Übung 1. Delta-“Funktion”

(a) Es gelte $f(x_i) = 0$ und $f'(x_i) \neq 0$ mit $i = 1, \dots, N$. D.h. $f(x)$ ist auf den Intervallen $I_i = (x_i - \epsilon_i, x_i + \epsilon_i)$ für geeignetes ϵ_i invertierbar. Weiterhin gilt $\delta(f(x)) = 0$ für $x_i \notin \cup_{i=1}^N I_i$. Damit kann man schreiben

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(f(x))\, g(x) = \sum_i \int_{I_i} dx\, \delta(f(x))\, g(x) \overset{y=f(x)}{=} \sum_i \int_{f(I_i)} \frac{1}{|f'(f^{-1}(y)|} \delta(y)\, g(f^{-1}(y))\, dy \tag{L.1}$$

$$= \sum_i \frac{1}{|f'(\underbrace{f^{-1}(0)}_{x_i})|} g(\underbrace{f^{-1}(0)}_{x_i}) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} g(x_i) \tag{L.2}$$

$$\Rightarrow \delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \tag{L.3}$$

Damit folgt direkt $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$

(b) Die Integrale über ein endliches Intervall lassen sich einfach lösen. Für $a = \infty$ finden wir

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon/\pi}{x^2 + \epsilon^2} dx = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\epsilon}{z^2 + \epsilon^2} dz = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi} 2\pi i\, \epsilon\, \underbrace{\mathrm{Res}_{i\epsilon} \left(\frac{1}{z^2 + \epsilon^2} \right)}_{1/2i\epsilon} = 1 \quad \diamond \tag{L.4}$$

und für die zweite Darstellung

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x/\epsilon}{\pi x} dx &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi} \int \frac{1}{2i} \frac{e^{ix/\epsilon} - e^{-ix/\epsilon}}{x} dz = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{2i\pi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix/\epsilon}}{x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix/\epsilon}}{x} dx \right) \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{i\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{e^{iz/\epsilon}}{z} dz = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi i} \pi i\, \underbrace{\mathrm{Res}_0 \left(\frac{e^{iz/\epsilon}}{z} \right)}_{1} = 1 \quad \diamond \end{aligned} \tag{L.5}$$

(c) Die Fouriertransformierte der Delta-Funktion lautet

$$\hat{\delta}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) e^{-ikx} = e^0 = 1. \tag{L.6}$$

Ausserdem kann man explizit zeigen

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\hat{\delta}(k)e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{0} dk\,e^{ikx} + \int_{0}^{\infty} dk\,e^{ikx}\right) \tag{L.7}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{0} dk\,e^{ik(x-i\epsilon)} + \int_{0}^{\infty} dk\,e^{ik(x+i\epsilon)}\right) \tag{L.8}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{i(x-i\epsilon)}e^{ik(x-i\epsilon)}\Big|_{\infty}^{0} + \frac{1}{i(x+i\epsilon)}e^{ik(x+i\epsilon)}\Big|_{\infty}^{0}\right) \tag{L.9}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{i(x-i\epsilon)} - \frac{1}{i(x+i\epsilon)}\right) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} \tag{L.10}$$

In Aufgabe 1(c)(i) wurde nachgewiesenen, dass diese Lorentz-Kurve (im Limes $\epsilon \to 0$) einer Darstellung der δ-Funktion entspricht.

Übung 2. Entartete und nicht-entartete Operatoren

(a) Es gelte $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Damit folgt

$$[A,B] = 0 \quad \Rightarrow \quad AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle\,, \tag{L.11}$$

Falls $|\psi\rangle$ ein nicht-entarteter Eigenvektor von A ist, folgt daraus, dass $B|\psi\rangle$ ebenfalls Eigenvektor von A zu Eigenwert a ist. Das heisst $B|\psi\rangle$ muss proportional zu $|\psi\rangle$ sein, also $B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$.

Nun sei $|\psi\rangle$ ein k-fach entarteter Eigenraum von A zum Eigenwert a. Das heisst man kann nach Gl. L.11 schreiben

$$B|\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^{k} c_{nm}|\psi_m\rangle\,, \tag{L.12}$$

wobei ψ_m eine Eigenbasis von A zum Eigenwert a darstellt. Wir bermerken, dass die Koeffizientenmatrix C hermitesch ist:

$$c_{nm} = \langle\psi_m|B|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|B^\dagger|\psi_m\rangle^* = \langle\psi_n|B|\psi_m\rangle^* = c^*_{mn} \tag{L.13}$$

Das heisst, es gibt eine unitäre Matrix U ($UU^\dagger = U^\dagger U = 1$), so dass $U^\dagger C U = C_D$ diagonal ist. Wir behaupten nun: $|\psi_r\rangle = \sum m = 1^k U^*_{mr}|\psi_m\rangle$ sind Eigenfunktionen von A und B. Für A ist dies klar und für B gilt

$$\langle\psi_s|B|\psi_r\rangle = \sum_{m,m'}\langle\psi_{m'}|U_{m's}BU^*_{mr}|\psi_m\rangle = \sum_{m,m'} U_{m's}\underbrace{\langle\psi_{m'}|B|\psi_m\rangle}_{c_{mm'}}U^*_{mr} \tag{L.14}$$

$$= \sum_m \underbrace{\left(\sum_{m'} c_{mm'}U_{m's}\right)}_{=CU=UU^\dagger CU=UC_D=U_{ms}C_D} U^*_{mr} = C_D \underbrace{\sum_m U^*_{mr}U_{ms}}_{U^\dagger U=\delta sr} = C_D\,\delta_{sr} \qquad \diamond \tag{L.15}$$

In die Rückrichtung lässt sich die Behauptung einfach zeigen: Sei $\{|\Psi_i\rangle\}$ ein vONS zu A und B, dann gilt $[A,B]|\Psi_i\rangle = AB|\Psi_i\rangle - BA|\Psi_i\rangle = a_ib_i|\Psi_i\rangle - b_ia_i|\Psi_i\rangle = 0$.

Übung 3. Vollständige Orthogonalsysteme

(a) Aus den periodischen Randbedingungen $\psi(x_N) = \psi(x_0)$ folgt, dass $e^{ik_m x_N} = e^{ik_m x_0}$ und somit $k_m \cdot Na = 2\pi m$ gelten muss, was direkt zu $k_m = 2\pi m/L$ führt. Betrachten wir $k_N = 2\pi N/(Na)$, erkennen wir, dass für unser diskretes System $\psi_N(x_n) = \psi_0(x_n)$ gilt, wie auch allgemeiner $\psi_{\alpha N+m}(x_n) = \psi_m(x_n)$ für $\alpha \in \mathbb{Z}$. Somit sind die erlaubten k-Werte gegeben durch $k_m = 2\pi m/L$ mit $m \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$. Eine äquivalente Wahl wäre auch $m \in \{-N/2, \ldots, 0, \ldots, N/2-1\}$ für N gerade. Dies entspricht der 1. Brillouin-Zone.

Wir merken an, dass die Diskretheit der k-Werte aus der endlichen Länge L resultiert, wohingehen die endliche Zahl der erlaubten k-Werte aus der Diskretheit der Gitterpositionen mit Abstand a resultiert, $N = L/a$. Dies ist eine wichtige generelle Erkenntnis.

Die gegebene Basis ist orthonormiert, da

$$\begin{aligned}\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle &= \sum_{n=0}^{N-1} \psi^*_{m'}(x_n)\psi_m(x_n) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{i(k_m - k_{m'})x_n} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{2\pi i(m-m')n/N} \\ &= \frac{1}{N}\frac{1-e^{2\pi i(m-m')}}{1-e^{2\pi i(m-m')/N}} = \sum_{\alpha\in\mathbb{Z}} \delta_{m,m'+\alpha N} \xrightarrow{m,m'\in\{0,\ldots,N-1\}} \delta_{m,m'}, \end{aligned} \tag{L.16}$$

wobei wir eine geometrische Reihe berechnet haben. Da wir periodische Randbedingungen gewählt haben, sind die Punkte x_0 und x_N äquivalent und wir müssen sie als einen Punkt betrachten (und nur über einen der beiden summieren). Zudem ist die Basis vollständig, da

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^{N-1} \psi^*_m(x_{n'})\psi_m(x_n) &= \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1} e^{ik_m(x_n - x_{n'})} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{2\pi i m(n-n')/N} \\ &= \frac{1}{N}\frac{1-e^{2\pi i(n-n')}}{1-e^{2\pi i(n-n')/N}} = \sum_{\alpha\in\mathbb{Z}} \delta_{n,n'+\alpha N} \xrightarrow{n,n'\in\{0,\ldots,N-1\}} \delta_{n,n'}. \end{aligned} \tag{L.17}$$

(b) Wie wir in (a) diskutiert haben, folgt die Diskretheit der k-Werte aus der endlichen Länge L und den periodischen Randbedingungen. Wir betrachten hier wiederum eine endliche Länge, sodass die k-Werte wiederum diskret sind mit $k_m = 2\pi m/L$. Im Grenzwert $a \to 0$ gibt es keine Beschränkung an die k-Werte mehr und deshalb gilt $m \in \mathbb{Z}$. Wir wählen nun die Basisfunktionen $\psi_m(x) = c\exp(ik_m x)$, wobei wir die Konstante c durch die Normierung bestimmen. Wir betrachten

$$\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle = \int_0^L dx |c|^2 e^{i(k_m - k_{m'})x} = |c|^2 \int_0^L dx e^{2\pi i(m-m')x/L} = |c|^2 L \delta_{m,m'} \tag{L.18}$$

und erkennen, dass die Basisfunktionen für $c = 1/\sqrt{L}$ orthonormiert sind. Wir zeigen nun noch die Vollständigkeit (mit $c = 1/\sqrt{L}$) durch

$$\begin{aligned}\sum_m \psi^*_m(x')\psi_m(x) &= \frac{1}{L}\sum_m e^{ik_m(x-x')} = \frac{1}{L}\sum_m \left(e^{2\pi i(x-x')/L}\right)^m \\ &= \sum_{\alpha\in\mathbb{Z}} \frac{1}{L}\delta((x-x')/L + \alpha) \xrightarrow{x,x'\in[0,L)} \delta(x-x'), \end{aligned} \tag{L.19}$$

wobei wir die Poisson-Formel $\sum_m e^{2\pi i x m} = \sum_n \delta(x+n)$ benutzt haben.

(c) Da nun die periodischen Randbedingungen wegfallen, müssen die k-Werte nicht mehr diskret sein, sondern können kontinuierlich sein. Aufgrund der Diskretheit des Gitters gibt es aber wiederum einen maximalen k-Wert $k_{\max} = 2\pi/a$. Somit finden wir $k \in [0, 2\pi/a)$ (oder $k \in [-\pi/a, \pi/a)$, was der 1. Brillouin-Zone entspricht). Wir betrachten also $\psi_k(x_n) = ce^{ikx_n}$ mit Normierungsfaktor c. Betrachten wir nun die Orthogonalität, folgt

$$\begin{aligned}\langle\psi_{k'}|\psi_k\rangle &= \sum_n \psi^*_{k'}(x_n)\psi_k(x_n) = |c|^2\sum_n e^{i(k-k')an} \\ &= |c|^2\sum_\alpha \delta\Big(\frac{(k-k')a}{2\pi}+\alpha\Big) \xrightarrow{k,k'\in[0,2\pi/a)} \frac{2\pi}{a}|c|^2\delta(k-k'),\end{aligned} \tag{L.20}$$

wobei wir die Poisson-Formel sowie das Resultat von Aufgabe 1 (a) benutzt haben. Somit sind die Basisfunktionen für $c = \sqrt{a/2\pi}$ auf eine Dirac-Deltafunktion orthonormiert. Für kontinuierliche k-Werte ist eine Normierung bezüglich einem Kronecker-Delta üblicherweise nicht möglich. Die Vollständigkeit folgt (mit $c = \sqrt{a/2\pi}$) aus

$$\int_0^{2\pi/a} dk\psi^*_k(x_{n'})\psi_k(x_n) = \frac{a}{2\pi}\int_0^{2\pi/a} e^{ik(x_n-x_{n'})}\,dk = \frac{a}{2\pi}\int_0^{2\pi/a} e^{ika(n-n')}\,dk = \delta_{n,n'} \tag{L.21}$$

(d) Für ein unendlich ausgedehntes, kontinuierliches System, fallen die beiden Einschränkungen an die erlaubten k-Werte von (a) weg und somit sind mögliche Basisfunktionen $\psi_k(x) = ce^{ikx}$. Die Orthogonalität zwischen den Funktionen ist gegeben durch

$$\langle\psi_{k'}|\psi_k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*_{k'}(x)\psi_k(x) = |c|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\,e^{i(k-k')x} = 2\pi|c|^2\delta(k-k'), \tag{L.22}$$

wobei wir das Resultat von Aufgabe 1(e) benutzt haben. Somit sind die Basisfunktionen für $c = 1/\sqrt{2\pi}$ auf eine Deltafunktion normiert. Die Vollständigkeitsbedingung liefert (mit $c = 1/\sqrt{2\pi}$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\psi^*_k(x')\psi_k(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,e^{ik(x-x')} = \delta(x-x'). \tag{L.23}$$

Übung 4. Teilchen im Topf

(a) Die Wellenfunktionen müssen in allen Bereichen die Schrödingergleichung erfüllen. Daraus finden wir direkt $l = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$. Des weiteren müssen sowohl die Wellenfunktion als auch die Ableitung der Wellenfunktion bei $x = -w/2$ sowie bei $x = w/2$ stetig sein. Daraus finden wir für $\psi^{(+)}$

$$b = c\cos(-lw/2), \qquad c\cos(lw/2) = A, \tag{L.24}$$

$$\alpha b = -lc\sin(-lw/2), \qquad -lc\sin(lw/2) = -\alpha A. \tag{L.25}$$

Wir erkennen, dass $A = b = \cos(lw/2)c$ gilt und finden zudem durch Division der beiden Gleichungen die transzendente Gleichung

$$\tan\frac{lw}{2} = \frac{\alpha}{l}. \tag{L.26}$$

Analog dazu finden wir für $\psi^{(-)}$ die Beziehung $A = -b = \sin(lw/2)c$ und die transzendente Gleichung

$$\cot\frac{lw}{2} = -\frac{\alpha}{l}, \tag{L.27}$$

wie bereits in der Vorlesung, vgl. Formel (3.31). Zudem gilt $\alpha^2 + l^2 = 2mV/\hbar^2$. Die beiden transzendenten Gleichungen (L.26) und (L.27) bestimmen die Energieeigenwerte E_n der gebundenen Zustände. Der unendlich tiefe Topf besitzt ein diskretes Spektrum mit unendlich vielen gebundenen Zuständen mit Energien

$$E_n^\infty = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mw^2}n^2 = E_0(\pi n)^2, \tag{L.28}$$

mit $E_0 = \hbar^2/2mw^2$. Der endlich tiefe Topf besitzt ein diskretes Spektrum aus gebundenen Zuständen $E_n < V$ und ein kontinuierliches Spektrum $E > V$. Die Anzahl gebundener Zustände n_{bound} ist endlich mit $n_{\text{bound}} > 0$. Aus der graphischen Lösung der transzendenten Gleichungen (oder aus den Gleichungen selbst) erkennen wir, dass die Anzahl Lösung bestimmt ist durch $n_{\text{bound}} = \lfloor\sqrt{V/E_0}/\pi\rfloor$ mit $E_0 = \hbar^2/2mw^2$.

(b) Die Energien E_n des endlichen Topfes sind bestimmt durch die transzendenten Gleichungen (L.26) und (L.27) bzw. mit der Notation aus dem Skript

$$\xi\cot\xi = -\eta, \qquad \xi\tan\xi = \eta, \tag{L.29}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{V}{4E_0} \tag{L.30}$$

mit $\xi = lw/2 = \sqrt{E/E_0}/2$ und $\eta = \alpha w/2 = \sqrt{(V-E)/E_0}/2$. Jeder Energie E_n entspricht eine Lösung ξ_n obiger Gleichung mit $E_n = E_0(2\xi_n)^2$. Mit $\xi_n \to n\pi/2$ finden wir das Spektrum eines unendlich tiefen Topfes wieder.

Für $V \to \infty$ divergiert die rechte Seite der zweiten transzendenten Gleichung (L.30). Für endliche Lösungen ξ_n muss somit das zugehörige η_n divergieren. Aus der ersten Gleichung (L.29) folgt dadurch als Bedingung für die Lösungen

$$\cot\xi_{2n} \xrightarrow{V\to\infty} \infty, \qquad \tan\xi_{2n+1} \xrightarrow{V\to\infty} \infty, \tag{L.31}$$

woraus wir $\xi_n \to n\pi/2$ finden und somit $E_n \to E_0\pi^2 n^2 = E_n^\infty$.

Um die Abweichung vom Fall eines unendlichen Topfes zu betrachten, entwickeln wir $\xi_n = \xi_n^\infty - \delta\xi_n$ mit $\xi_n^\infty = n\pi/2$. Wir nehmen an, dass $\delta\xi_n$ klein ist, sodass wir in Gl. (L.29) entwickeln können und finden

$$\xi_n\tan\xi_n \approx \frac{n\pi}{2}\frac{1}{\delta\xi_n} = \eta_n. \tag{L.32}$$

Einsetzen in Gl. (L.30) liefert

$$\xi_n^2 + \left(\frac{n\pi}{2\delta\xi_n}\right)^2 \approx (\xi_n^\infty)^2 + \left(\frac{n\pi}{2\delta\xi_n}\right)^2 \approx \frac{V_0}{4E_0}, \tag{L.33}$$

woraus folgt, dass

$$\delta\xi_n \approx \frac{n\pi}{\sqrt{V/E_0 - n^2\pi^2}} \tag{L.34}$$

Wir merken an, dass die Entwicklung in Gl. (L.32) nur für kleine $\delta\xi_n$ gültig ist und somit, wie wir aus obiger Gleichung (L.34) erkennen, nur für $V \gg n^2\pi^2 E_0 = E_n^\infty$, also nur für tiefe gebundene Zustände. In diesem Fall finden wir

$$\delta\xi_n = n\pi\sqrt{E_0/V}. \tag{L.35}$$

Mit $E_n = 4E_0\xi_n^2$ folgt für $\delta E_n = E_n - E_n^\infty$

$$\delta E_n \approx -8E_0\xi_n^\infty \delta\xi_n = 4\pi^2 E_0\sqrt{\frac{E_0}{V}} \cdot n^2 \tag{L.36}$$

und wir sehen, dass dies für tiefe gebundene Zustände klein ist aufgrund von $E_0 \ll V$ und proportional zu n^2 wächst. Somit sind höhere gebundene Zustände mehr von der endlichen Potentialtopf-Tiefe beeinflusst als tiefer liegende.

(c) Ein Potentialtopf in 1d hat immer zumindest einen gebundenen Zustand, wie man aus der graphischen Lösung der transzendenten Gleichungen erkennt. Betrachten wir Gl. (L.30) für $V_\epsilon \ll E_0$ folgt, dass $\xi, \eta \ll 1$. Somit können wir in Gleichung (L.29) entwickeln und erhalten

$$\eta = \xi \tan\xi \approx \xi^2. \tag{L.37}$$

Einsetzen in Gl. (L.30) liefert eine quadratische Gleichung

$$\xi^2 + \xi^4 \approx \frac{V_\epsilon}{4E_0}, \tag{L.38}$$

für ξ^2, woraus wir die Lösung

$$\xi_1^2 \approx (\sqrt{1 + V_\epsilon/E_0} - 1)/2 \approx \frac{V_\epsilon}{4E_0} - \frac{V_\epsilon^2}{16E_0^2}, \tag{L.39}$$

sodass die Energie des gebundenen Zustandes $E_1 = V_\epsilon - V_\epsilon^2/4E_0$ folgt. Die Bindungsenergie ist somit $E_1 - V = -V_\epsilon^2/4E_0 = -m(wV_\epsilon)^2/2\hbar^2$. Gemäss Kapitel 3.5 hat ein Delta-Potential $V(x) = -V_0\delta(x)$ einen gebundenen Zustand mit Bindungsenergie $-mV_0^2/2\hbar^2$. Der Parameter V_0 des Delta-Potentials charakterisiert die 'Stärke' des Potentials und hat Einheiten Energie · Länge. Im Fall des infinitesimalen Potentialtopfes charakterisiert wV_ϵ die effektive 'Stärke' des Topfes und die beiden Ausdrücke korrespondieren somit.