

Übung 1. Zeitumkehr und Parität in der Streumatrix

- (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.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, -t) = H\psi(x, -t), \quad (\text{L.1})$$

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

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t). \quad (\text{L.2})$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) = H\psi^*(x, t). \quad (\text{L.3})$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} a e^{ikx} + b e^{-ikx} & x < 0 \\ A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x > 0; \end{cases} \quad \psi^*(x) = \begin{cases} a^* e^{-ikx} + b^* e^{ikx} & x < 0 \\ A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} & x > 0, \end{cases} \quad (\text{L.4})$$

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

$$(S^\dagger)^* = S. \quad (\text{L.5})$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{in}} &\rightarrow \sigma_X \Psi_{\text{in}} \\ \Psi_{\text{out}} &\rightarrow \sigma_X \Psi_{\text{out}} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{L.6})$$

Ist das System paritätsinvariant, muss die Transformation (L.6) 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,

$$S = \sigma_X S \sigma_X, \quad (\text{L.7})$$

und somit $r = r'$.

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

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix} = r\mathbb{1} + \begin{pmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{pmatrix} =: r\mathbb{1} + K . \quad (\text{L.8})$$

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

$$\lambda^2 - t^2 = 0 , \quad (\text{L.9})$$

und also $\lambda = \pm t$.

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

$$\begin{pmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} , \quad (\text{L.10})$$

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

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{zu } \lambda = r + t ; \quad (\text{L.11})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{zu } \lambda = r - t . \quad (\text{L.12})$$

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

Übung 2. Heisenbergsche Unschärferelation für allgemeine Observablen.

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 einer Zustand ist immer positiv:

$$0 \leq \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | (A^\dagger - i\lambda B^\dagger)(A + i\lambda B) | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle + \lambda \langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | B^2 | \psi \rangle . \quad (\text{L.13})$$

Beobachte, dass die Koeffizienten in dieser Polynom in λ reell sind (insbesondere, $i[A, B]$ ist Hermitisch, da ein Kommutator zweier Hermiteschen Operatoren antihermitisch ist). Dieser Polynom zweiter Ordnung muss immer positiv, und somit soll keine (oder höchstens eine) Lösung haben. Das Diskriminant muss dann negativ:

$$0 \geq \langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle^2 - 4 \cdot \langle \psi | A^2 | \psi \rangle \cdot \langle \psi | B^2 | \psi \rangle ; \quad (\text{L.14})$$

dies führt jetzt auf

$$\langle A^2 \rangle \cdot \langle B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2 . \quad (\text{L.15})$$

Beobachte, dass wir das Resultat jetzt schon bewiesen haben, wenn die Erwartungswerten 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:

$$\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \geq \frac{1}{2} \langle i[A, B] \rangle^2. \quad (\text{L.16})$$

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

$$\frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle| = \frac{1}{2} |i \langle \psi | (AB - BA) | \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | BA | \psi \rangle| \leq |\langle \psi | AB | \psi \rangle| \quad (\text{L.17})$$

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)

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \psi | AA | \psi \rangle} \cdot \sqrt{\langle \psi | BB | \psi \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle} \sqrt{\langle B^2 \rangle}. \quad (\text{L.18})$$

Das Resultat für Observablen mit verschwindenden Erwartungswerten folgt somit. Sonst, die gleiche Verschiebung wie vorher gibt 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 3. Particle in a double well

(a) We calculate the transfer matrix as follows (see Section 3.1 of the script):

$$M = M_1 \tilde{M} M_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\alpha}{k} & 1 - \frac{i\alpha}{k} \\ 1 - \frac{i\alpha}{k} & 1 + \frac{i\alpha}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\alpha w} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k}{i\alpha} & 1 - \frac{k}{i\alpha} \\ 1 - \frac{k}{i\alpha} & 1 + \frac{k}{i\alpha} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \cosh(\alpha w) + i \sinh(y) \sinh(\alpha w) & i \cosh(y) \sinh(\alpha w) \\ -i \cosh(y) \sinh(\alpha w) & \cosh(\alpha w) - i \sinh(y) \sinh(\alpha w) \end{pmatrix} \quad (\text{L.19})$$

$$:= \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{L.20})$$

where we introduced

$$\sinh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha} \right) \quad \text{and} \quad \cosh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha} \right). \quad (\text{L.21})$$

From Schrödinger's equation we get $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ and $\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$.

Since the wavefunction should vanish at $x = \pm W/2$, we have the following constraints on the coefficients

$$\psi_r(W/2) = Ae^{ik(W/2-w/2)} + Be^{-ik(W/2-w/2)} = 0 \quad \Rightarrow \quad B = -Ae^{ik(W-w)}, \quad (\text{L.22})$$

$$\psi_l(-W/2) = ae^{ik(-W/2+w/2)} + be^{-ik(-W/2+w/2)} \\ = (M_{11}A + M_{12}B)e^{-ik(W-w)/2} + (M_{21}A + M_{22}B)e^{ik(W-w)/2} = 0. \quad (\text{L.23})$$

Now from Eq. (L.22) and (L.23) we can obtain the constraint that the entries of the transfer matrix should satisfy in order to meet the boundary conditions. It reads

$$M_{11}e^{-ik(W-w)} - M_{12} + M_{21} - M_{22}e^{ik(W-w)} = 0. \quad (\text{L.24})$$

Plugging the entries of the transfer matrix from (L.19) into the last equation gives the following transcendental equation for the energy level with $E < V$:

$$\boxed{\sin[k(W-w)] = \tanh(\alpha w) \{ \sinh(y) \cos[k(W-w)] - \cosh(y) \}.} \quad (\text{L.25})$$

- (b) In the limit of $V \rightarrow \infty$ we have $\alpha \rightarrow \infty$, $\tanh(\alpha w) \rightarrow 1$ and $\tanh(y) \rightarrow 1$. Hence Eq. (L.25) simplifies and takes the following form

$$\cos[k(W - w)] = 1. \quad (\text{L.26})$$

The solution of the last equation is

$$k_n = \frac{2\pi n}{(W - w)} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m((W - w)/2)^2} n^2, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{L.27})$$

Note that these are exactly the energy levels for an infinite well with the width of $(W - w)/2$.

The above result is very natural; in this limit we have two disconnected infinite wells each having the width of $(W - w)/2$. The barrier between the wells is infinite and we can choose a basis in which the particle is localized either inside the left or inside the right well. Hence all the energy levels are doubly degenerate corresponding to two different wavefunctions.

If $V < \infty$ let us first assume that $V \gg \hbar^2/2mw^2$ such that $\alpha w \gg 1$. Solutions corresponding to the levels with $E \ll V$ do not change by too much from (L.27). Hence let us focus on the level $n = 1$ and write the solutions of (L.25) around k_1 as $\tilde{k} = k_1 + \delta k$, where δk is a small quantity: $\delta k \ll k_1$. We have $\alpha \approx \alpha_0 = \sqrt{2mV/\hbar} \gg 1/w$ and $\tanh(w\alpha) \approx \tanh(w\alpha_0) \approx 1$.

Keeping terms up to the second order in δk in (L.25), we obtain the following equation for δk :

$$\pi^2 (\alpha_0^2 - k_1^2) (\delta k)^2 + k_1^2 (k_1 + 2\pi\alpha_0) \delta k + k_1^4 = 0 \quad (\text{L.28})$$

From the last equation we obtain two solutions:

$$\delta k = -\frac{k_1^2(k_1 + 2\pi\alpha_0)}{2\pi^2(\alpha_0^2 - k_1^2)} \pm \frac{k_1^2 \sqrt{k_1(k_1 + 4\pi\alpha_0 + 4\pi^2 k_1)}}{2\pi^2(\alpha_0^2 - k_1^2)} \approx -\frac{k_1^2}{\alpha_0 \pi} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{k_1}{\alpha_0}} \right).$$

Note that $\delta k < 0$.

Hence the energy levels are:

$$\tilde{E}_1 = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} \approx E_1 + \frac{\hbar^2 k_1 \delta k}{m} \approx E_1 - \frac{2}{\pi} E_1 \sqrt{\frac{E_1}{V}} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{E_1}{V}} \right) \quad (\text{L.29})$$

and the splitting between these two levels is:

$$\Delta E_1 \approx \frac{4}{\pi^{3/2}} E_1 \frac{E_1}{V}, \quad \Rightarrow \quad \Delta E_1/E_1 \sim E_1/V. \quad (\text{L.30})$$

The last result is valid for other levels ($n \neq 1$) as well, given that $E_n \ll V$. The splitting is due to the fact that two degenerate states can mix and form two nondegenerate states, which was not possible in the case of infinite barrier between the states.

- (c) The transfer matrix for the case of $E > V$ takes the following form:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k'}{k} & 1 - \frac{k'}{k} \\ 1 - \frac{k'}{k} & 1 + \frac{k'}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik'w} & 0 \\ 0 & e^{ik'w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k}{k'} & 1 - \frac{k}{k'} \\ 1 - \frac{k}{k'} & 1 + \frac{k}{k'} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(k'w) - i \cosh(y) \sin(k'w) & i \sinh(y) \sin(k'w) \\ -i \sinh(y) \sin(k'w) & \cos(k'w) + i \cosh(y) \sin(k'w) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{L.31})$$

where we denoted the following:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}, \quad (\text{L.32})$$

$$\sinh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right), \quad \cosh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right). \quad (\text{L.33})$$

Since the constraint (L.24) should be fulfilled in this case as well, we obtain the equation for the energy levels with $E > V$:

$$\boxed{\cosh(y) \sin(k'w) \cos[k(W-w)] + \sinh(y) \sin(k'w) + \cos(k'w) \sin[k(W-w)] = 0} \quad (\text{L.34})$$

- (d) Consider the limit of $V = 0$. In this limit $k = k'$, $\sinh(y) = 0$ and $\cosh(y) = 1$. Hence for $V = 0$ (L.34) takes the following simple form:

$$\sin(kw) \cos[k(W-w)] + \cos(kw) \sin[k(W-w)] = \sin(kW) = 0 \quad (\text{L.35})$$

Not surprisingly in this simple limit we obtain the energy levels for an infinite well with the width of W :

$$k_n = \frac{\pi n}{W} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mW^2} n^2. \quad (\text{L.36})$$

Denote $\chi = V/E$. In the case of $0 < \chi \ll 1$, we have that

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = k\sqrt{1-\chi} = k - \frac{k}{2}\chi + \mathcal{O}(\chi^2), \quad (\text{L.37})$$

$$\sinh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-\chi}} - \sqrt{1-\chi} \right) = \frac{1}{2}\chi + \mathcal{O}(\chi^2), \quad (\text{L.38})$$

$$\cosh(y) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-\chi}} + \sqrt{1-\chi} \right) = 1 + \mathcal{O}(\chi^2). \quad (\text{L.39})$$

Then we can simplify (L.34), while keeping only terms up to linear order in χ

$$\sin(kW) - \frac{kw}{2}\chi \cos(kW) + \frac{1}{2}\chi \sin(kw) = 0. \quad (\text{L.40})$$

Assuming the solution of the last equation is not much different from the solution (L.36), we write the solution as $\tilde{k}_n = k_n + \delta k$, where δk is a small correction to k_n . Writing the expansion of (L.40) around k_n and keeping only linear terms in small parameters we can show that $\delta k \sim k_n \chi$. Hence the shift of energy levels is $\delta E_n \sim k_n \delta k \sim E_n \chi \sim V$.

- (e*) As suggested in the exercise sheet, we introduce dimensionless parameters $\beta = w/W$, $e = E/E_0$ and $v = V/E_0$, where $E_0 = \hbar^2 \pi^2 / 2mW^2$. We rewrite Eq. (L.25) and (L.34) in terms of these parameters.

For $e < v$:

$$\begin{aligned} \sin[\pi(1-\beta)\sqrt{e}] + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{v-e}{e}} + \sqrt{\frac{e}{v-e}} \right) \tanh(\pi\beta\sqrt{v-e}) \\ - \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{v-e}{e}} - \sqrt{\frac{e}{v-e}} \right) \tanh(\pi\beta\sqrt{v-e}) \cos(\pi(1-\beta)\sqrt{e}), \end{aligned} \quad (\text{L.41})$$

and for $e < v$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{e}{e-v}} + \sqrt{\frac{e-v}{e}} \right) \sin(\pi\beta\sqrt{e-v}) \cos[\pi(1-\beta)\sqrt{e}] \\ & + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{e}{e-v}} - \sqrt{\frac{e-v}{e}} \right) \sin(\pi\beta\sqrt{e-v}) + \cos(\pi\beta\sqrt{e-v}) \sin[\pi(1-\beta)\sqrt{e}] = 0 \end{aligned} \quad (\text{L.42})$$

Then one can use any programming language (e.g. Python, C++, Mathematica, etc.) to solve these equations numerically for different values of v (the parameter β is fixed). Fig. 1 shows how the degenerate energy levels for large v split into two levels when v decreases. Also in the limit of $v = 0$ we see that solutions are $E_n = E_0 n^2$. This plot shows all the features discussed above.

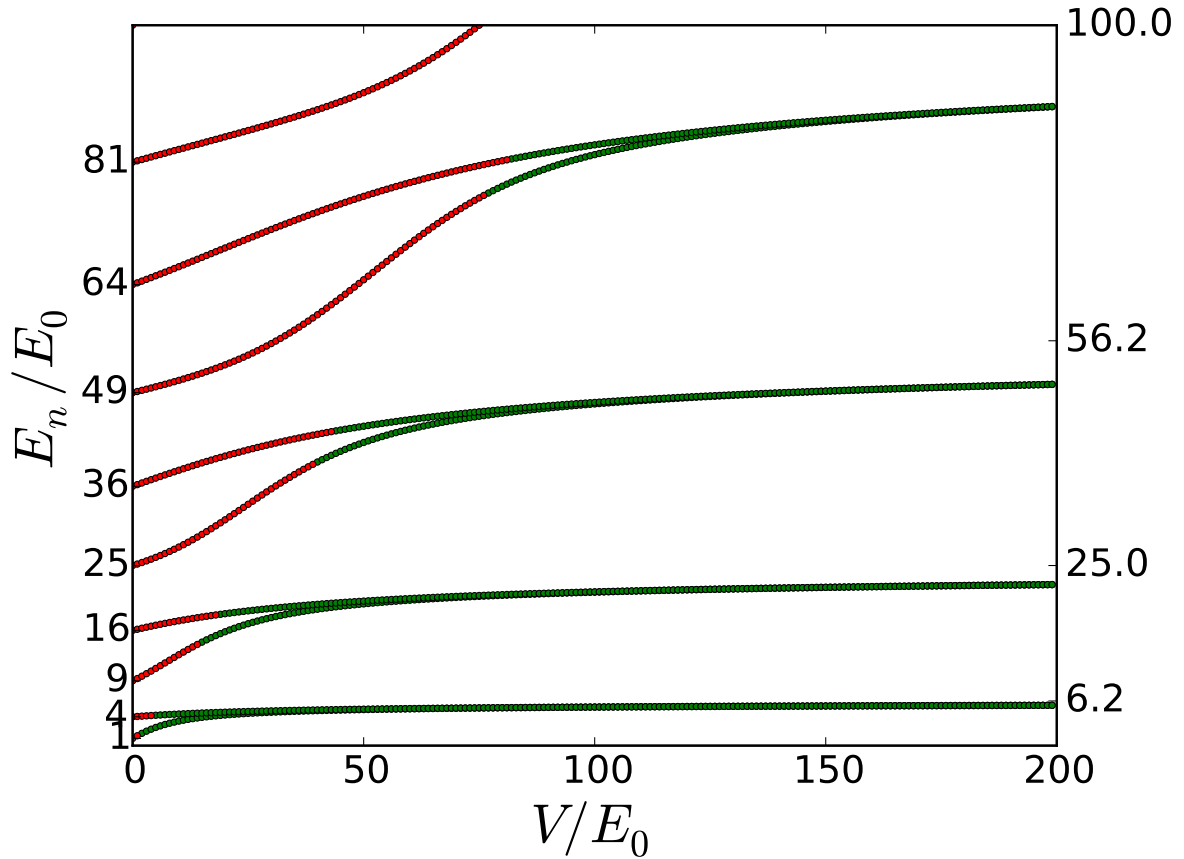


Abbildung 1: The energy levels for $\beta = 0.2$. The green dots are energy levels with $e < v$, and the red dots with $e > v$. The indicated values for e are the energy levels in the limit of $v \rightarrow \infty$ (on the right side) and $v = 0$ (on the left side).