

2 Der mathematische Rahmen der Quantenmechanik

2.1 Der Raum der Wellenfunktionen

- Die Menge der quadratintegrablen Funktionen $\psi(\vec{x})$ auf \mathbb{R}^n wird als $L^2(\mathbb{R}^n)$ (bzw. L^2) bezeichnet

$$L^2(\mathbb{R}^n) = \{\psi(\vec{x}) : \int d^n x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty\}$$

- $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein **Vektorraum**, d.h. insbesondere falls $\psi, \phi \in L^2$ und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ dann ist auch

$$\lambda\psi + \mu\phi \in L^2 \tag{1}$$

- In L^2 lässt sich ein **Skalarprodukt** definieren. Jedem Paar $\psi, \phi \in L^2$ ordnen wir eine komplexe Zahl $(\psi, \phi) \in \mathbb{C}$ zu

$$(\psi, \phi) = \int d^n x \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x})$$

- **Eigenschaften des Skalarproduktes:**

- $(\psi, \phi)^* = (\phi, \psi)$
- $(\psi, \lambda\phi + \mu\chi) = \lambda(\psi, \phi) + \mu(\psi, \chi)$
- $(\lambda\psi + \mu\phi, \chi) = \lambda^*(\psi, \chi) + \mu^*(\phi, \chi)$
- Wenn $(\psi, \phi) = 0$ dann heißen ψ und ϕ **orthogonal**.

Es gilt

$$(\psi, \psi) = \int d^n x |\psi(\vec{x})|^2 \geq 0$$

und

$$(\psi, \psi) = 0 \iff \psi = 0$$

- Für das Skalarprodukt gilt die Cauchy - Schwartz - Ungleichung, womit sich Gleichung (1) beweisen lässt

$$|(\psi, \phi)| \leq \sqrt{(\psi, \psi)} \sqrt{(\phi, \phi)}$$

- Mit dem Skalarprodukt lässt sich eine **Norm** definieren

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) \geq 0$$

- Ein Vektorraum mit einem Skalarprodukt und einer dadurch induzierten Norm ist ein **(Prä-)Hilbertraum** \mathcal{H} .

Beispiele für Hilberträume, die in der Quantenmechanik wichtig sind:

- $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$, der Raum der quadratintegriblen Funktionen mit dem Skalarprodukt

$$(\psi, \phi) = \int d^n x \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x})$$

und der Norm

$$||\psi||^2 = (\psi, \psi) = \int d^n x |\psi(\vec{x})|^2$$

- $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, der Raum der n -komponentigen, komplexen Vektoren mit dem Skalarprodukt

$$(\psi, \phi) = \sum_{k=1}^n c_k^* d_k$$

für $\psi = (c_1, c_2, \dots, c_n)$ und $\phi = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ und der Norm

$$||\psi||^2 = (\psi, \psi) = \sum_{k=1}^n |c_k|^2$$

Bemerkung: Ein **Hilbertraum** ist ein vollständiger Prähilbertraum, d.h. jede konvergent Folge von Elementen $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$ konvergiert gegen ein Element $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

- Ein **linearer Operator** A ist eine Abbildung die jedem Element $\psi \in \mathcal{H}$ ein anderes Element zuordnet

$$A\psi = \tilde{\psi}$$

wobei gilt

$$A(\lambda\psi + \mu\phi) = \lambda A\psi + \mu A\phi$$

Beispiele:

- **Ortsoperator** \hat{x}_k mit $k = 1, 2, 3$

$$\hat{x}_k\psi(\vec{y}) = x_k\psi(\vec{y})$$

- **Impulsoperator** \hat{p}_k mit $k = 1, 2, 3$

$$\hat{p}_k\psi(\vec{x}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}\psi(\vec{x})$$

- **Operator der kinetischen Energie**

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

- **Hamiltonoperator**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

- **Drehimpulsoperator**

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \quad \text{d.h.} \quad \hat{L}_k = \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{klm} \hat{x}_l \hat{p}_m$$

- Das Produkt AB von linearen Operatoren A und B ist definiert durch

$$AB\psi(\vec{x}) = A[B\psi(\vec{x})]$$

Zuerst wird B angewendet, dann A . Im Allgemeinen gilt $AB \neq BA$.

- Die Differenz $AB - BA$ heißt **Kommutator** von A und B und wird bezeichnet als

$$[A, B] = AB - BA$$

Eigenschaften des Kommutators:

- $[A, B] = -[B, A]$
- $[\lambda A, B] = [A, \lambda B] = \lambda[A, B]$ für $\lambda \in \mathbb{C}$
- $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ und $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$ (Linearität)
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ und $[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$ (Kettenregel)

- Wichtige Kommutatoren in der Quantenmechanik:

- Für Ortsoperator \hat{x} und Impulsoperator \hat{p} in 1D gilt die **kanonische Kommutatorrelation**

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Beweis: Für beliebige $\psi(x)$ gilt

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x) = \hat{x} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) [x\psi(x)] = i\hbar\psi(x)$$

- Für Ortsoperator $\hat{\vec{x}}$ und Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ in 3D gilt

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl} \quad [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0 \quad (k, l = 1, 2, 3)$$

Beweis: Analog wie in 1D.

- Für die Komponenten des Drehimpulsoperators $\hat{\vec{L}}$ gilt

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar\epsilon_{klm}\hat{L}_m$$

Beweis: Definition des Drehimpulsoperators, Kettenregel und kanonischer Kommutator für Ort und Impuls.

- Der zu A **adjungierte Operator** A^\dagger erfüllt

$$(\psi, A\phi) = (A^\dagger\psi, \phi)$$

Beispiel: Sei A der Differentialoperator in einer Dimension $A = \frac{\partial}{\partial x}$

$$\begin{aligned} (\psi, A\phi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) A\phi(x) \\ &= \int dx \psi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \\ &= \psi^*(x) \phi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int dx \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) \right) \phi(x) \\ &\stackrel{!}{=} (A^\dagger\psi, \phi) \quad \text{also} \quad A^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

Allgemeiner gelten die **Eigenschaften des Adjungierens**:

- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(A\psi, \phi) = (\psi, A^\dagger\phi)$
- $(\lambda A + \mu B)^\dagger = \lambda^* A^\dagger + \mu^* B^\dagger$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

- Ein **selbstadjungierter (oder hermitescher) Operator** erfüllt

$$A = A^\dagger$$

Beispiel: Der Impulsoperator: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{p}\phi) &= \int dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi(x) \\&= - \int dx \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) \right) \phi(x) \\&= \int dx \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right)^* \phi(x) \\&= (\hat{p}\psi, \phi)\end{aligned}$$

Für die Eigenwerte und -vektoren eines hermiteschen Operators A

$$A\psi_{n,\alpha} = \lambda_n \psi_{n,\alpha}$$

gelten die Eigenschaften:

- Die **Eigenwerte sind reell**: $\lambda_n \in \mathbb{R}$
- Die **Eigenvektoren $\psi_{n,\alpha}$ sind orthogonal**:

$$(\psi_{n,\alpha}, \psi_{m,\beta}) = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}$$

[Beweis: Siehe später.]

2.2 Dirac Schreibweise

Ist eine sehr effiziente Notation für Rechnungen in der Quantenmechanik.

- Ein Vektor in einem Hilbertraum \mathcal{H} wird als '**Ket**' bezeichnet und geschrieben als

$$|\psi\rangle$$

- Ein lineares Funktional χ auf \mathcal{H} ist eine Abbildung, die einem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eine komplexe Zahl zuordnet

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \xrightarrow{\chi} \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

und linear ist:

$$\chi(\lambda |\psi\rangle + \mu |\phi\rangle) = \lambda \chi(|\psi\rangle) + \mu \chi(|\phi\rangle)$$

Der Raum der linearen Funktionalen ist selbst ein Vektorraum und heißt dualer Raum \mathcal{H}^* zu \mathcal{H} . Elemente im dualen Raum \mathcal{H}^* werden als '**Bra**' bezeichnet und geschrieben als

$$\langle\chi|$$

so, dass $\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$

- Wir können zu jedem Ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ einen Bra $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ assoziieren: $\langle\psi|$ bildet einen ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ auf die komplexe Zahl $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ ab, das heißt

$$\begin{aligned}\langle\psi|\phi\rangle &= (|\psi\rangle, |\phi\rangle) \\ &= \int d^n x \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) \quad [\text{für Elemente in } L^2]\end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle, \cdot)$$

Damit gilt (siehe Skalarprodukt):

- $\langle\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle$
- $\langle\psi|\lambda\phi_1 + \mu\phi_2\rangle = \lambda\langle\psi|\phi_1\rangle + \mu\langle\psi|\phi_2\rangle$
- $\langle\lambda\psi + \mu\phi|\phi\rangle = \lambda^* \langle\psi|\phi\rangle + \mu^* \langle\phi|\phi\rangle$
- $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ und $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff |\psi\rangle = 0$

- Für einen linearen Operator A gilt:

$$\begin{aligned}\langle \psi | A | \phi \rangle &= (|\psi\rangle, A |\phi\rangle) \\ &= \int d^n x \psi^*(\vec{x}) (A\phi(\vec{x})) \quad [\text{z.B. für Elemente in } \mathcal{H} = L^2]\end{aligned}$$

Es gilt

$$\langle \psi | A | \phi \rangle^* = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle$$

Beweis: $\langle \psi | A | \phi \rangle^* = (|\psi\rangle, A |\phi\rangle)^* = (A |\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle, A^\dagger |\psi\rangle) = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle$

Damit lassen sich Mittelwerte schreiben als

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} \rangle &:= \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int d^n x \psi^*(\vec{x}) (\hat{x} \psi(\vec{x})) = \int d^n x x |\psi(\vec{x})|^2 \\ \langle \vec{p} \rangle &:= \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int d^n x \psi^*(\vec{x}) (\hat{p} \psi(\vec{x})) = \int d^n x \psi^*(\vec{x}) (-i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{x}))\end{aligned}$$

- Es gilt

$$A |\psi\rangle = |\phi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle \psi | A^\dagger = \langle \phi |.$$

Beweis:

Wegen $A |\psi\rangle - |\phi\rangle = 0$ gilt für alle $|\chi\rangle$, dass $0 = \langle \chi | (A |\psi\rangle - |\phi\rangle) = \langle \chi | A |\psi\rangle - \langle \chi | \phi \rangle$

bzw. durch komplex konjugieren $0 = \langle \psi | A^\dagger | \chi \rangle - \langle \phi | \chi \rangle = (\langle \psi | A^\dagger - \langle \phi |) |\chi\rangle$ also $\langle \psi | A^\dagger = \langle \phi |$.

- Beweis für: Die **Eigenwerte** eines selbstadjungierten Operators sind **reell**.

Es gelte die Eigenwertgleichung

$$A |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle .$$

O.B.d.A. sei das Spektrum $\{\lambda_n\}$ diskret und die Eigenwerte seien nicht entartet. Damit gilt

$$\langle \psi_n | A | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \lambda_n | \psi_n \rangle = \lambda_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

und wegen $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = || |\psi\rangle ||^2 \geq 0$ gilt einerseits

$$\langle \psi_n | A | \psi_n \rangle^* = \lambda_n^* \langle \psi_n | \psi_n \rangle .$$

Andererseits

$$\langle \psi_n | A | \psi_n \rangle^* = \langle \psi_n | A^\dagger | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle = \lambda_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

und damit folgt

$$\lambda_n^* = \lambda_n .$$

- Beweis für: Die **Eigenvektoren** eines selbstadjungierten Operators sind **orthogonal**.

Wir multiplizieren die Eigenwertgleichung

$$A |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle$$

von links mit dem zum Eigenzustand $|\psi_m\rangle$ assoziierten Bra $\langle\psi_m|$

$$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle = \lambda_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle.$$

Damit gilt einerseits

$$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle^* = \lambda_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle^* = \lambda_n \langle\psi_n|\psi_m\rangle$$

und andererseits

$$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle^* = \langle\psi_n|A^\dagger|\psi_m\rangle = \langle\psi_n|A|\psi_m\rangle = \lambda_m \langle\psi_n|\psi_m\rangle$$

Also $(\lambda_n - \lambda_m) \langle\psi_n|\psi_m\rangle = 0$. Falls $\lambda_n \neq \lambda_m$ muss $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = 0$ gelten. Somit ist gilt für normierte Eigenzustände $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ die Orthogonalitätsrelation

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}.$$

Bemerkung: Falls die Eigenwerte λ_n entartet sind, können die Eigenzustände $\{|\psi_{n,\alpha}\rangle\}$ orthogonal gewählt werden, d.h. $\langle\psi_{n,\alpha}|\psi_{m,\beta}\rangle = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}$.

- Die **Eigenzustände** eines hermiteschen Operators **bilden eine vollständige Basis** im Hilbertraum.

Es gelte $A|\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle$ für einen Operator $A = A^\dagger$. Die Eigenzustände $\{|\psi_n\rangle\}$ bilden eine Basis, d.h. für alle Zustände $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ existiert eine Darstellung

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

mit Amplituden $c_n \in \mathbb{C}$.

Multiplikation von links mit $\langle\psi_m|$ ergibt $\langle\psi_m|\Psi\rangle = \sum_n c_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$.

Also sind die Amplituden

$$c_n = \langle\psi_n|\Psi\rangle.$$

Damit folgt für beliebiges $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\Psi\rangle = [\sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|] |\Psi\rangle$.

Die Eigenzustände erfüllen die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n| = \mathbb{1}$$

- Ein selbstadjungierter Operator besitzt eine **Spektraldarstellung**

$$A = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

wobei $|\psi_n\rangle$ und λ_n die Eigenzustände und -werte von A sind, $A |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle$.

Es gilt

$$\begin{aligned} A &= \mathbb{1} A \mathbb{1} = \left[\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right] A \left[\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \right] = \sum_{n,m} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| A |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \\ &= \sum_{n,m} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \lambda_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \\ &= \sum_{n,m} \lambda_m \delta_{nm} |\psi_n\rangle \langle \psi_m| = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \end{aligned}$$

- Die Funktion eines Operators $f(A)$ ist definiert als

$$f(A) = \sum_n f(\lambda_n) |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

- **Kommutierende Operatoren** $[A, B] = 0$ besitzen einen **gemeinsamen Satz von Eigenvektoren**

$$A |a_n, b_m, \alpha\rangle = a_n |a_n, b_m, \alpha\rangle$$

$$B |a_n, b_m, \alpha\rangle = b_m |a_n, b_m, \alpha\rangle$$

α ist ein Entartungsindex.

Beweis:

- Die Eigenwertgleichungen von A und B seien

$$A |a_{n\alpha}\rangle = a_n |a_{n\alpha}\rangle$$

$$B |b_{m\beta}\rangle = b_m |b_{m\beta}\rangle$$

Die Eigenvektoren von B können in der Basis der Eigenvektoren von A aufgespannt werden mit Amplituden $c_{m\beta}^{n\alpha} = \langle b_{m\beta} | a_{n\alpha} \rangle$

$$|a_{n\alpha}\rangle = \sum_m \sum_{\beta} c_{m\beta}^{n\alpha} |b_{m\beta}\rangle = \sum_m |\psi_{nm\alpha}\rangle$$

$$|\psi_{nm\alpha}\rangle := \sum_{\beta} c_{m\beta}^{n\alpha} |b_{m\beta}\rangle$$

Die $|\psi_{nm\alpha}\rangle$ sind (nicht-normierte) Eigenzustände von B

$$B |\psi_{nm\alpha}\rangle = b_m |\psi_{nm\alpha}\rangle.$$

- Es gilt

$$0 = (A - a_n) |a_{n\alpha}\rangle = \sum_m (A - a_n) |\psi_{nm\alpha}\rangle \quad (2)$$

- Wegen $[A, B] = 0$ gilt für jeden Term in der Summe

$$B(A - a_n) |\psi_{nm\alpha}\rangle = (A - a_n)B |\psi_{nm\alpha}\rangle = b_m(A - a_n) |\psi_{nm\alpha}\rangle$$

Also sind die Vektoren $(A - a_n) |\psi_{nm\alpha}\rangle$ wieder Eigenzustände von B zu Eigenwert b_m und daher linear unabhängig.

- Es muss daher jeder Term in der Summe in Gleichung (2) verschwinden, $(A - a_n) |\psi_{nm\alpha}\rangle = 0$, bzw

$$A |\psi_{nm\alpha}\rangle = a_n |\psi_{nm\alpha}\rangle$$

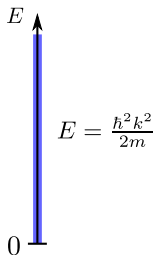
- Die normierten, gemeinsamen Eigenzustände von A und B zu Eigenwerten a_n und b_m sind daher

$$|a_n, b_m, \alpha\rangle := \frac{1}{\sqrt{\langle \psi_{nm\alpha} | \psi_{nm\alpha} \rangle}} |\psi_{nm\alpha}\rangle$$

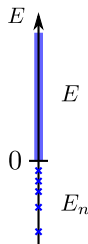
Bemerkung: Dies verallgemeinert sich für einen grösseren Satz $\{A, B, C, \dots\}$ kommutierender Operatoren.

- Das **Spektrum** (die Menge der Eigenwerte) eines selbstadjungierten Operators hat im Allgemeinen einen diskreten und/oder kontinuierlichen Anteil.

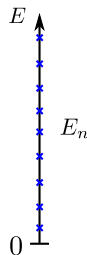
Beispiel: Spektrum des Hamiltonoperators \hat{H}



freies Teilchen



endlicher
Potentialtopf



unendlich tiefer
Potentialtopf

Die Eigenwertgleichung für einen selbstadjungierten Operator A lautet daher im Allgemeinen:

$$A |\psi_{n,\alpha}\rangle = \lambda_n |\psi_{n,\alpha}\rangle$$

$$\text{diskret: } \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots\}$$

$$A |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle = \lambda |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle$$

$$\text{kontinuierlich: } \lambda \in [a, b]$$

α bezeichnet eine mögliche Entartung.

- Weiterhin gilt:

- Die Eigenwerte sind reell, $\lambda_n, \lambda \in \mathbb{R}$
- Die Eigenzustände sind orthogonal

$$\langle \psi_{m,\alpha} | \psi_{n,\beta} \rangle = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \quad \langle \psi_{\lambda,\alpha} | \psi_{\lambda',\beta} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \delta_{\alpha\beta} \quad \langle \psi_{n,\alpha} | \psi_{\lambda,\beta} \rangle = 0$$

diskret: Kroneckerdelta

- Die Eigenzustände bilden eine vollständige Basis in \mathcal{H} , d.h. für alle $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ gibt es eine Darstellung mit Amplituden $c_{n,\alpha} = \langle \psi_{n,\alpha} | \Psi \rangle$ und $c_{\lambda,\alpha} = \langle \psi_{\lambda,\alpha} | \Psi \rangle$.

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} |\psi_{n,\alpha}\rangle + \sum_{\alpha} \int d\lambda c_{\lambda,\alpha} |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle$$

- Es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = \sum_{n,\alpha} |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + \sum_{\alpha} \int d\lambda |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

- Die Spektraldarstellung von A ist

$$A = \sum_{n,\alpha} \lambda_n |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + \sum_{\alpha} \int d\lambda \lambda |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

- Eine Funktion von A ist

$$f(A) = \sum_{n,\alpha} f(\lambda_n) |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + \sum_{\alpha} \int d\lambda f(\lambda) |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

2.3 Orts- und Impulsbasis

- Wir betrachten zwei (selbstadjungierte) Operatoren \hat{x}, \hat{p} mit

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$$

Was sind die Eigenwerte und -vektoren von \hat{x}, \hat{p} ?

- Wir definieren den **Verschiebungsoperator**

$$S(\lambda) = e^{-i\lambda\hat{p}/\hbar} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^n}{n!} \hat{p}^n \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Eigenschaften:

- $S(\lambda)$ ist **unitär**, d.h. $S(\lambda)S^\dagger(\lambda) = S^\dagger(\lambda)S(\lambda) = \mathbb{1}$

Beweis: $S^\dagger(\lambda) = S(-\lambda)$ und $S(\lambda)S(-\lambda) = S(-\lambda)S(\lambda) = \mathbb{1}$

- $[\hat{x}, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda)$

Beweis:
$$[\hat{x}, S(\lambda)] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^n}{n!} [\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar \left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!} \hat{p}^{n-1} = \lambda S(\lambda)$$

- Angenommen \hat{x} hat einen Eigenvektor $|x\rangle$ mit einem Eigenwert $x \in \mathbb{R}$

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

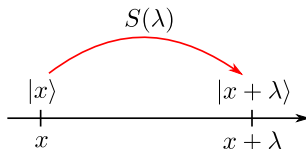
Dann ist auch $S(\lambda)|x\rangle$ ein Eigenvektor mit Eigenwert $(x + \lambda)$, d.h.

$$\hat{x}S(\lambda)|x\rangle = (x + \lambda)S(\lambda)|x\rangle$$

Beweis:

$$\hat{x}S(\lambda)|x\rangle = S(\lambda)(\hat{x} + \lambda)|x\rangle = S(\lambda)(\hat{x}|x\rangle + \lambda|x\rangle) = S(\lambda)(x + \lambda)|x\rangle = (x + \lambda)S(\lambda)|x\rangle$$

Daher der Name “Verschiebungsoperator” für $S(\lambda)$.



- Weil $\lambda \in \mathbb{R}$ können wir Vektoren mit beliebigen Eigenwerten in \mathbb{R} konstruieren:

Das **Spektrum** von \hat{x} ist kontinuierlich und umfasst ganz \mathbb{R} .

- Sei $|0\rangle$ der Eigenvektor zum Eigenwert 0

$$\hat{x} |0\rangle = 0$$

Ein allgemeiner **Eigenvektor** $|x\rangle$ **des Ortsoperators** mit Eigenwert x ist

$$|x\rangle = S(x) |0\rangle = e^{-ix\hat{p}/\hbar} |0\rangle \qquad \hat{x} |x\rangle = x |x\rangle \qquad x \in \mathbb{R}$$

Eigenschaften der Eigenzustände $|x\rangle$ des Ortsoperators

- Orthogonalität

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

- Vollständigkeit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$$

- Basis, d.h. wir können alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ darstellen durch

$$|\psi\rangle = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| \right] |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x|\psi\rangle |x\rangle$$

- Das Skalarprodukt $\langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ stellt $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in der Basis der Eigenzustände $|x\rangle$ des Ortsoperators \hat{x} dar.

Das Skalarprodukt $\langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ ist die **Wellenfunktion in Ortsdarstellung** $\psi(x)$

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

[Bemerkung: Diese Relationen stellen den Zusammenhang zwischen der Diracnotation $|\psi\rangle$ und der Ortsdarstellung $\psi(x)$ aus Kapitel 1 her.]

- Wir können analog einen **Verschiebungsoperator im Impulsraum** definieren

$$T(\lambda) = e^{i\lambda\hat{x}/\hbar}$$

Es gilt (wie vorher)

- $T(\lambda)$ ist **unitär**, d.h. $T(\lambda)T^\dagger(\lambda) = T^\dagger(\lambda)T(\lambda) = \mathbb{1}$
- $[\hat{p}, T(\lambda)] = \lambda T(\lambda)$
- Das **Spektrum des Impulsoperators** ist ganz \mathbb{R} und die Eigenzustände sind orthogonal und vollständig

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \quad p \in \mathbb{R}$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{1}$$

- Die Darstellung einer Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in der Basis der Impulseigenzustandes $|p\rangle$, d.h. die **Impulsdarstellung der Wellenfunktion** ist

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle \quad |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle p|\psi\rangle |p\rangle$$

- Was ist die Darstellung des Impulseigenzustandes $|p\rangle$ in der Ortsbasis?

$$\langle x|p\rangle =: \psi_p(x)$$

Wir betrachten

$$\langle x'|S(-x)|p\rangle = \langle x'|S^\dagger(x)|p\rangle = \langle x' + x|p\rangle = \psi_p(x + x')$$

andererseits ist

$$\langle x'|S(-x)|p\rangle = \left\langle x' \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ix/\hbar)^n}{n!} \hat{p}^n \right| p \right\rangle = e^{ixp/\hbar} \langle x'|p\rangle = e^{ixp/\hbar} \psi_p(x')$$

wobei die Eigenwertgleichung $\hat{p}^n |p\rangle = p^n |p\rangle$ verwendet wurde. Für $x' = 0$ folgt $\psi_p(x) = e^{ixp/\hbar} \psi_p(0)$. Die Normierung entnehmen wir der Orthogonalitätsrelation

$$\langle p'|p\rangle = \langle p' | \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| \right] |p\rangle = \int dx \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) = 2\pi\hbar |\psi_p(0)|^2 \delta(p - p') \stackrel{!}{=} \delta(p - p')$$

Die **Ortsdarstellung des Impulseigenzustandes** ist

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ixp/\hbar}$$

Der Impulseigenzustand $|p\rangle$ ist in Ortsdarstellung also eine ebene Welle e^{ikx} mit $k = p/\hbar$.

- Damit ist der Zusammenhang zwischen Orts- und Impulsdarstellung

$$\varphi(p) = \langle p | \psi \rangle = \langle p | \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| \right] \psi \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

Mit $\langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ixp/\hbar}$ und $\langle x | p \rangle = \psi(x)$ finden wir die bereits bekannte Relation

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ixp/\hbar} \psi(x)$$

- Bemerkung: Alle Relationen folgen aus dem kanonischen Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

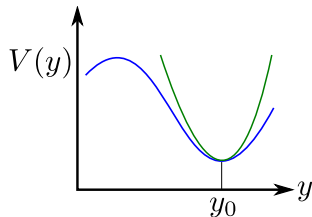
Die folgenden Abschnitte sind Nachträge zur eindimensionalen Wellenmechanik (Kapitel 1) und Anwendungen des Dirac-Formalismus (Abschnitt 2.2).

Alle Ableitungen setzen nur den kanonischen Kommutator und dessen Konsequenzen aus Abschnitt 2.3 voraus.

2.4 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

- Wichtiger Fall, weil jedes Potential an Potentialminima in niedrigster Ordnung ein harmonisches Potential ist.



$$\begin{aligned} V(y) &= V(y_0) + \left. \frac{\partial V}{\partial y} \right|_{y=y_0} (y - y_0) + \left. \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right|_{y=y_0} (y - y_0)^2 + \dots \\ &= \text{const.} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad \text{mit } x = y - y_0 \text{ und } \frac{m\omega^2}{2} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right|_{y=y_0} \end{aligned}$$

- Wir suchen nach Lösungen (Energiespektrum, Energieeigenzustände) der zeitunabhängigen Schrödinger Gleichung

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

mit dem **Hamiltonoperator für den harmonischen Oszillators**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

- Mit dem Planckschen Wirkungsquantum \hbar lässt sich eine charakteristische Längenskala und Impulsskala des harmonischen Oszillators definieren

$$\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right] = \text{m} \qquad \left[\sqrt{\hbar m\omega} \right] = \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$$

- Wir definieren den “**Absteigeoperator**”

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p} \right)$$

und den dazu adjungierten Operator (“**Aufsteigeoperator**”)

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p} \right)$$

- Die kanonische Kommutatorrelation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ impliziert die **Kommutatorrelation von Auf- und Absteigeoperator**

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{1}$$

- Der Hamiltonoperator ist

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

Damit ist das Problem darauf zurückgeführt, die Eigenzustände (EZ) und Eigenwerte (EW) des sogenannten **“Zahloperators”**

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

Eigenschaften:

- \hat{n} ist selbstadjungiert $\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}$
- D.h. die Eigenwerte von \hat{n} sind reell, $n \in \mathbb{R}$

$$\hat{n} |\psi_{n,\alpha}\rangle = n |\psi_{n,\alpha}\rangle$$

- Die EZe von \hat{n} sind auch EZe von \hat{H}

$$\hat{H} |\psi_{n,\alpha}\rangle = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) |\psi_{n,\alpha}\rangle = \hbar\omega \hat{n} |\psi_{n,\alpha}\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} |\psi_{n,\alpha}\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |\psi_{n,\alpha}\rangle$$

- Wenn $|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{n} zum Eigenwert n ist, dann ist $a|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $n - 1$

$$\hat{n}a|\psi_n\rangle = (n - 1)a|\psi_n\rangle$$

Daher die Bezeichnungen “Absteigeoperator.

Beweis:

$$\hat{n}a|\psi_n\rangle = a^\dagger aa|\psi_n\rangle = aa^\dagger a|\psi_n\rangle - a|\psi_n\rangle = (n - 1)a|\psi_n\rangle$$

Bemerkung: Der Entartungsindex α von $|\psi_{n,\alpha}\rangle$ wird hier unterdrückt. Es wird später gezeigt, dass keine Entartung vorliegt.

- Wenn $|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{n} zum Eigenwert n ist, dann ist $a^\dagger|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $n + 1$

$$\hat{n}a^\dagger|\psi_n\rangle = (n + 1)a^\dagger|\psi_n\rangle$$

Daher die Bezeichnungen “Aufsteigeoperator.

Beweis: analog

- Sei $|\psi_n\rangle$ ein normierter Eigenzustand ($\| |\psi_n\rangle \|^2 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$). Dann ist $|\psi_{n-1}\rangle = c a |\psi_n\rangle$ und die Normierungskonstante c bestimmen wir durch

$$1 \stackrel{!}{=} \| |\psi_{n-1}\rangle \|^2 = \langle \psi_{n-1} | \psi_{n-1} \rangle = c^2 \langle \psi_n | a^\dagger a | \psi_n \rangle = c^2 n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = c^2 n$$

also $c = 1/\sqrt{n}$. Daher gelten die **Auf- und Absteigerrelationen** zwischen normierten Eigenzuständen $|\psi_n\rangle$ des Zahloperators \hat{n}

$$a |\psi_n\rangle = \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle$$

$$a^\dagger |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle$$

Der Beweis für $a^\dagger |\psi_n\rangle$ ist analog.

- Die **Eigenwerte** n von \hat{n} **sind nicht negativ**,

$$n \geq 0.$$

Beweis: Die Norm von $a |\psi_n\rangle$ ist

$$0 \leq \| a |\psi_n\rangle \|^2 = (a |\psi_n\rangle, a |\psi_n\rangle) = (|\psi_n\rangle, a^\dagger a |\psi_n\rangle) = \langle \psi_n | a^\dagger a | \psi_n \rangle = n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = n \quad (3)$$

- Die **Eigenwerte** von \hat{n} sind die **natürlichen Zahlen**, $n = 0, 1, 2, \dots$, also

$$n \in \mathbb{N}.$$

Beweis: Angenommen es gäbe einen EW $n_0 \notin \mathbb{N}$ mit EZ $|\psi_{n_0}\rangle$. Dann wäre $a^l |\psi_{n_0}\rangle$ mit $l \in \mathbb{N}$ ein Eigenzustand zum EW $(n_0 - l)$, der für $l > n_0$ negativ ist, im Widerspruch zu Gleichung (3). Also gilt $n \in \mathbb{N}$ für alle n .

- Für den **Grundzustand** $|\psi_0\rangle$, den Eigenzustand zum Eigenwert 0, d.h. $\hat{n} |\psi_0\rangle = 0$, gilt

$$a |\psi_0\rangle = 0$$

Beweis: Die Norm von $a |\psi_0\rangle$ ist

$$\|a |\psi_0\rangle\|^2 = \langle \psi_0 | a^\dagger a | \psi_0 \rangle = 0 \quad \longleftrightarrow \quad a |\psi_0\rangle = 0$$

- Der Grundzustand ist nicht entartet. Beweis: $a|\psi_0\rangle = 0$ ist in Ortsdarstellung

$$0 = \langle x|a|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}|\psi_0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|\hat{x}|\psi_0\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \langle x|\hat{p}|\psi_0\rangle$$

Es gilt

$$\langle x|\hat{x}|\psi_0\rangle = x \langle x|\psi_0\rangle = x\psi_0(x)$$

$$\langle x|\hat{p}|\psi_0\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi_0\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_0(x)$$

Also gilt für den Grundzustand in Ortsdarstellung $\psi_0(x)$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x) = 0.$$

Dies ist eine Differentialgleichung erster Ordnung mit der **eindeutigen** Lösung

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right] \quad |\psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0(x) |x\rangle$$

Die Integrationskonstante ergibt sich aus der Normierung $\| |\psi_0\rangle \| = 1$. Der Zustand ist eindeutig und damit ist der Eigenwert 0 nicht entartet.

- Die angeregten Zustände gewinnen wir durch wiederholtes Anwenden des Aufsteigeoperators. Die **Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators** (auch **Zahlzustände** oder **Fock-zustände**) sind

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^\dagger\right)^n |\psi_0\rangle$$

- Die angeregten Zustände sind nicht entartet.

Beweis (per Induktion): Angenommen $|\psi_n\rangle$ ist nicht entartet und $|\psi_{n+1,\alpha}\rangle$ ist möglicherweise entartet, d.h. es gibt mehrere orthogonale Eigenzustände zum Eigenwert $(n+1)$, also

$$\langle\psi_{n+1,\alpha}|\psi_{n+1,\beta}\rangle = \delta_{\alpha,\beta}.$$

Dann sind auch die Zustände $a|\psi_{n+1,\alpha}\rangle$ orthogonal,

$$(a|\psi_{n+1,\alpha}\rangle, a|\psi_{n+1,\beta}\rangle) = \langle\psi_{n+1,\alpha}|a^\dagger a|\psi_{n+1,\beta}\rangle = (n+1)\langle\psi_{n+1,\alpha}|\psi_{n+1,\beta}\rangle = (n+1)\delta_{\alpha,\beta}.$$

und zugleich EZe zum EW $(n+1-1) = n$. Also wäre $|\psi_n\rangle$ entartet, im Widerspruch zur Annahme.

- Die angeregten Zustände sind in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}
 \psi_n(x) &= \langle x | \psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \langle x | \psi_0 \rangle \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}
 \end{aligned}$$

mit der dimensionslosen Ortsvariable $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$.

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned}
 (\xi - \partial_\xi) f(\xi) &= (-e^{\xi^2/2} \partial_\xi e^{-\xi^2/2}) f(\xi) \\
 (\xi - \partial_\xi)^n f(\xi) &= (-e^{\xi^2/2} \partial_\xi e^{-\xi^2/2})^n f(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2/2} \partial_\xi^n e^{-\xi^2/2} f(\xi) \\
 (\xi - \partial_\xi)^n e^{-\xi^2/2} &= (-1)^n e^{\xi^2/2} \partial_\xi^n e^{-\xi^2/2} = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)
 \end{aligned}$$

Die **Hermite-Polynome** sind definiert durch

$$H_n(\xi) := (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

- Formelsammlung zu **Hermite-Polynomen**:

$$H_n(x) := (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}$$

Die niedrigsten Ordnungen lauten:

$$H_0(x) = 1$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

Allgemein ist $H_n(x)$ ein Polynom n -ten Grades und damit (un)gerade für (un)gerade n .

Die Hermite-Polynome erfüllen die Hermitesche Differentialgleichung

$$H_n''(x) - 2x H_n'(x) + 2n H_n(x) = 0$$

Sie erfüllen die Rekursionsformel

$$H_n(x) = 2x H_{n-1}(x) - 2(n-1) H_{n-2}(x)$$

und die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

Die Ortsdarstellung der Eigenzustände des harmonischen Oszillators ist

$$\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad |\psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n(x) |x\rangle$$

mit der dimensionslosen Ortskoordinate $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$.

- **Zusammenfassung:** Die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

mit dem Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 = \hbar\omega (a^\dagger a + \frac{1}{2}) = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

besitzt die (nicht-entarteten) Eigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

und Eigenzustände $|\psi_n\rangle$. Die Eigenzustände sind orthogonal

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

und bilden eine vollständige Basis

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbb{1}.$$

Alles ist eine Folge der kanonischen Kommutatorrelation.

Diskussion

- Der **Grundzustand** eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators ist ein Gaußsches Wellenpaket

$$\psi_0(x) = \langle x | \psi_0 \rangle = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right]$$

mit $\langle x \rangle = 0$ und der sogenannten “**Nullpunktsfluktuation**” der Position

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

Für den Impuls findet man entsprechend $\langle p \rangle = 0$ und die Nullpunktsfluktuation des Impulses

$$\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$$

Die Energie des Grundzustandes (“**Nullpunktsenergie**”) ist

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Zum Vergleich: Der Grundzustand eines klassischen harmonischen Oszillators ist ($x = 0, p = 0$) mit $E = 0$.

- Die Nullpunktsenergie kann als Folge der Heisenbergschen Unschärferelation interpretiert werden:

- Für ein Gaussssches Wellenpaket gilt $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ und daher $\Delta p = \frac{\hbar}{2x_0}$ mit $x_0 := \Delta x$
- Für den Grundzustand gilt $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ und daher $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle = x_0^2$ und $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4x_0^2}$
- Die mittlere kinetische Energie im Grundzustand ist

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2}{8mx_0^2}$$

- Die mittlere potentielle Energie ist

$$\langle V(\hat{x}) \rangle = \frac{m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle}{2} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2}$$

- Damit gilt für die mittlere Gesamtenergie

$$\langle H \rangle = \langle E_{\text{kin}} \rangle + \langle V(\hat{x}) \rangle = \frac{\hbar^2}{8mx_0^2} + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \geq 2\sqrt{\frac{\hbar^2}{8m} \frac{m\omega^2}{2}} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

wobei Gleichheit gilt für

$$x_0^2 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{8m} \frac{2}{m\omega^2}} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Der Grundzustand stellt also einen Kompromiss dar zwischen Minimierung der potentiellen Energie (Lokalisierung im Ort) und Minimierung der kinetischen Energie (Lokalisierung im Impuls).

- Die **angeregten Zustände** sind keine Gaußschen Zustände ($\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$)

$$\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

Eigenschaften der Zustände $|\psi_n\rangle$:

- Mittlerwerte von Ort und Impuls verschwinden,

$$\langle \hat{x} \rangle = 0$$

$$\langle \hat{p} \rangle = 0$$

Beweis: Orts- und Impulsoperator können durch Auf- und Absteigeoperatoren ausgedrückt werden

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{p} = \sqrt{m\omega\hbar} \left(-\frac{i}{\sqrt{2}} \right) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Damit gilt im Zustand $|\psi_n\rangle$:

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi_n | \hat{x} | \psi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \psi_n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | \psi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} \langle \psi_n | \psi_{n-1} \rangle + \sqrt{n+1} \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle \right) = 0$$

Analog für \hat{p} .

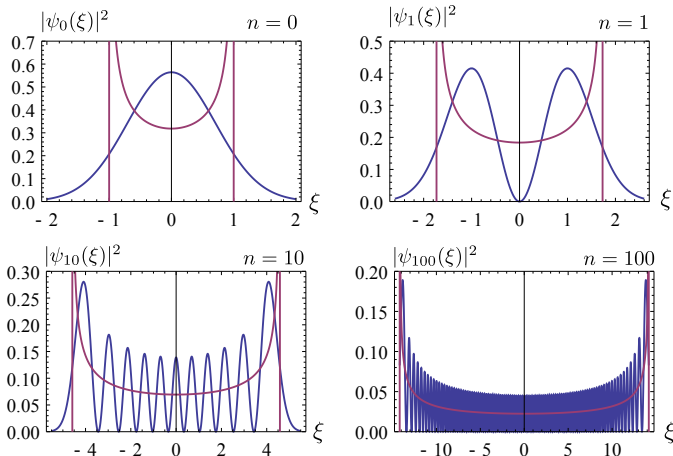
- Die Varianzen sind

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta p^2 = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Die **Wahrscheinlichkeitsdichte** im Ort $\rho(x) = |\psi_n(x)|^2$ (blau):



Nähert sich für grosse n der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines klassischen Oszillators (zeitgemittelt über eine Periode, rot)

$$\rho_{\text{klass}}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_n^2 - x^2}} \quad (-x_n \leq x \leq x_n)$$

mit der klassischen maximalen Amplitude $x_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}}$ für eine Energie $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
Für energetisch tief liegende Zustände (kleine n) ist das Verhalten sehr unterschiedlich.

- Eine wichtige Klasse quantenmechanischer Zustände des harmonischen Oszillators bilden die **kohärenten Zustände**

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

Eigenschaften kohärenter Zustände:

- Sind Eigenzustände des Vernichtungsoperators

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

- Ihre Ortsdarstellung ist eine Gaußsche Wellenfunktion

$$\psi_{\alpha}(x) := \langle x|\alpha\rangle = \frac{e^{i\alpha_1\alpha_2/2}}{\pi^{1/4}} e^{i\alpha_2x - (x-\alpha_1)^2}$$

mit $\alpha_1 = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha)$, $\alpha_2 = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\alpha)$, das heißt $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 + i\alpha_2)$.

Daher ist auch die Impulswellenfunktion $\varphi_{\alpha}(p) = \langle p|\alpha\rangle$ eine Gaußsche Wellenfunktion.

- Die Mittelwerte des Ortes und Impulses im Zustand $|\alpha\rangle$ sind ($\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 + i\alpha_2)$)

$$\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \alpha_1 =: x_0 \quad \langle \hat{p} \rangle = \sqrt{\hbar m\omega} \alpha_2 =: p_0$$

- Die Varianzen sind

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \Delta p^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} \quad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Kohärente Zustände sind Zustände minimaler Unschärfe.

- Die Lösung der Schrödingerleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

zur Anfangsbedingung $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ ist der kohärente Zustand

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

- Die Mittelwerte folgen daher den klassischen Trajektorien

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha e^{-i\omega t}) \\ &= \cos(\omega t) x_0 + \sin(\omega t) \frac{p_0}{m\omega} \end{aligned}$$

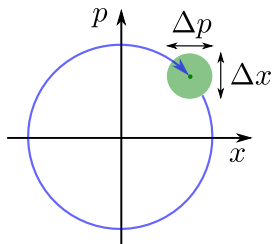
$$\langle \hat{p}(t) \rangle = \cos(\omega t) p_0 - \sin(\omega t) m\omega x_0$$

- Die Varianzen sind zeitunabhängig,

$$\Delta x^2(t) \equiv \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\Delta p^2(t) \equiv \frac{m\hbar\omega}{2}$$

Kohärente Zustände evolvieren **dispersionsfrei!**



- Die kohärenten Zustände sind **vollständig**

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} d^2\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathbb{1}$$

aber $\langle\alpha|\beta\rangle \neq 0$ d.h. sie bilden keine orthonormale, sondern eine übervollständige Basis.

2.5 Periodische Potentiale

- Ein **periodisches Potential** $V(x)$ in einer Dimension mit Periodizität a erfüllt

$$V(x + a) = V(x)$$

Dies impliziert, dass das Potential $V(\hat{x})$ mit dem Verschiebungsoperator im Ort um eine Distanz a , d.h. $S(a) = e^{-ia\hat{p}/\hbar}$, kommutiert,

$$[S(a), V(\hat{x})] = 0.$$

Beweis:

- Die Ortsdarstellung des Potentials ist

$$V(\hat{x}) = \int dx V(x) |x\rangle \langle x|$$

- Wegen $S(a) |x\rangle = |x + a\rangle$ gilt auch $\langle x| S^\dagger(a) = \langle x + a|$ und damit

$$\begin{aligned} S(a) V(\hat{x}) S^\dagger(a) &= \int dx V(x) S(a) |x\rangle \langle x| S^\dagger(a) = \int_{\mathbb{R}} dx V(x) |x + a\rangle \langle x + a| \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx V(x - a) |x\rangle \langle x| = \int_{\mathbb{R}} dx V(x) |x\rangle \langle x| = V(\hat{x}) \end{aligned}$$

- Damit ist $[S, V] = SV - VS = SV - (SV S^\dagger) S = SV - SV = 0$ wegen $S^\dagger S = 1$

- Der Operator für die kinetische Energie kommutiert mit dem Verschiebungsoperator

$$\left[S(a), \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] = 0$$

Beide hängen nur vom Impulsoperator ab und sind daher beide in der Impulsbasis diagonal.

- Also kommutiert der Hamiltonoperator mit dem Verschiebungsoperator $S(a)$

$$[S(a), H] = \left[S(a), \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] = 0$$

Der Hamiltonoperator und der Verschiebungsoperator besitzen einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

$$S(a) |\psi\rangle = \lambda(a) |\psi\rangle$$

- Die Eigenwerte des Verschiebungsoperators sind

$$\lambda(a) = e^{ika}$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

Beweis:

- $1 = \langle \psi | S^\dagger(a) S(a) | \psi \rangle = |\lambda(a)|^2 \langle \psi | \psi \rangle = |\lambda(a)|^2$ und daher $\lambda(a) = e^{i\beta(a)}$
- $S(a) S(a) | \psi \rangle = \lambda(a)^2 | \psi \rangle$ und andererseits $S(a) S(a) | \psi \rangle = S(2a) | \psi \rangle = \lambda(2a) | \psi \rangle$ also $\lambda(a)^2 = \lambda(2a)$ und daher $2\beta(a) = \beta(2a)$. Also ist $\beta(a)$ eine lineare Funktion in a , $\beta(a) = ka$.
- $\beta(a)$ und $\beta(a) + 2\pi$ ergeben den gleichen Eigenwert $\lambda(a)$, also kann $|ka| \leq \pi$ angenommen werden.

- Ein **Hamiltonoperator mit einem periodischen Potential** mit Periodizität a und der **Verschiebungsoperator** $S(a)$ besitzen daher einen **gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen**

$$H |\psi_k\rangle = E |\psi_k\rangle$$

$$S(a) |\psi_k\rangle = e^{ika} |\psi_k\rangle$$

Wir benützen den Index k , um die Wellenfunktionen zu bezeichnen.

- Die Eigenwertgleichung des Verschiebungsoperators in Ortsdarstellung

$$\langle x | S(a) | \psi_k \rangle = \langle x - a | \psi_k \rangle = e^{ika} \langle x | \psi_k \rangle$$

impliziert für die Eigenfunktionen $\psi_k(x) = \langle x | \psi_k \rangle$ das **Blochsches Theorem**

$$\psi_k(x - a) = e^{ika} \psi_k(x)$$

Äquivalent dazu ist

$$\psi_k(x) = e^{-ikx} u_k(x)$$

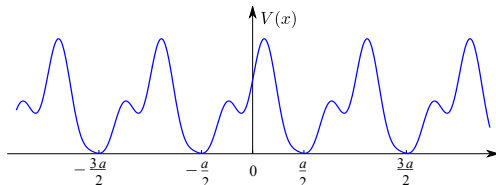
mit einer periodischen Funktion $u_k(x - a) = u_k(x)$ und einer Wellenzahlen $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

Die Energieeigenzustände eines Hamiltonoperators mit einem Potential mit einer Periodizität a sind also **ebene Wellen mit einer Einhüllenden mit Periode a** .

- Wir suchen nach Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi_k(x) = E \psi_k(x)$$

mit einem periodischen Potential $V(x - a) = V(x)$

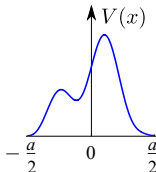


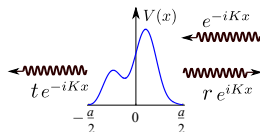
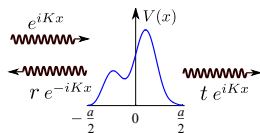
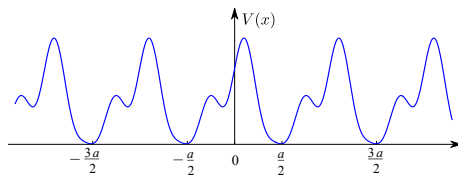
- Die Eigenzustände müssen aufgrund des Blochschen Theorems die Bedingung

$$\psi_k(x - a) = e^{ik a} \psi_k(x). \quad (4)$$

erfüllen.

Es reicht daher, Eigenzustände $\psi_k(x)$ des Hamiltonoperators beschränkt auf eine Periode des Potentials $[x, x + a]$ zu finden.





Es gibt zwei unabhängige Lösungen für von links/rechts einlaufende Wellen

$$\psi^{(l)}(x) = \begin{cases} e^{iKx} + r e^{-iKx} & x = -\frac{a}{2} \\ t e^{iKx} & x = \frac{a}{2} \end{cases} \quad \psi^{(r)}(x) = \begin{cases} t e^{-iKx} & x = -\frac{a}{2} \\ e^{-iKx} + r e^{iKx} & x = \frac{a}{2} \end{cases}$$

mit Reflexionsamplitude $r(K)$ und Transmissionsamplitude $t(K)$ zu Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$.

Die exakte Abhängigkeit der Amplituden $r(K)$ und $t(K)$ von der Energie E hängt von der Form des Potentials ab. Wir lassen dies vorerst offen.

- Eine allgemeine Lösung $\psi_k(x)$ im Bereich $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$ ist eine Linearkombination der beiden Lösungen

$$\psi_k(x) = A\psi^{(l)}(x) + B\psi^{(r)}(x) = \begin{cases} Ae^{iKx} + (Ar + Bt)e^{-iKx} & x = -\frac{a}{2} \\ Be^{-iKx} + (At + Br)e^{iKx} & x = \frac{a}{2} \end{cases}$$

- Das Blochsche Theorem erfordert $\psi_k(x - a) = e^{ika}\psi_k(x)$, d.h. bei $x = \frac{a}{2}$

$$\psi_k(-\frac{a}{2}) = e^{ika}\psi_k(\frac{a}{2})$$

bzw. für die Ableitung der Wellenfunktion $\psi'_k(x - a) = e^{ika}\psi'_k(x)$ bei $x = \frac{a}{2}$

$$\psi'_k(-\frac{a}{2}) = e^{ika}\psi'_k(\frac{a}{2})$$

Diese beiden Bedingungen stellen ein lineares Gleichungssystem für die Amplituden A und B dar.

- Das Gleichungssystem besitzt eine nicht-triviale Lösung ($A, B \neq 0$) nur dann, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix des Gleichungssystem verschwindet. Dies impliziert für die **Wellenzahl** k und die **Energie** $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ des Zustandes $\psi_k(x)$ die Bedingung

$$\cos ka = \frac{t^2 - r^2}{2t}e^{iKa} + \frac{1}{2t}e^{-iKa}$$

[Details der Rechnung siehe später.]

- Für die Reflexions- und Transmissionsamplituden gilt allgemein

$$|r|^2 + |t|^2 = 1$$

$$t = |t|e^{i\delta}$$

$$r = \pm i|r|e^{i\delta}$$

[Beweis siehe später.]

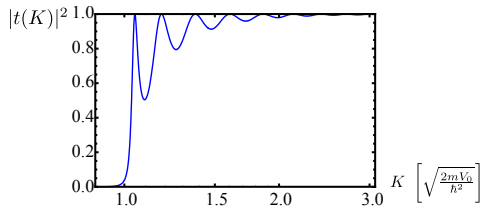
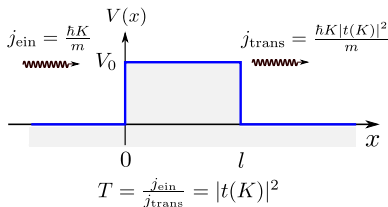
- Damit vereinfacht sich die Bedingung an Wellenzahl k und Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ zu

$$\cos(ka) = \frac{\cos(Ka + \delta)}{|t|}$$

Es gilt $t = t(K)$ und $\delta = \delta(K)$, wobei die genau Abhängigkeit von K aus der Form des Potentials folgt.

Allgemein gilt:

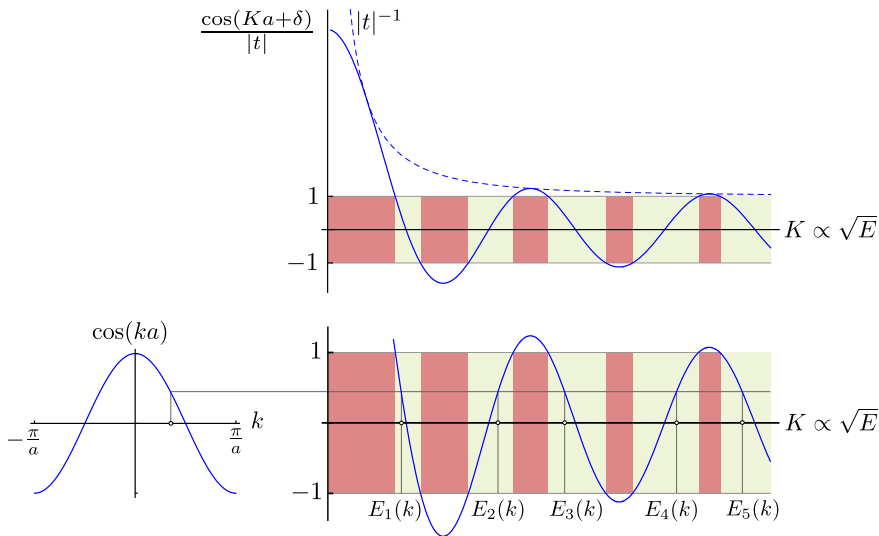
- $|t(K)| \leq 1$
- $t(K) \rightarrow 1$ für grosse K . Die Potentialbarriere wird für grosse Energien immer weniger effektiv.
Z.B. für eine Potentialschwelle der Höhe V_0 :



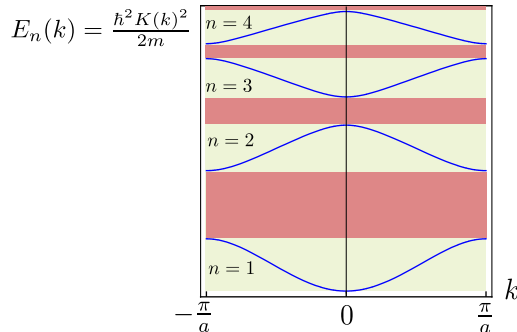
- Aufgrund von $|t(K)| \leq 1$ besitzt die Gleichung

$$\cos(ka) = \frac{\cos(Ka + \delta)}{|t(K)|}$$

nicht für alle Werte der Wellenzahlen k eine Lösung für die Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$.



- Es ergeben sich **Bänder erlaubter und verbotener Energien**



Diskussion:

- Die Zentren verbotener Energiebänder liegen bei Wellenzahlen $Ka + \delta(K) = n\pi$. Für $\delta(K) \equiv \text{const.}$ bzw. für eine schwache Energieabhängigkeit bedeutet dies $K = \frac{n\pi}{a}$.
- Für diese Wellenzahlen entsteht positive Interferenz zw. vorwärts und rückwärts gestreuten Wellen (Bragg-Streuung). Es treten stehende Wellen mit Perioden $\sim \frac{2a}{n}$ auf.
- Je nach Phase der stehenden Welle fallen die Maxima der zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten mit den Maxima/Minima des Potentials zusammen. Dies führt zu einem Sprung in der Energie.

- **Details der Rechnung:**

- Beweis von

$$\cos ka = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{iKa} + \frac{1}{2t} e^{-iKa} \quad (5)$$

Die Bedingungen

$$\psi_k(-\frac{a}{2}) = e^{ika} \psi_k(\frac{a}{2}) \quad \psi'_k(-\frac{a}{2}) = e^{ika} \psi'_k(\frac{a}{2})$$

sind äquivalent zu

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-\frac{iaK}{2}} + e^{\frac{iaK}{2}} (r - e^{iak}t) & -e^{i(aK - \frac{aK}{2})} + e^{\frac{iaK}{2}} (t - e^{iak}r) \\ e^{-\frac{iaK}{2}} - e^{\frac{iaK}{2}} (r + e^{iak}t) & e^{i(aK - \frac{aK}{2})} - e^{\frac{iaK}{2}} (t + e^{iak}r) \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

Die Bedingung für eine nichttriviale Lösung ist $\det(M) = 0$, was äquivalent zu (5) ist.

- Beweis der Eigenschaften von Reflexions- und Transmissionskoeffizienten:

Es seien $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ zwei (nicht notwendigerweise orthogonale) Lösungen der Schrödingergleichung in $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \phi_i(x) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \phi_i(x) \quad i = 1, 2$$

Dann ist die Wronski-determinante

$$w(\phi_1(x), \phi_2(x)) = \det \begin{bmatrix} \phi_1' & \phi_2' \\ \phi_1 & \phi_2 \end{bmatrix} = \phi_1'(x)\phi_2(x) - \phi_1(x)\phi_2'(x)$$

unabhängig von x , da

$$\frac{\partial w}{\partial x} = \phi_1''\phi_2 - \phi_1\phi_2'' = \left[\left(\frac{2mV(x)}{\hbar^2} - K^2 \right) \phi_1 \right] \phi_2 - \phi_1 \left[\left(\frac{2mV(x)}{\hbar^2} - K^2 \right) \phi_2 \right] = 0.$$

Weil das Potential $V(x)$ reell ist sind sowohl $\psi^{(l)}(x)$ und $\psi^{(r)}(x)$ Lösungen der Schrödingergleichung, also auch die komplex konjugierten Wellenfunktionen $\psi^{(l)*}(x)$ und $\psi^{(r)*}(x)$. Es gilt

$$\begin{aligned} w\left(\psi^{(l)}(x), \psi^{(l)*}(x)\right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} &= w\left(\psi^{(l)}(x), \psi^{(l)*}(x)\right) \Big|_{x=\frac{a}{2}} \quad \longrightarrow \quad |r|^2 + |t|^2 = 1 \\ w\left(\psi^{(l)}(x), \psi^{(r)*}(x)\right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} &= w\left(\psi^{(l)}(x), \psi^{(r)*}(x)\right) \Big|_{x=\frac{a}{2}} \quad \longrightarrow \quad \operatorname{Re}(rt^*) = 0 \end{aligned}$$

Mit $t = |t|e^{i\delta}$ folgt aus der letzten Bedingung, dass $r = \pm i|r|e^{i\delta}$.