Universität des Saarlandes
Fachrichtung 7.1 – Theoretische Physik
Prof. Dr. H. G. Schuster

Saarbrücken, 16.04.2010

Übungen zur Theoretischen Physik III für Lehramtskandidaten
(Quantenmechanik+Statistische Physik)
SS 2010, Blatt 2

3. hermitesche Operatoren (2 Punkte)

Wenn ein Operator $\hat{A}$ hermitesch ist, gilt (Vorlesung 2.48):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)\hat{A}g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ (\hat{A}f(x))^* g(x) \tag{1}$$

a) $\hat{A} = \hat{x}\hat{p}$, Orstdarstellung: $\hat{x} \to x, \hat{p} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Wenn $\hat{x}\hat{p}$ hermitesch ist muss (1) für alle $f(x), g(x) \in L^2(R^n)$gelten

$$\underbrace{\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x) x \frac{\partial}{\partial x} g(x)}_{①} = \underbrace{-\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x\left(\frac{\partial}{\partial x} f^*(x)\right) g(x)}_{②}$$

partielle Integration der linken Seite:

$$① : \frac{\hbar}{i}\left[f^*(x)g(x)x\right]\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ g(x)\frac{\partial}{\partial x}\left(f^*(x)x\right)$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \left(\frac{\partial}{\partial x} f^*(x)\right) x g(x) - \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x)$$

weil $\frac{\hbar}{i}\left[f^*(x)g(x)x\right]\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$ für alle $f(x), g(x) \in L^2(R^n)$, (für alle quadratintegrablen Funktionen)

Aus ① = ② folgt:

$$0 = -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x)$$

was nicht allgemein für alle $f(x), g(x)$ gilt. Somit ist $\hat{x}\hat{p}$ nicht hermitesch.

b) $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$. Damit $\hat{A}$ hermitesch ist muss (1) gelten. Berechnung der linken Seite von (1):

$$\begin{aligned}
\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ g^*(x)\hat{A}f(x) &= \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)\left(x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\right)g(x) \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)x\left(\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right) + \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x)\right. \\
&\left. + \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)x\left(\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right)\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)x\left(\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right) + \frac{\hbar}{2i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x) \\
\text{partielle Integration} \quad &= \frac{\hbar}{i}\left[\underbrace{f^*(x)xg(x)|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ \left(f^*(x) + x\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x)\right] \\
&+ \frac{\hbar}{2i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x) \\
&= -\frac{\hbar}{2i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x) - \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ x\left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x)
\end{aligned}$$

Und die rechte Seite von (1):

$$\begin{aligned}
\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ (\hat{A}f(x))^*g(x) &= \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ \left[\left(-x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\right)f^*(x)\right]g(x) \\
&= \frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ x\left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x) - \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x)\right. \\
&\left. -\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ x\left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x)\right) \\
&= -\frac{\hbar}{2i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)g(x) - \frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ x\left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x)
\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)\hat{A}g(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ (\hat{A}f(x))^*g(x)$$

und somit ist der Operator $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$ hermitesch.

Andere Möglichkeit:

Zunächst wird gezeigt, dass $\hat{p}$ hermitesch ist. Für hermitesche Operatoren gilt nach (1):

$$\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)\frac{\partial}{\partial x}g(x) = -\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ \left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x)$$

Rechte Seite partielle Integration:

$$-\frac{\hbar}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ \left(\frac{\partial}{\partial x}f^*(x)\right)g(x) = -\frac{\hbar}{i}\left(\underbrace{f(x)^*g(x)|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x)\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right)$$

$\rightarrow\ \hat{p}$ ist hermitesch

Analog kann gezeigt werden, dass $\hat{x}$ hermitesch ist. Zudem wurde in der Vorlesung gezeigt, dass für die Matrixeinträge a_{ij} einer hermiteschen Matrix $\hat{A}$ gilt Vorlesung (2.46):

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{ji}^* \\ a_{ji}^* &= (a_{ij}^*)^T \end{aligned}$$

wobei $(a_{ij}^*)^T = a_{ij}^\dagger$ die Matrixeinträge der adjungierten Matrix sind. Somit gilt für hermitesche Operatoren: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

$$\begin{aligned} \rightarrow\ \ \hat{x} &= \hat{x}^\dagger \\ \hat{p} &= \hat{p}^\dagger, \quad \text{da diese hermitesch sind} \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} &(\hat{x}\hat{p})^\dagger = \hat{p}^\dagger\hat{x}^\dagger = \hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p} \qquad \rightarrow\ \text{nicht hermitesch} \\ &\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})^\dagger = \frac{1}{2}(\hat{p}^\dagger\hat{x}^\dagger + \hat{x}^\dagger\hat{p}^\dagger) = \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p}) \qquad \rightarrow\ \text{hermitesch} \end{aligned}$$

4. Reflexion an einer Potentialstufe (2 Punkte)

a) (1 Punkt)

Zeitunabhï¿½ngige Schrï¿½dinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} & \hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \\ \Leftrightarrow\quad & \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right) = E\psi(x) \\ \Leftrightarrow\quad & \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \end{aligned}$$

$x < 0$:

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$x > 0$:

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

b) (1 Punkt)
$\underline{x < 0:}$
Allgemeine Lï¿½sung der Differentialgleichung:

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \qquad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \qquad \psi_I(x) = A\left(e^{ikx} + Re^{-ikx}\right)$$

$\underline{x > 0,\ E > V_0:}$

$$\psi_{II}(x) = A \cdot Te^{iqx} \qquad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$\underline{x > 0,\ E < V_0:}$

$$\psi_{II}(x) = A \cdot Te^{-\lambda x} \qquad \text{mit } \lambda = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

c) (2 Punkte)
Stetigkeit von $\psi(x)$:

$$\psi_I(0) = A(1 + R) = A \cdot T = \psi_{II}(x)$$
$$\Rightarrow \qquad 1 + R = T \tag{2}$$

$\underline{E > V_0:}$
Stetigkeit von $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$:

$$\frac{\partial\psi_I(0)}{\partial x} = ikA(1 - R) = iqA \cdot T = \frac{\partial\psi_{II}^(0)}{\partial x}$$
$$\Rightarrow \qquad k(1 - R) = qT$$

Zusammen mit (2) ergibt sich:

$$T = \frac{2k}{k + q} \qquad R = \frac{k - q}{k + q}$$

$\underline{E < V_0:}$
Stetigkeit von $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$:

$$\frac{\partial\psi_I^(0)}{\partial x} = ikA(1 - R) = -\lambda A \cdot T = \frac{\partial\psi_{II}^(0)}{\partial x}$$
$$\Rightarrow \qquad k(1 - R) = i\lambda T$$

Wieder mit (2) ergibt sich:

$$T = \frac{2k}{k + i\lambda} \qquad R = \frac{k - i\lambda}{k + i\lambda}$$

d) (3 Punkte)
Die Stromdichte ist definiert als: $j = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\psi' - \psi\psi^{*\prime})$.
Die einlaufende Stomdichte ist mit $\psi_0(x) = Ae^{ikx}$ also:

$$j_0 = \frac{\hbar}{2mi}|A|^2\left(e^{-ikx}ike^{ikx} - e^{ikx}(-ik)e^{-ikx}\right)$$
$$= |A|^2\frac{\hbar k}{m}$$

Reflektierte Stromdichte fï¿½r $\psi_R(x) = A \cdot Re^{-ikx}$:

$$j_R = |A|^2 |R|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right)$$

$\underline{E > V_0}$:

$$j_R = |A|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right) \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 = |A|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right) \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}\right)^2$$

$\underline{E < V_0}$:

$$j_R = |A|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right) \frac{k^2 + \lambda^2}{k^2 + \lambda^2} = |A|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right)$$

Transmittierte Stromdichte fï¿½r $\psi_T(x) = A \cdot Te^{iqx}$ bzw. $\psi_T(x) = A \cdot Te^{\lambda x}$:

$$j_R = |A|^2 |R|^2 \left(-\frac{\hbar k}{m}\right)$$

$\underline{E > V_0}$:

$$j_T = |A|^2 |T|^2 \frac{\hbar q}{m} = |A|^2 \frac{\hbar q}{m} \left(\frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}\right)^2$$

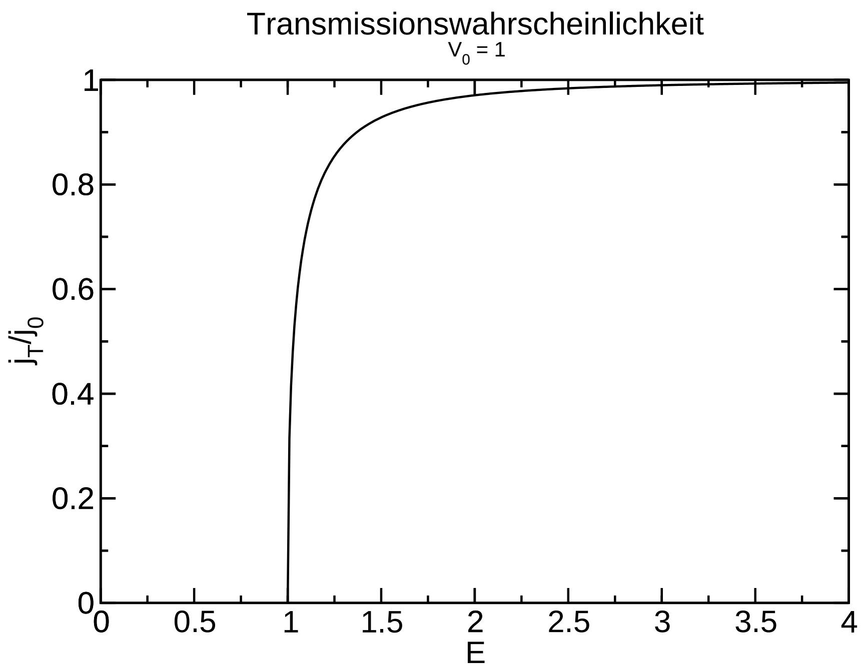
$\underline{E < V_0}$:

$$j_T = |A|^2 |T|^2 \frac{\hbar}{2mi} \left(e^{-\lambda x}(-\lambda)e^{-\lambda x} - e^{-\lambda x}(-\lambda)e^{-\lambda x}\right) = 0$$

Fï¿½r $E < V_0$ wird der gesamte Wahrscheinlichkeitsstrom an der Stufe reflektiert:

$$\frac{j_R}{j_0} = -1; \qquad \text{-1 wegen Richtungswechsel der Welle}$$

Im Vergleich zum Verhalten eines Teilchens in der klassischen Mechanik, kann das Teilchen an der Potentialstufe reflektiert werden, auch wenn die Energie mit $E > V_0$ ausreichen wï¿½rde, um die Stufe zu ï¿½berwinden. Des Weiteren ist die Wellenfunktion fï¿½r $E < V_0$ im positiven Bereich der x-Achse nicht null. Die Wellenfunktion dringt also in den verbotenen Bereich $x > 0$ ein.


Transmissionswahrscheinlichkeit
V0 = 1
jT/j0
E
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4