Übung 1. Rechnen mit Kommutatoren

(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

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

und Gleichung (L.4) lässt sich schreiben als

$$\frac{df}{dt} = (A + B + [A,B]t)f(t). \tag{L.6}$$

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

$$f(t) = e^{t(A+B)}e^{\frac{1}{2}t^2[A,B]}. \tag{L.7}$$

Für $t = 1$ erhält man also

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

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

Übung 2. Quantenmechanische Operatoren zu physikalischen Observablen

(a) 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.

$$\frac{1}{4}\Big[\frac{1}{m(x)}p^2 + p^2\frac{1}{m(x)}\Big] \qquad \textit{oder} \qquad \frac{1}{\sqrt{m(x)}}\frac{p^2}{2}\frac{1}{\sqrt{m(x)}}, \tag{L.9}$$

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

(b) Wir lösen die zeitunabhängigle 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

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \nabla\Big[\frac{-\hbar^2}{2m(x)}\nabla\psi\Big] = \frac{-\hbar^2}{2m(x)}\nabla\psi\Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} = \frac{-\hbar^2}{2m_+}(\nabla\psi)_+ - \frac{-\hbar^2}{2m_-}(\nabla\psi)_- = 2\epsilon E\psi(0), \tag{L.10}$$

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

$$\frac{(\nabla\psi)_+}{m_+} = \frac{(\nabla\psi)_-}{m_-}. \tag{L.11}$$

(c) Daraus finden wir, dass der Strom

$$J_- = -\frac{i\hbar}{2m_-}[\psi_-^*(\nabla\psi)_- - \psi_-(\nabla\psi^*)_-] = -\frac{i\hbar}{2m_+}[\psi_+^*(\nabla\psi)_+ - \psi_+(\nabla\psi^*)_+] = J_+, \tag{L.12}$$

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

Übung 3. Erwartungswerte und Operatordarstellung

(a) Aus der Wahrschienlichkeitstheorie kennen wir den Erwartungswert einer Funktion f über eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\Pr[\boldsymbol{r}]$ als $\mathbb{E}[f(\boldsymbol{r})] = \int d^n r \Pr[\boldsymbol{r}] f(\boldsymbol{r})$. In der Quantenmechanik korrespondiert die Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit $|\psi|^2$, d.h. $\Pr[\boldsymbol{r}] = |\psi(\boldsymbol{r})|^2 = \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$. Wir erwarten deshalb, dass der Erwartungswert den Operator A und $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ enthalten sollte. Dies ist in

$$\langle A\rangle = \langle\psi, A\psi\rangle = \int d^n r \psi^*(\boldsymbol{r},t) A_r \psi(\boldsymbol{r},t) \tag{L.13}$$

der Fall. Man könnte nun auch weitere Kombinationen in Betracht ziehen, wie z.B. $A_r\psi\psi^*$. Doch da wir einen reellen Erwartungswert $\langle A\rangle$ haben müssen, muss der Integrand selbstadjungiert sein. Tatsächlich haben wir für Gl. (L.13)

$$\begin{aligned}
\langle\psi, A\psi\rangle^* &= \left(\int d^n r\ \psi^*(\boldsymbol{r},t) A_r \psi(\boldsymbol{r},t)\right)^* && \text{(L.14)}\\
&= \int d^n r\ \psi(\boldsymbol{r},t)\,(A_r\psi(\boldsymbol{r},t))^* && \text{(L.15)}\\
&= \int d^n r\ (A_r\psi(\boldsymbol{r},t))^*\,\psi(\boldsymbol{r},t) && \text{(L.16)}\\
&= \langle A\psi, \psi\rangle && \text{(L.17)}\\
&= \langle\psi, A^\dagger\psi\rangle && \text{(L.18)}\\
&= \langle\psi, A\psi\rangle && \text{(L.19)}
\end{aligned}$$

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

Also ist $\langle A \rangle$ reell.

(b) Für den Operator P einen Zustand ψ kann man schreiben

$$\langle P \rangle = \int d^n r \psi^*(\boldsymbol{r}, t) P_r \psi(\boldsymbol{r}, t), \tag{L.20}$$

wobei P_r den Impulsoperator in Ortsdarstellung ist. In Impulsdarstellung wirkt P als Multiplikation mit $\boldsymbol{p}$, also

$$\langle P \rangle = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} \psi^*(\boldsymbol{p}, t) P_p \psi(\boldsymbol{p}, t) = \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} \psi^*(\boldsymbol{p}, t) \boldsymbol{p} \psi(\boldsymbol{p}, t) \; . \tag{L.21}$$

Mit der Definition der Fouriertransformierten von $\psi(\boldsymbol{p}, t)$ und $\psi^*(\boldsymbol{p}, t)$ finden wir

$$\langle P \rangle = \int d^n r d^n r' \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r'}/\hbar} \psi^*(\boldsymbol{r'}, t) \boldsymbol{p} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{L.22}$$

Weiterhin gilt

$$\boldsymbol{p} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \psi(\boldsymbol{r}, t) = \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \right) \psi(\boldsymbol{r}, t) \; . \tag{L.23}$$

Von $\int d^n \boldsymbol{r} |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = 1$ lernen wir dass $\lim_{r\to\infty} \psi(\boldsymbol{r}, t) = 0$. Deshalb mit partieller Integration

$$\int d^n r \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \right) \psi(\boldsymbol{r}, t) = \int d^n r e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\boldsymbol{r}, t) \right) \tag{L.24}$$

folgt. Also können wir schreiben

$$\langle P \rangle = \int d^n r d^n r' \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r'}/\hbar} \psi^*(\boldsymbol{r'}, t) e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\boldsymbol{r}, t) \right) \tag{L.25}$$

$$= \int d^n r d^n r' \psi^*(\boldsymbol{r'}, t) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\boldsymbol{r}, t) \right) \int \frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r'}/\hbar} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{L.26}$$

$$= \int d^n r d^n r' \psi^*(\boldsymbol{r'}, t) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\boldsymbol{r}, t) \right) \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) \tag{L.27}$$

$$= \int d^n r \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \left(-i\hbar \nabla \psi(\boldsymbol{r}, t) \right). \tag{L.28}$$

Ein Vergleich mit Gl. (L.20) ergibt $P_r = -i\hbar\nabla$.