P::1 Zeigen Sie, daß für beliebige quadratintegrable Funktionen $\phi, \psi \in L^2(\mathbb{R})$ über

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \overline{\phi(x)}\psi(x)$$

ein hermitesches Skalarprodukt definiert wird.

P::2 Machen Sie sich die in der Vorlesung gemachten Bemerkungen zur Bracketschreibweise klar: Seien die möglichen Eigenzustände eines Systems mit Λ_i bezeichnet. Dann läßt sich z.B. der Hamiltonoperator schreiben als

$$H = \sum_{i,j} |\Lambda_i\rangle\langle\Lambda_i|H|\Lambda_j\rangle\langle\Lambda_j| = \sum_{i,j} |\Lambda_i\rangle H_{ij}\langle\Lambda_j|\,.$$

Dies definiert die Matrixelemente H_{ij} des Operators H. Ein beliebiger Zustand läßt sich schreiben als

$$|\psi\rangle = \sum_i |\Lambda_i\rangle\psi_i\,.$$

Zeigen Sie, daß dann gilt:

$$|H\psi\rangle = \sum_{i,j} |\Lambda_i\rangle H_{ij}\psi_j\,.$$

Machen Sie sich klar, daß in **P::1** offensichtlich

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\psi(x)\,, \qquad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

die Verallgemeinerung der obigen Schreibweise auf eine kontinuierliche Basis von Eigenzuständen darstellt. Was ergibt $\langle x|x'\rangle$?

P::3 Führen Sie den Basiswechsel von der Ortsraumdarstellung $\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle$ in die Impulsraumdarstellung $\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = (\mathcal{F}\psi)(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\psi\rangle$ direkt mit Hilfe der bra-ket-Notation aus. Wiederholen Sie dabei noch einmal Begriffe wie Orthonormalbasis, Vollständigkeitsrelation und ggfls. Fouriertransformation.

P::4 *Dichtematrix eines Spin-$\frac{1}{2}$-Gemisches*: Die Dichtematrix ϱ eines Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens läßt sich mit den Pauli-Matrizen σ_j, $j = x, y, z$, zusammen mit der Identität $\mathbb{1}$ schreiben als

$$\varrho = \tfrac{1}{2}\,\mathbb{1} + a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z\,.$$

Es soll die Wahrscheinlichkeit $w(\uparrow_{\theta,\varphi})$ bestimmt werden, daß bei einer Messung in einem kleinen Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ in Richtung von $\mathbf{e}(\theta,\varphi)$ der Spin nach oben zeigt.

[1] Begründen Sie, warum der Koeffizient vor $\mathbb{1}$ gerade $\frac{1}{2}$ sein muss, und bestimmen Sie ρ in der Basis ihrer Eigenvektoren.

[2] Bestimmen Sie den Eigenzustand Λ für den Meßwert $\hbar/2$ des Spin-$\frac{1}{2}$-Operators

$$S_{\theta,\varphi} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_x e_x + \sigma_y e_y + \sigma_z e_z\right)\,.$$

[3] Begründen Sie, warum $w(\uparrow_{\theta,\varphi}) = \langle\Lambda|\rho|\Lambda\rangle$ ist. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit.

[4] Diskutieren Sie Ihr Ergebnis für $a = b = 0$ und verschiedene Werte von c. Warum ist dies keine Einschränkung der Allgemeinheit? Wie groß ist die Polarisation des Strahls? Wann liegt ein reiner Zustand vor?

Erinnerung: Die Pauli-Matrizen erfüllen $\sigma_j\,\sigma_k = \delta_{jk} + \mathrm{i}\,\epsilon_{jkl}\,\sigma_l$.

H::1 *Periodisches Potential*: Betrachten Sie das eindimensionales Problem eines Teilchens, das sich in einem periodischen Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{wenn} \quad n\ell < x < n\ell + a\,, \\ V_0 & \text{wenn} \quad n\ell - b < x < n\ell\,, \end{cases} \qquad n \in \mathbb{Z}\,,$$

bewegt. Es sei (zunächst) $E < V_0$, so daß die Wellenzahlen

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \text{und} \qquad \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

lauten. Bestimmen Sie die erlaubten Energiebänder, indem Sie wie folgt vorgehen:

[1] Stellen Sie Ansätze für $\psi(x)$ für $0 < x < a$ und $a < x < \ell$ auf. Es ist sehr hilfreich, die Ansätze in $\cosh\kappa(x-a)$, $\frac{1}{\kappa}\sinh\kappa(x-a)$ und trigonometrischen Funktionen so zu machen, daß die Anschlußbedingungen für $x = a$ automatisch erfüllt sind.

[2] Wie in der Vorlesung gezeigt, muß es eine Matrix $M = \left(\begin{smallmatrix}\alpha & \beta \\ \gamma & \delta\end{smallmatrix}\right)$ geben, so daß

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(\ell) \\ \psi'(\ell) \end{pmatrix}$$

ist. Stellen Sie möglichst einfache Gleichungen für $\alpha, \ldots, \delta$ auf, indem Sie die freien Konstanten in Ihrem Ansatz für $\psi(x)$ so wählen, daß $\left(\begin{smallmatrix}\psi(0) \\ \psi'(0)\end{smallmatrix}\right)$ einmal proportional zu $\left(\begin{smallmatrix}1 \\ 0\end{smallmatrix}\right)$ und einmal zu $\left(\begin{smallmatrix}0 \\ 1\end{smallmatrix}\right)$ wird.

[3] Nutzen Sie die Bedingung $|\mathrm{tr}M| = |\alpha + \delta| \leq 2$, um aus den gefundenen Gleichungen die Bedingung

$$\left|\cos\kappa_1 a \cosh\kappa_2 b + \frac{\kappa_2^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1\kappa_2} \sin\kappa_1 a \sinh\kappa_2 b\right| \leq 1 \qquad (*)$$

abzuleiten.

[4] Gehen Sie nun zu dem Grenzfall $a \gg b$, $E \ll V_0$ mit $\kappa_2 b \ll 1$ über. Drücken Sie die obige Bedingung $(*)$ in diesem Grenzfall als $1 \geq |f(\kappa_1 a, \gamma)|$ aus, d.h. als Funktion allein von $\kappa_1 a$ und $\gamma = \frac{mV_0}{\hbar^2}ab$. Skizzieren Sie $f(\kappa_1 a, \gamma)$ für $\gamma = 5$ und markieren Sie die erlaubten Energiebänder als erlaubte Bereiche von $\kappa_1 a$. (Computer!)

[5] Betrachten Sie einen anderen Spezialfall, nämlich $a = b$. Setzen Sie $\kappa_1 a = \eta$ und $\kappa_2 a = \sqrt{\xi^2 - \eta^2}$. Drücken Sie $(*)$ nun als Funktion von η und ξ aus, d.h. $1 \geq |g(\eta, \xi)|$. Aus der Vorlesung wissen Sie, daß genauer gilt:

$$\cos K\ell = g(\eta, \xi)\,, \qquad (**)$$

wobei K der (*reduzierte*) *Ausbreitungsvektor* genannt wird.

[6] Für den Fall $E > V_0$, d.h. $\eta^2 > \xi^2$, können Sie ebenfalls eine Gleichung der Form $(**)$ aufstellen, indem Sie einfach $\sqrt{\xi^2 - \eta^2}$ durch $\mathrm{i}\sqrt{\eta^2 - \xi^2}$ ersetzen. Skizzieren Sie schließlich die erlaubten Energiebänder in der $(K\ell, 2\kappa_1 a)$-Ebene, indem Sie die parametrisch definierte Funktion

$$\{x = \arccos[g(\eta, \xi)], y = 2\eta\}$$

für $\xi = 2$ und sowohl für $E < V_0$ als auch für $E > V_0$ betrachten. (Computer!) (10 P.)

H::2 *Bloch-Wellen.* In der Vorlesung wurde das Problem von Teilchen in einem periodischen Potential behandelt, das für die Festkörperphysik sehr wichtig ist. Betrachten Sie dazu das ein-dimensionale Beispiel eines Teilchens mit Masse m in dem periodischen Potential

$$V(x) = \lambda\frac{\hbar^2}{m}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na)\,.$$

Für die Eigenzustände $\psi_k(x)$ zum Eigenwert $E_k = \frac{\hbar^2}{2m}q_k^2$ macht man den Bloch-Wellen Ansatz

$$\psi_k(x) = \exp(\mathrm{i}kx)\,u_k(x)\,,$$

wobei die Funktion $u_k(x)$ die Periodizität des Gitters besitzt, $u_k(x+a) = u_k(x)$.

[**1**] Begründen Sie den Ansatz

$$\psi_k^{(n)}(x) = A_n\exp(\mathrm{i}q_kx) + B_n\exp(-\mathrm{i}q_kx)$$

im Intervall $na < x < (n+1)a$. Geben Sie die Bedingungen an, denen die Koeffizienten A_n und B_n genügen müssen.

[**2**] Leiten Sie aus den Anschlußbedingungen an den Punkten $x = na$ die Bestimmungsgleichung für den Parameter q_k her:

$$\cos(aq_k) + \frac{a\lambda}{aq_k}\sin(aq_k) = \cos(ak)\,.$$ (10 P.)

Übungen im Internet: `http://www.itp.uni-hannover.de/~flohr/lectures/`
Bei Fragen zu den Übungen wenden Sie sich bitte an:
Michael Flohr, Zimmer 342, Appelstr. 2, email: `flohr@itp.uni-hannover.de`