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.*

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 $\mathrm{GaAs/Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$) 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

(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.

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

Übung 3. Erwartungswerte und Operatordarstellung

Lernziel: In dieser Aufgabe werden wir die Definition des Erwartungswerts [Gl. (2.24) im Skript] eines Operators begründen. Ausserdem wird gezeigt, dass der Impulsoperator $\boldsymbol{p}$ *in der Ortsdarstellung die Form* $-i\hbar\nabla$ *hat.*

Betrachte einen Operator A und einen Zustand ψ. Der Erwartungswert von A bezüglich ψ ist definiert als

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \int d^n r \psi^*(\boldsymbol{r}, t) A_r \psi(\boldsymbol{r}, t), \tag{5}$$

wobei A_r den zu A gehörenden Operator in der Ortsdarstellung repräsentiert.

(a) Erkläre, weshalb dies eine sinnvolle Definition für den Erwartungswert ist.

Hinweis: Beginne mit der allgemeinen Definition eines Erwartungswerts bekannt aus der Wahrscheinlichkeitstheorie und beachte, dass für Hermitesche Operatoren reelle Erwartungswerte folgen sollen.

Alternativ kann man $\langle A \rangle$ in der Impulsdarstellung schreiben als

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} \psi^*(\boldsymbol{p}, t) A_p \psi(\boldsymbol{p}, t), \tag{6}$$

wobei A_p nun den Operator zu A in der Impulsdarstellung repräsentiert. Dies kann hilfreich sein in Situationen, wo es einfacher ist mit A_p zu arbeiten statt mit A_r.

(b) In der Impulsdarstellung lautet der Impulsoperator $P_p = \boldsymbol{p}$, d.h. er wirkt als Multiplikation mit $\boldsymbol{p}$. Benutze Gl. (5) und (6) sowie $\int d^n\boldsymbol{r} |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = 1$ um zu zeigen, dass $P_r = -i\hbar\nabla$.