Übung 1. ***Rechnen mit Kommutatoren.***

Der Kommutator $[A, B] = AB - BA$ zweier Operatoren ist linear in A, B und antisymmetrisch: $[A, B] = -[B, A]$.

(a) Zeige 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 zwei folgenden Teilaufgaben b) und c) gelte für die betrachteten Operatoren A und B

$$[A, [A, B]] = 0, \tag{3}$$
$$[B, [A, B]] = 0. \tag{4}$$

(b) Zeige, dass

$$[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B], \tag{5}$$
$$[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B] \tag{6}$$

(c) Zeige, dass

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^B \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]}. \tag{7}$$

Diese Gleichung ist unter dem Namen *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel* bekannt.
Hinweis. Zeige, dass $f(t) = \mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ *die Differentialgleichung* $\frac{df}{dt} = (A + B + t[A, B])f$ *erfüllt und löse diese.*

(d) Nun seine A, B wieder beliebige Operatoren (insbesondere werden die Bedingungen (3),(4) nicht mehr vorausgesetzt) für die gilt

$$[A, B] = c\mathbb{1} \quad (c \neq 0,\ c \in \mathbb{C}). \tag{8}$$

Zeige, dass die Annahme A, B seien beide beschränkt, im Widerspruch zu (8) steht.
Hinweis. Zeige zuerst, dass aus (8) $B^n \neq 0$ *für alle* $n \in \mathbb{N}$ *folgt. Betrachte dazu den Operator* $[A, B^n]$ *und seine Norm.*

Seien nun x, p wie üblich der Orts- respektive Impulsoperator.

(e) Berechne $[x, p^2]$, $[x^2, p^2]$, $[xp, p^2]$

(f) Seien $g(x), f(p)$ in einer Taylor-Reihe entwickelbare Funktionen. Zeige, dass dann aus $[x, p] = i\hbar$ die Operator-Relationen $[p, g(x)] = -i\hbar\frac{d}{dx}g(x)$ und $[x, f(p)] = i\hbar\frac{d}{dp}f(p)$ folgen.[1]

[1] An dieser Stelle soll noch auf die eventuell etwas verwirrende Verwendung von x, p sowohl als Operatoren wie auch als Variablen eingegangen werden. Gemeint ist hier - salopp formuliert - folgendes: Das Argument der Funktionen f ist “per se” mal eine Zahl. Lässt sich diese Funktion in einer Taylor-Reihe entwickeln, dann ist f auch als Funktion eines Operators definiert, da wir Operatoren addieren sowie deren Potenzen berechnen können. Im Term $[x, f(p)]$ ist also x ein Operator, $f(p)$ ist die Funktion f mit dem Operator p als Argument und somit ebenfalls ein Operator.

Lösung.

(a) Kommutatoren ausschreiben.

(b) Beweis per Induktion: Für $n = 1$ ist die Behauptung (5) offensichtlich erfüllt. Der Schritt $n \to n+1$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} [A, B^{n+1}] &= [A, B^n B] = B^n[A, B] + [A, B^n]B = B^n[A, B] + nB^{n-1}[A, B]B && (9) \\ &= B^n[A, B] + nB^n[A, B] = (n+1)B^n[A, B], && (10) \end{aligned}$$

womit (5) bewiesen ist. Der Beweis der zweiten Behauptung verläuft ähnlich. Für $n = 1$ ist diese offensichtlich erfüllt. Der Induktionsschritt ist

$$\begin{aligned} [A^{n+1}, B] &= [A, B]A^n + [A^n, B]A = [A, B]A^n + nA^{n-1}[A, B]A && (11) \\ &= A^n[A, B] + nA^n[A, B] = (n+1)A^n[A, B]. && (12) \end{aligned}$$

(c) Unter Verwendung des vorherigen Aufgabenteils erhalten wir

$$[\mathrm{e}^{tA}, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!}[A^n, B] = \sum_{n=0}^{\infty} nA^{n-1}\frac{t^n}{n!}[A, B] = t\mathrm{e}^{tA}[A, B] = t[A, B]\mathrm{e}^{tA}. \quad (13)$$

Wir definieren $f(t) = \mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ und leiten $f(t)$ nach t ab:

$$\frac{df}{dt} = A\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB} + \mathrm{e}^{tA}B\mathrm{e}^{tB} = (A + \mathrm{e}^{tA}B\mathrm{e}^{-tA})f(t) = (A + B + [A, B]t)f(t). \quad (14)$$

Es gilt $f(0) = 1$ und aufgrund von (3) und (4) gilt $[A + B, [A, B]] = 0$, und wir erhalten

$$f(t) = \mathrm{e}^{t(A+B)}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}t^2[A,B]}. \quad (15)$$

Für $t = 1$ erhält man also

$$\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{A+B}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]}, \quad (16)$$

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

(d) Als erstes vergewissern wir uns, dass aus (8) direkt die Behauptungen (3),(4) folgen. Wir haben

$$[A, [A, B]] = [A, c\mathbb{1}] = 0 \quad (17)$$

und die analoge Argumentation gilt für (4). Damit dürfen wir die Resultate (5),(6) im Folgenden verwenden. Also nächtes wollen wir Beweisen, dass $B^n \neq 0\ \forall n \in \mathbb{N}$. Für $n = 1$ betrachten wir

$$|c| = ||c\mathbb{1}|| = ||[A, B]|| = ||AB - BA|| \leq ||AB|| + ||BA|| \leq 2||A||\,||B||, \quad (18)$$

was im Widerspruch zu $B = 0$ und $A = 0$ steht. Für den Induktionsschritt haben wir einerseits

$$||[A, B^n]|| = ||nB^{n-1}[A, B]|| = ||nB^{n-1}c\mathbb{1}|| = \underbrace{n|c|\,||B^{n-1}||}_{I}, \quad (19)$$

und andererseits

$$||[A, B^n]|| \leq ||A, B^n|| + ||B^nA|| \leq \underbrace{2||A||\,||B^n||}_{II} \leq \underbrace{2||A||\,||B^{n-1}||\,||B||}_{III}. \quad (20)$$

Vergleich von I und II zusammen mit $A \neq 0$ zeigt den Induktionsschritt

$$||B^n|| \geq \frac{n|c|\,||B^{n-1}||}{2||A||}. \quad (21)$$

Damit ist $B^n \neq 0\ \forall n \in \mathbb{N}$ bewiesen und wir dürfen I und III durch $||B^{n-1}||$ dividieren. Wir erhalten

$$n|c| \leq 2||A||\,|B||, \quad (22)$$

was im Widerspruch zur Annahme steht, dass A und B beide beschränkt sind, da n beliebig grosse Werte annehmen kann. Das heisst, dass sich die "kanonischen" Kommutatorrelationen der QM nicht durch zwei beschränkten Operatoren erfüllen lassen.

(e) Wir wissen: $[x,p]=i\hbar$, $[x,x]=[p,p]=0$.

$$[x,p^2]=p[x,p]+[x,p]p=2i\hbar p \tag{23}$$
$$[x^2,p^2]=x[x,p^2]+[x,p^2]x=2i\hbar(xp+px) \tag{24}$$
$$[xp,p^2]=x\underbrace{[p,p^2]}_{=0}+[x,p^2]p=2i\hbar p^2 \tag{25}$$

(f) Wir entwickeln die Funktionen

$$g(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{g^{(n)}(0)}{n!}x^n, \quad f(p)=\textstyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}p^n. \tag{26}$$

Mit

$$[p,x^n] \quad = x[p,x^{n-1}]-i\hbar x^{n-1}=x(x[p,x^{n-2}]-i\hbar x^{n-2})-i\hbar x^{n-1} \tag{27}$$
$$= ... = x^{n-1}[p,x]-i\hbar(n-1)x^{n-1}=-i\hbar n x^{n-1} \tag{28}$$

folgt

$$[p,g(x)]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{g^{(n)}(0)}{n!}[p,x^n]=-i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{g^{(n)}(0)}{n!}nx^{n-1}=-i\hbar\frac{d}{dx}g(x), \tag{29}$$

und analog

$$[x,f(p)]=i\hbar\frac{d}{dp}f(p). \tag{30}$$

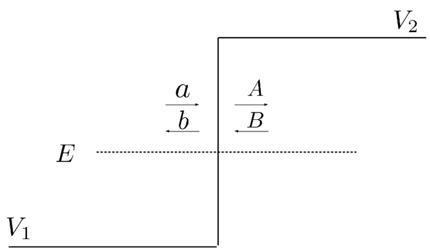
Übung 2. *Transfermatrix Formalismus.*

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,

$$V(x)=\begin{cases} V_1 & \text{falls } x<0 \\ V_2 & \text{falls } x\geq 0, \end{cases} \tag{31}$$

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:

$$\psi(x)=\begin{cases} a\mathrm{e}^{\lambda_1 x}+b\mathrm{e}^{-\lambda_1 x} & \text{falls } x<0 \\ A\mathrm{e}^{\lambda_2 x}+B\mathrm{e}^{-\lambda_2 x} & \text{falls } x\geq 0, \end{cases} \tag{32}$$

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

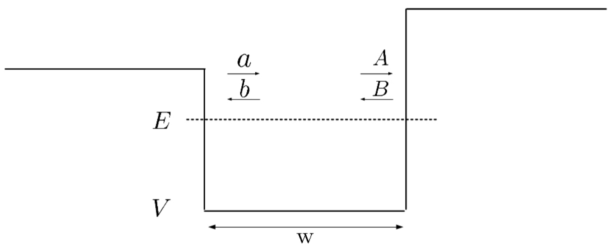
(a) Die Amplituden a, b hängen linear von den Amplituden A, B ab,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \tag{33}$$

wobei $M \in \mathrm{M}(2 \times 2, \mathbb{C})$. 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.

(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 $E < V$.



Skizze zur Propagation im konstanten Potential, dargestellt für den Fall $E > V$.

(d) Zuletzt werden wir den Formalismus noch an einem konkreten Problem anwenden. Einem Teilchen der Masse m mit Energie E wird eine Serie von Potentialbarrieren der Höhe $V = 2E$ in den Weg gestellt. Eine einzelne Barriere hat die Breite $w = \hbar\pi/\sqrt{2mE}$ und der Abstand zwischen den Barrieren betrage ebenfalls w. Wie viele Barrieren muss man dem Teilchen in den Weg stellen, damit die Wahrscheinlichkeit einer Transmission weniger als 10^{-6} beträgt?
Hinweis. Für diese Teilaufgabe kann geeignete Computersoftware eingesetzt werden.

Lösung. Wir definieren $k_i = \sqrt{2m(E - V_i)}/\hbar$ für Bereiche mit $E > V_i$ und $\alpha_i = \sqrt{2m(V_i - E)}/\hbar$ für $E < V_i$. Aus der Stetigkeit von ψ, $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ folgen direkt ein 2×2 Gleichungssystem für die Amplituden. Die Koeffizientenmatrizen für die einzelnen Fälle lauten wie folgt:

(a) $E < V_1 < V_2$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} & 1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \\ 1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} & 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \end{pmatrix} \tag{34}$$

$V_1 < E < V_2$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i\alpha_2}{k_1} & 1 - \frac{i\alpha_2}{k_1} \\ 1 - \frac{i\alpha_2}{k_1} & 1 + \frac{i\alpha_2}{k_1} \end{pmatrix} \tag{35}$$

$V_1 < V_2 < E$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{pmatrix} \tag{36}$$

(b) Ebenso erhält man für $E < V_2 < V_1$:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} & 1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \\ 1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} & 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \end{pmatrix} \tag{37}$$

$V_2 < E < V_1$:

$$M = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{k_2}{i\alpha_1} & 1-\frac{k_2}{i\alpha_1} \\ 1-\frac{k_2}{i\alpha_1} & 1+\frac{k_2}{i\alpha_1} \end{pmatrix} \tag{38}$$

$V_2 < V_1 < E$:

$$M = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{k_2}{k_1} & 1-\frac{k_2}{k_1} \\ 1-\frac{k_2}{k_1} & 1+\frac{k_2}{k_1} \end{pmatrix} \tag{39}$$

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

$$M = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\alpha w} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\alpha w} \end{pmatrix} \tag{40}$$

und für $E > V$

$$M = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ikw} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ikw} \end{pmatrix}. \tag{41}$$

(d) Da $V = 2E$ haben wir $k = \alpha = \sqrt{2mE}/\hbar$. Wir berechnen zuerst die Transfermatrix durch eine Barriere:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ikw} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{ikw} \end{pmatrix}}_{freie\ Propagation} \underbrace{\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{pmatrix}}_{Stufe\ hoch} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{kw} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-kw} \end{pmatrix}}_{exp.\ Abfall} \underbrace{\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix}}_{Stufe\ runter} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{42}$$

Matrixmultiplikation und ausrechnen von $kw = \pi$ ergibt somit

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\cosh\pi & -i\sinh\pi \\ i\sinh\pi & -\cosh\pi \end{pmatrix}}_{:=M_B} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{43}$$

und für n solcher Potentiale aneinandergereiht lautet die Transfermatrix somit M_B^n. Zum Berechnen der n-ten Potenz von M_B kann nun entweder entsprechende Software verwendet, oder aber die Diagonalisierbarkeit von M_B ausgenutzt werden. Man findet die Eigenwerte $\lambda_1 = -\cosh\pi + \sinh\pi$ und $\lambda_2 = -\cosh\pi - \sinh\pi$ zu den Eigenvektoren

$$v_1 = \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \tag{44}$$

Daraus folgt

$$M_B^n = T\begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} T^{-1}, \qquad T = \begin{pmatrix} i & 1 \\ -1 & -i \end{pmatrix}. \tag{45}$$

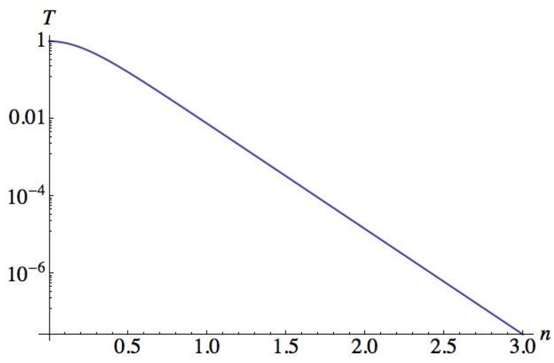
Somit erhalten wir für den Fall, dass von rechts keine einlaufende Welle auf die Hindernisse auftrifft,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 1 \\ -1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -i & -1 \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} A\lambda_1^n + A\lambda_2^n \\ -iA\lambda_1^n - iA\lambda_2^n \end{pmatrix}. \tag{46}$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit ergibt sich also zu

$$T = \left|\frac{A}{a}\right|^2 = \left|\frac{1}{2}(-\cosh\pi + \sinh\pi)^n + \frac{1}{2}(-\cosh\pi - \sinh\pi)^n\right|^2. \tag{47}$$

Ein Log-Plot von T zeigt, dass schon für 3 Barrieren die Transmissionswahrscheinlichkeit kleiner als 10^{-6} ist.



Log-Plot der Transmissionswahrscheinlichkeit als Funktion von n.