeigt, dass wir diese Gleichungen auch erhalten hätten, indem wir $M_{11} = 0$ und $M_{21} = \pm 1$ gesetzt hätten. So eine Transfermatrix koppelt die exponentiell abfallenden Teile der Wellenfunktion auf beiden Seiten.

²Da das Potential mit dem Paritätsoperator kommutiert, vertauscht auch der ganze Hamiltonian. Deshalb sind gerade und ungerade Wellenfunktionen sicher Lösungen der Schrödingergleichung. Weiter kann jede Funktion als Linearkombination einer geraden und einer ungeraden Lösung geschrieben werden.