Übung 1. Rechnen mit Kommutatoren

Lernziel: Die nicht-Kommutierbarkeit von Operatoren gehört zu den grundlegensten Eigenschaften der Quantenmechanik. Diese Übung erlaubt den rechnerischen Umgang mit Operatoren zu vertiefen.

Der Kommutator $[A, B] = AB - BA$ zweier Operatoren A und B ist linear und antisymmetrisch. Zeige, dass neben diesen einfachen Regeln auch folgende Eigenschaften gelten:

(a) *Es gilt die Produktregel*

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \tag{1}$$

und die Jacobi-Identität,

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \tag{2}$$

Für die nächste Teilaufgabe gelte $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$.

(b) *Ermittle induktiv $[A, B^n]$ und $[A^n, B]$, und zeige damit die* Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}. \tag{3}$$

Hinweis: Zeige, dass $f(t) = e^{tA}e^{tB}$ die Differentialgleichung $\frac{df}{dt} = (A + B + t[A, B])f$ erfüllt und löse diese.

Lösung

(a) Kommutatoren ausschreiben. Trivial

(b) Beweis per Induktion. Wir finden für die drei ersten Potenzen

$$[A, B] = [A, B], \qquad [A, B^2] = 2B[A, B], \qquad [A, B^3] = 3B^2[A, B] \tag{L.1}$$

und stellen die Behauptung $[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$ auf. Für $n = 1, 2, 3$ ist die Behauptung offensichtlich erfüllt. Der Schritt n ist gegeben durch

$$[A, B^n] = [A, B^{n-1}B] = B^{n-1}[A, B] + [A, B^{n-1}]B \tag{L.2}$$

$$= B^{n-1}[A, B] + (n-1)B^{n-1}[A, B] = nB^{n-1}[A, B]. \tag{L.3}$$

Für die zweite Beziehung finden wir analog $[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B]$. Wir definieren $f(t) = e^{tA}e^{tB}$ und leiten $f(t)$ nach t ab:

$$\frac{df}{dt} = Ae^{tA}e^{tB} + e^{tA}Be^{tB} = (A + e^{tA}Be^{-tA})f(t) \tag{L.4}$$

Wir sollten noch B aus der Zwickmühle $e^{tA}Be^{-tA}$ befreien. Unter Verwendung der bisher erarbeiteten Relationen finden wir

$$[e^{tA}, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!}[A^n, B] = [1, B] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!}[A^n, B] = \sum_{n=1}^{\infty} nA^{n-1}\frac{t^n}{n!}[A, B] \tag{L.5}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)A^n \frac{t^{n+1}}{(n+1)!}[A, B] = t\sum_{n=0}^{\infty} nA^n \frac{t^n}{n!}[A, B] = te^{tA}[A, B] = t[A, B]e^{tA}. \tag{L.6}$$

und Gleichung (L.4) lässt sich schreiben als

$$\frac{df}{dt} = (A + B + [A, B]t)f(t). \tag{L.7}$$

Es gilt $f(0) = 1$ und aufgrund der Voraussetzung $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ verschwindet auch $[A + B, [A, B]]$ und wir erhalten

$$f(t) = e^{t(A+B)} e^{\frac{1}{2}t^2 [A,B]}. \tag{L.8}$$

Für $t = 1$ erhält man also

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}, \tag{L.9}$$

was nach einer Multiplikation von rechts mit $e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ das gewünschte Resultat ergibt.

Übung 2. Quantenmechanische Operatoren zu physikalischen Observablen

Lernziel: Beim Übergang zu quantisierten Systemen stellt sich die Frage, welcher quantenmechanische Operator einer bestimmten klassischen Observablen entspricht. Ist die Observable nämlich aus nicht kommutierenden Grössen zusammengesetzt, ergeben sich unweigerlich Ordnungsprobleme. Wir lernen, was der zu einer physikalischen Observable gehörende Operator erfüllen muss.

Betrachte als Beispiel ein Elektron in einem Festkörper. Die Masse des Elektrons entspricht dann nicht seiner Ruhemasse im Vakuum, sondern einer effektiven Masse beeinflusst durch das Ionengitter. Im Fall einer Heterostruktur (z.B. ein Material mit mehreren Schichten GaAs/$Al_x Ga_{1-x}As$) wird die Masse $m(x)$ ortsabhängig.

(a) *Wie sieht der korrekte quantenmechanische Operator für die kinetische Energie aus? Weise die Richtigkeit deiner Behauptung nach, indem du überprüfst, dass der Operator die Voraussetzung einer physikalischen Observable erfülllt.*

Hinweis: Hermitizität

Lösung Aus den hermitschen Operatoren x und p (die nicht kommutieren) definiert $p[1/2m(x)]p$ ebenfalls ein hermitscher Operator. Alternative Kombinationen wie z.B. $p^2[1/2m(x)]$ oder $[1/2m(x)]p^2$ sind nicht hermitsch und erfüllen deshalb nicht die Voraussetzung um eine physikalische Observable zu beschreiben.

Bemerkung: Andere nicht-äquivalente Operatoren wie z.B.

$$\frac{1}{4}\Big[\frac{1}{m(x)}p^2 + p^2\frac{1}{m(x)}\Big] \tag{L.10}$$

ist auch hermitsch. Die Wahl ist nicht eindeutig[1] *weil die effektive Masse $m(x)$ einer phänomenologischen Approximation entspringt.*

(b) *Mit der effektiven Masse von der Form*

$$m(x) = \begin{cases} m_- & x < 0 \\ m_+ & x > 0, \end{cases} \tag{4}$$

bestimme alle Randbedingungen für die Wellenfunktion an der Fläche $x = 0$.

Hinweis: Die Wellenfunktion ist stetig.

[1] O. von Roos, PRB **27**, 7547 (1983).

Lösung Wir lösen die zeitunabhängige Schrödingergleichung $\mathcal{H}\psi = E\psi$, mit $\mathcal{H} = p[1/2m(x)]p$. Integrieren wir die Gleichung über die Grenzschicht hinweg (von $-\epsilon$ bis ϵ) finden wir

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \nabla \left[\frac{-\hbar^2}{2m(x)} \nabla\psi\right] = \frac{-\hbar^2}{2m(x)} \nabla\psi\Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} = \frac{-\hbar^2}{2m_+}(\nabla\psi)_+ - \frac{-\hbar^2}{2m_-}(\nabla\psi)_- = 2\epsilon E\psi(0), \quad \text{(L.11)}$$

wobei $(\nabla\psi)_\pm$ der Gradient von ψ bei $\pm\epsilon$ darstellt. Im Limes $\epsilon \to 0$ verschwindet die rechte Seite der Gleichung und wir finden (zusätzlich zu $\psi_+ = \psi_-$) die Randbedingung

$$\frac{(\nabla\psi)_+}{m_+} = \frac{(\nabla\psi)_-}{m_-}. \quad \text{(L.12)}$$

(c) *Vergleiche nun den Strom bei $x = \pm\epsilon$. Wird die Grenzfläche geladen?*

Lösung Daraus finden wir, dass der Strom

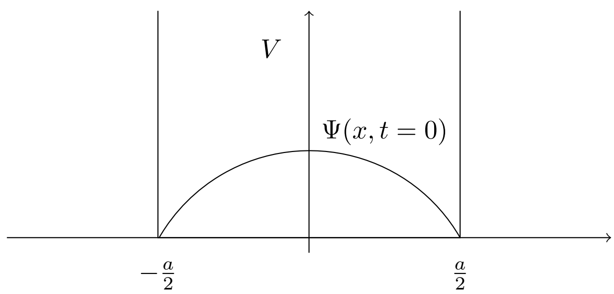
$$J_- = -\frac{i\hbar}{2m_-}[\psi_-^*(\nabla\psi)_- - \psi_-(\nabla\psi^*)_-] = -\frac{i\hbar}{2m_+}[\psi_+^*(\nabla\psi)_+ - \psi_+(\nabla\psi^*)_+] = J_+, \quad \text{(L.13)}$$

an der Oberfläche stetig ist und sich somit keine Ladungen an dieser Grenzfläche ansammeln.

Übung 3. Zeitentwicklung von Teilchen in Potential

Lernziel: Anhand von einem einfach Beispiel soll geübt werden, wie man die Zeitentwicklung eines Teilchens innerhalb der Quantenmechanik berechnet.

Wir betrachten ein Teilchen welches sich für $t < 0$ im unendlichen Potentialtopf



$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \infty & \textit{sonst} \end{cases}$$

befindet. Das Teilchen befinde sich im Grundzustand (siehe Kapitel 1.6. im Skript)

$$\Psi(x,t) = \cos(\frac{\pi x}{a}) \quad \textit{für } t < 0.$$

*Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde das Potential abgeschaltet. Berechne die Wellenfunktion des Teilchens für $t > 0$. Das Schlussresutat kann als Integral stehen gelassen werden, d.h., das Integral muss nicht berechnet werden. [**Challenge:** Wer kann das Integral analytisch lösen? Die oder der Erste der dies schafft soll sich bei Prof. Blatter im Büro melden und kann eine Belohnung abholen ;-)]*

Lösung Zum Zeitpunkt $t > 0$ handelt es sich um ein freies Teilchen. Wie im Skript in Kapitel 1.6. gezeigt wird, ist die allgemeine Lösung für ein freies Teilchen gegeben durch

$$\Psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi} a(k) e^{i(kx-\omega_k t)}$$

wobei $\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$ und

$$a(k) = \int dy \Psi(y,0) e^{-iky}.$$

In unserem Fall haben wir

$$\begin{aligned} a(k) &= \int dy \cos(\frac{\pi y}{a}) e^{-iky} \\ &= \frac{2a\pi \cos(\frac{ak}{2})}{\pi^2 - a^2k^2}. \end{aligned}$$

Die analytische Berechnung dieses Integrals ist direkt:

$$\begin{aligned} a(k) &= \int\limits_{-a/2}^{a/2} dy \cos(\frac{\pi y}{a}) e^{-iky} \\ &= \int\limits_{-a/2}^{a/2} dy \frac{1}{2}(e^{i\frac{\pi y}{a}} + e^{-i\frac{\pi y}{a}}) e^{-iky} \\ &= \frac{1}{2}\Big[\frac{1}{i(\frac{\pi}{a}-k)}\Big(e^{i(\frac{\pi}{a}-k)\frac{\pi}{a}} - e^{-i(\frac{\pi}{a}-k)\frac{\pi}{a}}\Big) - \frac{1}{i(\frac{\pi}{a}+k)}\Big(e^{-i(\frac{\pi}{a}+k)\frac{\pi}{a}} - e^{i(\frac{\pi}{a}+k)\frac{\pi}{a}}\Big)\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[\frac{1}{i(\frac{\pi}{a}-k)}\Big(ie^{i\frac{ka}{2}} - (-i)e^{i\frac{ka}{2}}\Big) - \frac{1}{i(\frac{\pi}{a}+k)}\Big(-ie^{-i\frac{ka}{2}} - ie^{i\frac{ka}{2}}\Big)\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[\frac{1}{\frac{\pi}{a}-k} 2\cos(\frac{ka}{2}) - \frac{1}{\frac{\pi}{a}+k}(-2\cos(\frac{ka}{2}))\Big] \\ &= \cos(\frac{ka}{2})\Big[\frac{1}{\frac{\pi}{a}-k} + \frac{1}{\frac{\pi}{a}+k}\Big] \\ &= \cos(\frac{ka}{2})\Big[\frac{\frac{\pi}{a}+k+\frac{\pi}{a}-k}{\frac{\pi^2}{a^2}-k^2}\Big] \\ &= \cos(\frac{ka}{2})\Big[\frac{2\pi a}{\pi^2 - a^2k^2}\Big] \end{aligned}$$

Damit finden wir

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \int \frac{dk}{2\pi} a(k) e^{i(kx-\omega_k t)} \\ &= \int \frac{dk}{\pi} \frac{a\cos(\frac{ak}{2})}{\pi^2 - a^2k^2} e^{i(kx-\omega_k t)} \\ &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\pi} \frac{a\cos(\frac{ak}{2})}{\pi^2 - a^2k^2} e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} \end{aligned} \tag{L.14}$$

Dieses Integral ist kompliziert zu lösen und wird deshalb so stehen gelassen.

Auf der Vorlesungs-Website haben wir ein Applet hochgeladen welches das Integral (L.14) numerisch löst. Für $t = 0$ vereinfacht sich das Integral. Es ist ein Integral das zwei Pole bei $\pm\pi/a$ hat. Wir können es mit Hilfe des Residuensatzes lösen indem wir drei Fälle unterscheiden:

1. $x > \frac{a}{2}$: In diesem Fall schliessen wir unseren Pfad worüber wir integrieren so dass der Pol π/a innerhalb unserer Region liegt welche wir im Gegenuhrzeigersinn umlaufen. Dann finden wir dass (L.14) $= 0$ ist.
2. $x < -\frac{a}{2}$: Dieser Fall funktioniert analog.
3. $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$: Hier umlaufen wir einmal den Pol bei π/a im Gegenuhrzeigersinn und den Pol bei $-\pi/a$ im Uhrzeigersinn. Mit Hilfe des Residuensatzes kriegen wir für (L.14) einen Term von der Form $\exp(i\pi/a)(x + a/2) + \exp(-i\pi/a)(x - a/2)$.

Dies ist alles jedoch nur für den Spezialfall $t = 0$ für ein allgemeines $t \geq 0$ ist wie in der Aufgabenstellung erwähnt das Integral (L.14) schwierig zu berechnen. Auf der Vorlesungswebsite haben wir ein Applet hochgeladen welches das Integral numerisch approximiert.

Übung 4. Hilbert und L^p Räume

Lernziel: Der mathematische Raum auf dem der Formalismus der Quantenmechanik aufgebaut ist ist ein Hilbertraum. Diese Übung soll ein paar Eigenschaften von L^p und insbesondere Hilberträumen repetieren. Wir werden lernen wie man aus einem Vektorraum einen Banachraum und aus einem Banachraum einen Hilbertraum bekommen kann. Ebenfalls werden wir sehen dass der Raum L^2 ein Hilbertraum ist (d.h. es existiert ein Skalarprodukt) wohingegen ein L^p Raum für $p \neq 2$ nur ein Banachraum ist (d.h. es existiert nur eine Norm).

Sei $p \in [1, \infty)$ eine reelle Zahl und X eine beschränkte Teilmenge von $\mathbb{R}^n$. Wir definieren die folgende Menge von komplexwertigen Fuktionen

$$L^p(X) = \left\{ f : X \to \mathbb{C} \quad \textit{so dass} \quad \int_X |f(x)|^p \mathrm{d}x < \infty \right\}. \tag{5}$$

(a) Zeige dass $L^1(X)$ ein Vektorraum ist.

Lösung Wir müssen zeigen dass falls f in $L^1(X)$ liegt, λf ebenfalls in $L^1(X)$ liegt, wobei $\lambda \in \mathbb{C}$. Ebenfalls muss gelten dass falls f und g in $L^1(X)$ liegen, dass $f + g$ in $L^1(X)$ liegt. Per Definition von $L^1(X)$ folgt

$$\begin{aligned} \int_X |\lambda f(x)|\mathrm{d}x &= |\lambda| \int_X |f(x)|\mathrm{d}x < \infty \quad \text{falls} \quad |\lambda| < \infty \\ \int_X |f(x) + g(x)|\mathrm{d}x &\leq \int_X \big(|f(x)| + |g(x)|\big)\mathrm{d}x < \infty \end{aligned} \tag{L.15}$$

so dass λf und $f + g$ in $L^1(X)$ liegen und $L^1(X)$ Vektorraum ist.[2]

(b) Benutze die Ungleichung

$$(s + t)^p \leq 2^{p-1}(s^p + t^p) \qquad \forall\, s, t \in [0, \infty) \tag{6}$$

um zu zeigen dass $L^p(X)$ ein Vektorraum ist für jedes $p > 1$.

[2] Die anderen Bedingungen die für einen Vektorraum gelten müssen sind trivial erfüll.

Lösung Die skalare Multiplikativität folgt analog zu a). Für die Linearkombination verwenden wir die in der Aufgabenstellung gegebene Ungleichung, welche impliziert dass

$$\int_X |f(x)+g(x)|^p \mathrm{d}x \leq \int_X \big(|f(x)|+|g(x)|\big)^p \mathrm{d}x \leq 2^{p-1}\Big(\int_X \big(|f(x)|^p+|g(x)|^p\big)\mathrm{d}x\Big) < \infty \ . \tag{L.16}$$

Für $f \in L^p(X)$ und $p \in [1,\infty)$ können wir die sogenannte p-Norm *definieren als*

$$\|f\|_p := \Big(\int_X |f(x)|^p \mathrm{d}x\Big)^{\frac{1}{p}}. \tag{7}$$

Es kann gezeigt werden (freiwillige Zusatzaufgabe) dass (7) eine Norm ist, d.h. sie efüllt die folgenden Eigenschaften

i) $\|kf\|_p = |k|\,\|f\|_p, \quad \forall\, k \in \mathbb{C},$ *(absolute Homogenität)*

ii) $\|f+g\|_p \leq \|f\|_p + \|g\|_p,$ *(Dreiecksungleichung)*

iii) $\|f\|_p = 0 \iff f = 0$ *(fast überall).* *(Definitheit)*

Zusätzlich kann gezeigt werden (ebenfalls freiwillig) dass $L^p(X)$ ausgestattet mit der p-Norm (7) vollständig ist, d.h., es is ein Banachraum. Falls eine Norm in einem Banachraum durch ein Skalarprodukt induziert werden kann, so heisst der Raum Hilbertraum.

(c) Sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum. Zeige dass das Parallelogrammgesetz *gilt, d.h.*

$$\|f+g\|^2 + \|f-g\|^2 = 2(\|f\|^2 + \|g\|^2), \qquad \forall\, f,g \in \mathcal{H}, \tag{8}$$

wobei die Norm diejenige ist die vom Skalarprodukt induziert wird, d.h. $\|f\| = \sqrt{\langle f,f\rangle}$.

Lösung Per Definition von der induzierten Norm und wegen der Linearität des Skalarprodukts bekommen wir

$$\begin{aligned} ||f+g||^2 + ||f-g||^2 &= \langle f+g, f+g\rangle + \langle f-g, f-g\rangle \\ &= \langle f,f\rangle + \langle f,g\rangle + \langle g,f\rangle + \langle g,g\rangle + \langle f,f\rangle - \langle f,g\rangle - \langle g,f\rangle + \langle g,g\rangle \\ &= 2||f||^2 + 2||g||^2 \ . \end{aligned} \tag{L.17}$$

(d) Zeige dass $L^p(X)$ nur ein Hilbertraum sein kann falls $p = 2$.

Hinweis: Zeige durch eine clevere Wahl von f und g dass (8) verletzt ist für $p \neq 2$.

Lösung Eine clevere Wahl ;-) ist die beschränkte Menge X in zwei disjunkte Teilmengen X_1, X_2 aufzuteilen, so dass $X = X_1 \cup X_2$ und $X_1 \cap X_2 = \emptyset$. Zusätzlich wählen wir

$$\begin{aligned} &f(x) = \frac{1}{\sqrt[p]{\mathrm{vol}(X_1)}} \quad \text{falls} \quad x \in X_1 \\ &f(x) = 0 \quad \text{falls} \quad x \notin X_1 \\ &g(x) = \frac{1}{\sqrt[p]{\mathrm{vol}(X_2)}} \quad \text{falls} \quad x \in X_2 \\ &g(x) = 0 \quad \text{fals} \quad x \notin X_2 \end{aligned} \tag{L.18}$$

wobei $\mathrm{vol}(X_1)$ das Volumen der Menge X_1 und $\mathrm{vol}(X_2)$ das Volumen der Menge X_2 bezeichnet. Dann ist

$$\begin{aligned} \int_X |f(x)|^p \mathrm{d}x &= \int_{X_1} |f(x)|^p \mathrm{d}x = \int_{X_1} \frac{1}{\mathrm{vol}(X_1)} \mathrm{d}x = 1 \\ \int_X |g(x)|^p \mathrm{d}x &= \int_{X_2} |g(x)|^p \mathrm{d}x = \int_{X_2} \frac{1}{\mathrm{vol}(X_2)} \mathrm{d}x = 1 \ . \end{aligned} \tag{L.19}$$

Wir können nun die linke Seite von dem Parallelogrammgesetz ausrechnen als

$$\begin{aligned} ||f+g||_p^2 + ||f-g||_p^2 &= \Big(\int_X |f(x)+g(x)|^p \mathrm{d}x \Big)^{\frac{2}{p}} + \Big(\int_X |f(x)-g(x)|^p \mathrm{d}x \Big)^{\frac{2}{p}} \\ &= \Big(\int_X |f(x)|^p \mathrm{d}x + \int_X |g(x)|^p \mathrm{d}x \Big)^{\frac{2}{p}} + \Big(\int_X |f(x)|^p \mathrm{d}x + \int_X |g(x)|^p \mathrm{d}x \Big)^{\frac{2}{p}} \\ &= 2^{\frac{2}{p}} + 2^{\frac{2}{p}} = 2^{(1+\frac{2}{p})} \ . \end{aligned} \tag{L.20}$$

Die rechte Seite des Parallelogrammgesetzes ergibt

$$2(||f||^2 + ||g||^2) = 2(1+1) = 2^2 \ . \tag{L.21}$$

Wenn wir nun diese beiden Seiten vergleichen sehen wir dass unterschiedlich sind — es sei denn $p = 2$. Da jeder Verktorraum in welchem eine Norm durch ein Skalarprodukt induziert wird das Parallelogrammgesetz erfüllen muss (siehe c)) zeigt dies dass $L^p(X)$ kein Hilbertraum sein kann für $p \neq 2$.

(e) Zeige dass

$$\langle f, g \rangle = \int_X \bar{f(x)} g(x) \, \mathrm{d}x \tag{9}$$

ein Skalarprodukt in $L^2(X)$ ist und bestimme die Norm welche dadurch induziert wird. Bemerke dass $\bar{f}$ das komplex konjugierte von f bezeichnet.

Lösung Die Eigenschaften vom Skalarprodukt

1. sesquilinear, d.h.
   (a) $\langle f_1 + f_2, g \rangle = \langle f_1, g \rangle + \langle f_2, g \rangle$
   (b) $\langle f, g_1 + g_2 \rangle = \langle f, g_1 \rangle + \langle f, g_2 \rangle$
   (c) $\langle \lambda f, g \rangle = \bar{\lambda} \langle f, g \rangle$
   (d) $\langle f, \lambda g \rangle = \lambda \langle f, g \rangle$
2. hermitsch, d.h. $\langle f, g \rangle = \overline{\langle g, f \rangle}$
3. positiv definit, d.h $\langle f, f \rangle \geq 0$ and $\langle f, f \rangle = 0$ dann und nur dann falls $f = 0$ (fast überall).

folgen direkt aus der Lineariät des Integrals. Deshalb induziert dieses innere Produkt eine Norm und wir wissen dass wir in einem Banachraum sind — also sind wir sogar in einem Hilbertraum.