Beispiel 1: Mathematischer Formalismus, Erwartungswerte, Wahrscheinlichkeiten

Im Hilbertraum $\mathbb{C}^2$ (2–dimensionaler unitärer Vektorraum) ist eine Orthonormalbasis $\mathsf{E} = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ mit $\langle \mathbf{e}_j \, , \mathbf{e}_k \rangle = \delta_{jk}$, der Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ und ein weiterer Operator $\mathbf{B}$ gegeben, die durch ihre Wirkung auf die Elemente der Basis E definiert sind. Weiters ist eine zweite Basis $\mathsf{W} = \{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2\}$ gegeben, deren Elemente $\mathbf{w}_j$ als Linearkombinationen der Elemente $\mathbf{e}_k$ der Basis E dargestellt sind.

$$
\begin{array}{lcl|lcl||lcl}
\mathbf{H}\,\mathbf{e}_1 & = & \hbar\omega(1+i)\,\mathbf{e}_2 & \mathbf{B}\,\mathbf{e}_1 & = & +\hbar\omega\,\mathbf{e}_1 & \mathbf{w}_1 & = & \sqrt{2}\,\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \\
\mathbf{H}\,\mathbf{e}_2 & = & \hbar\omega(1-i)\,\mathbf{e}_1 & \mathbf{B}\,\mathbf{e}_2 & = & -\hbar\omega\,\mathbf{e}_2 & \mathbf{w}_2 & = & \mathbf{e}_1 + \sqrt{2}\,\mathbf{e}_2
\end{array}
$$

1. Gib die Matrix $\mathbf{W}$ an, die durch die Gleichungen $\mathbf{w}_j = \sum_{k=1}^{2} \mathbf{W}_{kj}\,\mathbf{e}_k$ definiert ist. Berechne
   a) die Determinante von $\mathbf{W}$,
   b) die dazu inverse Matrix $\mathbf{W}^{-1}$ und untersuche,
   c) ob $\mathbf{W}$ eine unitäre Transformation darstellt.

2. Berechne die Matrixdarstellung $\mathbf{B}^{\{w\}}$, die dem Operator $\mathbf{B}$ in der Basis $\mathsf{W} = \{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2\}$ zugeordnet ist und zeige, dass die Gleichung $\mathbf{B}^{\{w\}}\,\mathbf{B}^{\{w\}} = (\hbar\omega)^2 \mathbf{1}^{\{w\}}$ erfüllt ist.

3. Gib die Matrixdarstellungen $\mathbf{H}^{\{e\}}$ und $\mathbf{B}^{\{e\}}$ an, die den Operatoren $\mathbf{H}$ und $\mathbf{B}$ in der Orthonormalbasis $\mathsf{E} = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ zugeordnet sind.

4. Berechne mit Hilfe der E–Darstellung die Eigenwerte und zugehörige auf 1 normierte Eigenvektoren $\mathsf{U} = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\}$ des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$. Wie lautet die Spektraldarstellung von $\mathbf{H}$, wenn den Eigenwerten E_j die Projektionsoperatoren $\mathbf{Q}_j = \mathbf{u}_j \blacksquare \mathbf{u}_j^\dagger$ zugeordnet sind.

5. Gib die auf 1 normierten **stationären** Zustände $\mathbf{u}_j(t)$ des Systems explizit an.

6. Nimm an, dass zur Zeit $t = 0$ das System durch den **reinen** Zustand $\mathbf{z} = \mathbf{u}_1 + \beta\mathbf{u}_2$ gegeben ist, wobei $\beta \in \mathbb{C}$ eine beliebige komplexe Konstante ist. Gib die zeitliche Entwicklung $\widehat{\mathbf{z}}(t)$ des auf 1 normierten Anfangzustandes $\widehat{\mathbf{z}}$ für $t > 0$ an.

7. Berechne den Erwartungswert für den Operator $\mathbf{B}$ zur Zeit $t > 0$, wenn sich das System im stationären **Grundzustand** von $\mathbf{H}$ befindet.

8. Berechne den Erwartungswert für den Operator $\mathbf{B}$ zur Zeit $t = 0$, wenn sich das System im **Zustand z** befindet. Für welche Werte von $\beta \in \mathbb{C}$ ist der Erwartungswert von $\mathbf{B}$ Null?

9. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit zur Zeit $t > 0$ den Eigenwert $+\hbar\omega$ des Operators $\mathbf{B}$ zu messen, wenn sich das System im stationären **Grundzustand** von $\mathbf{H}$ befindet?

Beispiel 2: Stationäre Streuzustände

Der Hilbertraum $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R})$ zusammen mit den uneigentlichen Eigenfunktionen (ebene Wellen) ist der Zustandsraum der zur Beschreibung der Bewegung eines Teilchens mit der Masse m in einer Raumdimension herangezogen wird. Gesucht sind stationäre Streuzustände des Teilchens, das sich im folgenden Stufenpotential $V(x)$ bewegt, wobei $V_0 > 0$ und $a > 0$ angenommen ist:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \ldots \text{ Bereich 1:} & -\infty < x < 0 \\ -V_0 & \ldots \text{ Bereich 2:} & 0 \leq x \leq a \\ 0 & \ldots \text{ Bereich 3:} & a < x < 3a \\ -V_0 & \ldots \text{ Bereich 4:} & 3a \leq x \leq 4a \\ 0 & \ldots \text{ Bereich 5:} & 4a < x < +\infty \end{cases}$$

1. Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung, wenn für den Eigenwert $0 < E$ angenommen ist? Verwende für die stationären Streuzustände den folgenden allgemeinen Ansatz

$$\boxed{u(x,t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \begin{cases} A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx} & \ldots \text{ Bereich 1} \\ A_2\, e^{iKx} + B_2\, e^{-iKx} & \ldots \text{ Bereich 2} \\ A_3\, e^{ikx} + B_3\, e^{-ikx} & \ldots \text{ Bereich 3} \\ A_4\, e^{iKx} + B_4\, e^{-iKx} & \ldots \text{ Bereich 4} \\ A_5\, e^{ikx} + B_5\, e^{-ikx} & \ldots \text{ Bereich 5} \end{cases}}$$

   wobei die Grössen k und K entsprechend zu identifizieren sind.

2. Lege die Energie $E > 0$ so fest, dass $K = 2k$ gilt. Wie muss daher E als Funktion von V_0 gewählt werden, so dass die Gleichung $K = 2k$ gilt?

3. Die Stetigkeitsbedingungen für die gesuchten Koeffizienten $\vec{A}_j = [A_j, B_j]^\mathsf{T}$ mit $j = 1,2,3,4,5$ sind in Form der Matrixgleichungen $\vec{A}_j = \mathbf{Q}(a_j)\, \vec{A}_{j+1}$ gegeben. Verwende dabei

$$\boxed{\mathbf{Q}(a_j) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{i(k_{j+1}-k_j)a_j} & (1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{-i(k_{j+1}+k_j)a_j} \\ (1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{i(k_{j+1}+k_j)a_j} & (1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}) e^{-i(k_{j+1}-k_j)a_j} \end{bmatrix}}$$

   wobei mit $a_1 = 0$, $a_2 = a$, $a_3 = 3a$, und $a_4 = 4a$ die Sprungstellen des Potentials bezeichnet sind. Berechne die Stetigkeitsmatrizen $\mathbf{Q}(a_j)$ für alle Sprungstellen, wobei zusätzlich die Bedingung $K = 2k$ zu berücksichtigen ist.

4. Setze nun und bei allen folgenden Rechnungen $2ka = \pi$. Berechne damit alle Stetigkeitsmatrizen $\mathbf{Q}(a_j)$, bzw. berechne die **Transfermatrix** $\mathbf{M}$ als Produkt der Matrizen $\mathbf{Q}(0)$, $\mathbf{Q}(a)$, $\mathbf{Q}(3a)$ und $\mathbf{Q}(4a)$. Beachte, dass $\mathbf{M}$ die Spaltenmatrix $\vec{A}_1 = [A_1, B_1]^\mathsf{T}$ mit $\vec{A}_5 = [A_5, B_5]^\mathsf{T}$ verknüpft.

5. Setze $A_1 = 1$ und $B_5 = 0$ und berechne B_1 und A_5, die den Reflexions–, bzw. Transmissionskoeffizienten festlegen. Zeige, dass die **Bedingung** $|B_1|^2 + |A_5|^2 = 1$ erfüllt ist.