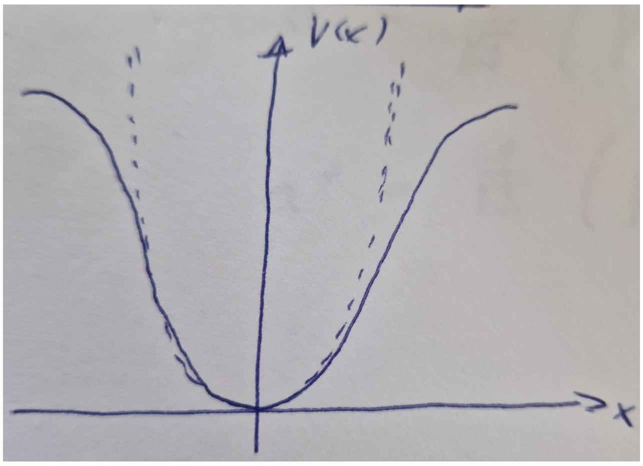
IV Eindimensionaler, harmonischer Oszillator

1 Harmonische Näherung eines Potentials

Im folgenden Kapitel beschäftigen wir und ausführlich mit der quantenmechanischen Version des harmonischen Oszillators, der bei der Beschreibung sehr vieler quantenmechanischer Systeme eine tragende Rolle spielt.

Viele Problemstellungen der Physik lassen sich (zumindest in einem kleinen Bereich) näherungsweise sehr gut durch ein harmonisches Potenzial beschreiben.

$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \ldots$



- **Hamiltonoperator**
  Klassisch ist die Hamiltonfunktion eines harmonischen Oszillators gegeben durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2. \tag{IV.1}$$

  Analog hierzu schreibt sich die quantenmechanische Version der Hamiltonfunktion (*Hamiltonoperator*)

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

  mit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Unser Ziel sind nun zunächst die Eigenwerte und Eigenfunktionen der stationären Schrödingergleichung

$$\hat{H} \left|\varphi_n\right\rangle = \mathrm{E}_n \left|\varphi_n\right\rangle \tag{IV.3}$$

  zu finden.

- **Lösungsverfahren**

(i) Lösen der DGL in Ortsdarstellung: $\hat{p}^2 \to -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

(ii) Algebraisch

2 Leiteroperatoren

Die Leiteroperationen werde unter anderem auch Auf- und Absteigeoperator (bzw. im englischen *creation and annihilation operator*) genannt.

(i) Der Absteigeoperator ist definiert als

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{p}\Big), \tag{IV.4}$$

der Aufsteigeoperator schreibt sich

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{p}\Big)\,. \tag{IV.5}$$

Da $\hat{x}$ und $\hat{p}$ hermitesch sind, gilt dies auch für a und $a^\dagger$; beide sind „dimensionslos.

- **Umkehrung:**

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \tag{IV.6}$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a) \tag{IV.7}$$

- **Eigenschaften:**

$$[a, a^\dagger] = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] = 1 \tag{IV.8}$$

$$[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0 \tag{IV.9}$$

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1},\ n \in \mathbb{N} \tag{IV.10}$$

- **Hamiltonoperator:**
  Setzen wir diese Definitionen ein, erhalten wir für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hbar\omega\ (a^\dagger a + \frac{1}{2}), \tag{IV.11}$$

da

$$\hbar\omega\,(a^\dagger a + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar\omega}{2}\Big(\frac{m\omega}{2}\hat{x}^2 - \frac{i}{\hbar}\hat{p}\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{x}\hat{p} + \frac{1}{\hbar^2}\frac{\hbar}{m\omega}\hat{p}^2 + 1\Big) \tag{IV.12}$$

- **Anzahloperator:**
Der Anzahloperator ist definiert als

$$N = a^\dagger a \tag{IV.13}$$

mit den Eigenschaften

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{IV.14}$$
$$[N, a] = -a, \tag{IV.15}$$

da z.B.

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = [a, a^\dagger]\ a^\dagger = a^\dagger\,. \tag{IV.16}$$

Für das Eigenwertproblem gilt somit:

$$\text{falls } N\,|\varphi_\lambda\rangle = \lambda\,|\varphi_\lambda\rangle \tag{IV.17}$$
$$\Longrightarrow\ \hat{H}\,|\varphi_\lambda\rangle = \hbar\omega(\lambda + \frac{1}{2})\ |\varphi_\lambda\rangle \tag{IV.18}$$

(ii) Algebraische Lösung des Eigenwertproblems

1.) Die Eigenwerte λ sind nicht negativ, d.h. $\lambda \geq 0$
Beweis:

$$0 \leq \langle a\varphi_\lambda | a\varphi_\lambda\rangle = \langle\varphi_\lambda|a^\dagger a|\varphi_\lambda\rangle = \lambda \tag{IV.19}$$

2.) Sei $|\varphi_\lambda\rangle$ ein Eigenvektor von N mit $\langle\varphi_\lambda|\varphi_\lambda\rangle = 1$ (normiert), dann folgt

$$\alpha)\text{ falls } \lambda = 0 \to a\,|\varphi_\lambda\rangle = 0 \tag{IV.20}$$
$$\beta)\text{ falls } \lambda > 0 \to N(a\,|\varphi_\lambda\rangle) = (\lambda-1)(a\,|\varphi_\lambda\rangle)\,, \tag{IV.21}$$

d.h. $a\,|\varphi_\lambda\rangle$ ist ein Eigenvektor von N mit Eigenwert $\lambda - 1$.
Beweis:

$$\alpha)\quad 0 = \langle a\varphi_{\lambda=0}|a\varphi_{\lambda=0}\rangle \Rightarrow a\,|\varphi_{\lambda=0}\rangle = 0 \tag{IV.22}$$
$$\beta)\quad N(a\,|\varphi_\lambda\rangle) = a^\dagger a(a\,|\varphi_\lambda\rangle) \tag{IV.23}$$
$$= ([N,a] + aN)\,|\varphi_\lambda\rangle \tag{IV.24}$$
$$= (\lambda-1)(a\,|\varphi_\lambda\rangle), \quad [\lambda \neq 0 \Rightarrow \langle a\varphi_\lambda|a\varphi_\lambda\rangle \neq 0] \tag{IV.25}$$

Das heißt für den normierten Zustand $|\varphi_{\lambda-1}\rangle = 1/\sqrt{\lambda-1}\,(a|\varphi_\lambda\rangle)$.

3.) Sei $|\varphi_\lambda\rangle$ ein Eigenvektor zu N mit $\langle\varphi_\lambda|\varphi_\lambda\rangle = 1$, dann gilt

$$\alpha)\quad a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle \neq 0 \text{ für alle } \lambda \geq 0 \tag{IV.26}$$

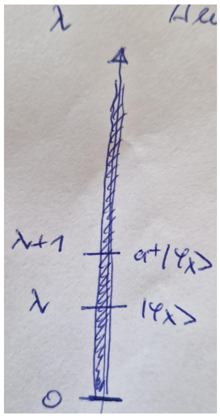
$$\beta)\quad N(a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle) = (\lambda+1)(a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle), \tag{IV.27}$$

d.h. $a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle$ ist ein Eigenvektor mit Eigenwert $\lambda+1$. Das heißt für den normierten Zustand $|\varphi_{\lambda+1}\rangle = 1/\sqrt{\lambda+1}\,(a^\dagger|\varphi_\lambda\rangle)$.

Beweis:

$$\alpha)\quad \left\langle a^\dagger\varphi_\lambda \middle| a^\dagger\varphi_\lambda\right\rangle = \lambda+1 \geq 1$$

$$\begin{aligned}\beta)\quad N(a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle &= \underbrace{([N,a^\dagger] + a^\dagger N)}_{(aa^\dagger = N+1)}\,|\varphi_\lambda\rangle \\ &= (\lambda+1)(a^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle)\end{aligned}$$



(iii) Spektrum von N

- Eigenwerte: $\lambda \equiv n = 0, 1, 2, \ldots$
  Beweis: Falls $\lambda \notin \mathbb{N}$, dann besteht ein Widerspruch zu 1.), d.h.

$$a\,|\varphi_0\rangle = 0 \tag{IV.28}$$

$$N\,|\varphi_n\rangle = n\,|\varphi_n\rangle\,, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots) \tag{IV.29}$$

$$\mathrm{E}_n = \hbar\omega\,(n + \frac{1}{2}) \tag{IV.30}$$

2.1 Eigenzustände

(i) Konstruktion des Grundzustands
Es gilt $a\,|\varphi_0\rangle = 0$

$$\Rightarrow \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{p}\right)\,|\varphi_0\rangle = 0 \tag{IV.31}$$

In der Ortsdarstellung

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\varphi_0(x) = 0 \tag{IV.32}$$

$$\Rightarrow \varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{IV.33}$$

Die Breite des Grundzustands ist also

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{IV.34}$$

Varianz:

$$\int \mathrm{d}x\, x^2 \varphi_0(x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \equiv \langle x^2 \rangle \,. \tag{IV.35}$$

(ii) Angeregte Zustände

- Durch Rekursion (siehe oben (ii), 3.)

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^\dagger)^n\,|\varphi_0\rangle \tag{IV.36}$$

- Daraus folgen die wichtigen Beziehungen:

$$a\,|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle \tag{IV.37}$$

$$(\text{kurz auch: } a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle) \tag{IV.38}$$

$$a^\dagger\,|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle \;, \tag{IV.39}$$

da

$$a\,|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}[a,(a^\dagger)^n]\,|\varphi_0\rangle \tag{IV.40}$$

$$= \frac{n}{\sqrt{n!}}\,(a^\dagger)^{n-1}\,|\varphi_0\rangle \tag{IV.41}$$

$$= \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle \;. \tag{IV.42}$$

- Normierung:

$$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \frac{1}{n}\left\langle a^\dagger\varphi_{n-1}\middle|a^\dagger\varphi_{n-1}\right\rangle \tag{IV.43}$$
$$= \frac{1}{n}\left\langle\varphi_{n-1}\middle|aa^\dagger\varphi_{n-1}\right\rangle \tag{IV.44}$$
$$= \frac{1}{n}\langle\varphi_{n-1}|n\varphi_{n-1}\rangle \tag{IV.45}$$
$$= \langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = \cdots = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1 \tag{IV.46}$$

- Explizit in Ortsdarstellung

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\varphi_0(x) \tag{IV.47}$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\right)^n e^{-\frac{1}{2}q^2} \tag{IV.48}$$

mit $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$.
Ein vollständiger Satz orthonormierter Funktionen im Hilbertraum ist gegeben durch die sog. Hermiteschen Polynome:

$$H_n(q) = (-1)^n\, e^{q^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}q^n}e^{-q^2} \tag{IV.49}$$
$$H_0 = 1,\ H_1(q) = 2q,\ H_2(q) = 4q^2 - 2 \text{ usw.} \tag{IV.50}$$
$$\to \varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-\frac{1}{2}q^2}\, H_n(q) \tag{IV.51}$$

wegen

$$\left(q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\right)^n e^{-\frac{1}{2}q^2} = (-1)^n\, e^{\frac{1}{2}q^2}\,\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}q^n}\, e^{-q^2} \tag{IV.52}$$
$$= e^{-\frac{1}{2}q^2}H_n(q). \tag{IV.53}$$

(iii) Diskussion der Eigenzustände

- Matrixelemente:

$$\left\langle\varphi_m\middle|a^\dagger\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} \tag{IV.54}$$
$$\langle\varphi_m|a\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} \tag{IV.55}$$

Daraus resultiert die folgende Matrixdarstellung in der Basis der Eigenvektoren:

$$a^\dagger \to \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{IV.56}$$

$$a \to \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{IV.57}$$

Der Ortsoperator bzw. der Impulsoperator lassen sich durch $a, a^\dagger$ so schreiben als

$$\langle\varphi_m|\hat{x}|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right), \tag{IV.58}$$

$$\langle\varphi_m|\hat{p}|\varphi_n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right). \tag{IV.59}$$

- Mittelwerte und Varianzen: Die Mittelwerte des Orts- und Impulsoperators sind

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle\varphi_n|\hat{x}|\varphi_n\rangle = 0 \tag{IV.60}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle\varphi_n|\hat{p}|\varphi_n\rangle = 0. \tag{IV.61}$$

Die Varianzen der beiden genannten Größen lassen sich ausdrücken durch

$$\Delta x^2 = \langle\varphi_n|\hat{x}^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\hat{x}|\varphi_n\rangle^2 = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega} \tag{IV.62}$$

$$\Delta p^2 = \langle\varphi_n|\hat{p}^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\hat{p}|\varphi_n\rangle^2 = \left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega \tag{IV.63}$$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \geq \frac{\hbar}{2} \tag{IV.64}$$

Der Grundzustand entspricht hierbei dem Zustand minimaler Unschärfe.

3 Mathematische Grundlagen IV: Transformationstheorie

(i) Ein Darstellungswechsel entspricht einem Basiswechsel in $\mathscr{H}$, der normerhaltend ist. Es handelt sich also um eine unitäre Transformation.

Seien $\{|i\rangle\}$ und $\{|n\rangle\}$ Basen mit

$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j} \text{ bzw. } \langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \tag{IV.65}$$

und

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \text{ bzw. } |\Psi\rangle = \sum_n d_n |n\rangle \tag{IV.66}$$

Dann folgt mit der Definition $T_{n,i} = \langle n|i\rangle$ und $S_{i,n} = \langle i|n\rangle$

$$d_n = \langle n|\Psi\rangle \tag{IV.67}$$

$$= \langle n|\mathbb{1}|\Psi\rangle \tag{IV.68}$$

$$= \sum_i \underbrace{\langle n|i\rangle}_{=T_{n,i}} \underbrace{\langle i|\Psi\rangle}_{c_i}, \tag{IV.69}$$

wegen $\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle \langle i|$. Es gilt außerdem $S^*_{i,n} = \langle i|n\rangle^* = \langle n|i\rangle = T_{n,i}$, d.h.

$$c_i = \langle i|\Psi\rangle = \sum_n \langle i|n\rangle \langle n|\Psi\rangle \tag{IV.70}$$

$$= \sum_{n,j} \underbrace{\langle i|n\rangle \langle n|j\rangle}_{\overset{!}{=}\delta_{i,j}} \langle j|\Psi\rangle \tag{IV.71}$$

$$\to \sum_n \langle i|n\rangle \langle n|j\rangle = \delta_{i,j} \tag{IV.72}$$

$$= \sum_n S_{i,n} \underbrace{T_{n,j}}_{=(S_{j,n})^*} = \delta_{i,j} \tag{IV.73}$$

$$\to S^*_{j,n} = (S^\dagger)_{n,j} \to SS^\dagger = \mathbb{1} \text{ unitär} \tag{IV.74}$$

Für die Matrixdarstellung gilt somit

$$\langle n|\hat{A}|m\rangle = \sum_{i,j} \langle n|i\rangle \ \langle i|\hat{A}|j\rangle \ \langle j|m\rangle \tag{IV.75}$$

$$\to A_{n,m} = \sum_{i,j} S^*_{i,n} A_{i,j} S_{j,m} = \sum_{i,j} (S^\dagger)_{n,i} A_{i,j} S_{j,m}. \tag{IV.76}$$

Die Impulsdarstellung von $\hat{x}_j$ ist somit z.B.

$$\langle\vec{r}|\hat{x}_j|\vec{r}'\rangle = x_j\ \delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{IV.77}$$

$$\rightarrow\ \langle\vec{p}|\hat{x}_j|\vec{p}'\rangle = \int \mathrm{d}r^3\mathrm{d}^3r'\ \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\ \underbrace{\langle\vec{r}|\hat{x}_j|\vec{r}'\rangle}_{=x_j\ \delta(\vec{r}-\vec{r}')}\ \langle\vec{r}'|\vec{p}'\rangle \tag{IV.78}$$

$$= \int \mathrm{d}^3r \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{-i\vec{r}(\vec{p}-\vec{p}')/\hbar}x_j \tag{IV.79}$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_j}\delta(\vec{p}-\vec{p}'). \tag{IV.80}$$

Die Ortsdarstellung von $\hat{p}_j$ ist

$$\langle\vec{p}|\hat{p}_j|\vec{p}'\rangle = p_j\ \delta(\vec{p}-\vec{p}') \tag{IV.81}$$

$$\langle\vec{r}|\hat{p}_j|\vec{r}'\rangle = \int \mathrm{d}^3p\ \ \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\, p_j\, \langle\vec{p}|\vec{r}'\rangle \tag{IV.82}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\ \int \mathrm{d}^3p\ e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \tag{IV.83}$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{IV.84}$$

Es lässt sich somit zeigen, dass $\hat{p}$ hermitesch ist:

$$\langle\vec{r}|\hat{p}_j|\vec{r}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\ \delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{IV.85}$$

$$\langle\vec{r}'|\hat{p}_j|\vec{r}\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\ \delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{IV.86}$$

$$= \langle\vec{r}|\hat{p}_j|\vec{r}'\rangle^* \tag{IV.87}$$

$$= \langle\vec{r}'|\hat{p}_j^\dagger|\vec{r}\rangle\,. \tag{IV.88}$$

(ii) Eigenwertprobleme

- Eigenwertgleichung:

$$A\,|\Psi\rangle = \lambda\,|\Psi\rangle\,, \tag{IV.89}$$

  falls $|\Psi\rangle$ ein Eigenvektor ist, ist $e^{i\alpha}\,|\Psi\rangle$ mit $\alpha\in\mathbb{R}$ ebenfalls ein Eigenvektor, da $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

- Ein Eigenwert λ heißt einfach, falls $|\Psi\rangle$ bis auf eine Phase eindeutig ist.
  Ein Eigenwert λ heißt g-fach entartet, falls es g linear unabhängige Eigen-

vektoren $\{|\Psi\rangle\}$ zu λ gibt; jeder Zustand der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i |\Psi_i\rangle \tag{IV.90}$$

hat dann denselben Eigenwert λ. $|\Psi_i\rangle$ können hierbei orthonormiert werden (Tutorium).

- Eigenwertproblem in einer Darstellung mit $\{|i\rangle\}$ als Basis:

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \tag{IV.91}$$
$$\Rightarrow \sum_j \langle i|A|j\rangle \langle j|\Psi\rangle = \lambda \langle i|\Psi\rangle \tag{IV.92}$$
$$\Rightarrow \sum_j A_{i,j} c_j = \lambda c_j \tag{IV.93}$$
$$\Rightarrow \sum_j [A_{i,j} - \lambda\delta_{i,j}]\, c_j = 0. \tag{IV.94}$$

Die charakteristische Gleichung ist somit

$$\det[A - \lambda \mathbb{1}] = 0 \tag{IV.95}$$

- Hermitesche Operatoren $A = A^\dagger$:

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda \langle\Psi|\Psi\rangle \tag{IV.96}$$
$$= \langle\Psi|A|\Psi\rangle^* \quad \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R} \tag{IV.97}$$
$$= \langle\Psi|A^\dagger|\Psi\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle \tag{IV.98}$$

Seien

$$A|\Psi_1\rangle = \lambda_1 |\Psi_1\rangle, \tag{IV.99}$$
$$A|\Psi_2\rangle = \lambda_2 |\Psi_2\rangle \tag{IV.100}$$

mit $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Dann folgt

$$\langle\Psi_2|A|\Psi_1\rangle = \lambda_1 \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \tag{IV.101}$$
$$= \langle\Psi_1|A|\Psi_2\rangle^* \tag{IV.102}$$
$$= \lambda_2 \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^* = \lambda_2 \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \tag{IV.103}$$
$$\Rightarrow \langle\Psi_2|A|\Psi_1\rangle - \langle\Psi_2|A^\dagger|\Psi_1\rangle = 0 \tag{IV.104}$$
$$0 = \langle\Psi_2|A^\dagger|\Psi_1\rangle - \langle\Psi_1|A|\Psi_2\rangle^* = (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \tag{IV.105}$$
$$\Rightarrow \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle = 0 \tag{IV.106}$$

Die Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind also orthogonal.

In der Quantenmechanik werden Observablen dargestellt durch hermitesche Operatoren; deren Eigenwerte sind mögliche Messergebnisse; jeder Operator bestimmt eine vollständige Eigenbasis von $\mathscr{H}$. Sei $A = A^\dagger$ mit $A\,|n\rangle = a_n\,|n\rangle$, dann ist

$$\Rightarrow A = \sum_n a_n\,|n\rangle\,\langle n| \tag{IV.107}$$

die sog. Spektraldarstellung von A.

- Vertauschbare Operatoren: Für $[A, B] = 0$ hat man

$$A\,|\Psi_a\rangle = a\,|\Psi_a\rangle \tag{IV.108}$$

$$\underbrace{BA}_{AB}\,|\Psi_a\rangle = aB\,|\Psi_a\rangle \tag{IV.109}$$

$\Rightarrow B\,|\Psi_a\rangle$ ist ein Eigenvektor von A mit Eigenwert a.

Fall 1:
Der Eigenwert a ist nicht entartet

$$\Rightarrow B\,|\Psi_a\rangle = \alpha\,|\Psi_a\rangle\,, \quad \alpha = \alpha(a) \tag{IV.110}$$

$$\Rightarrow |\Psi_a\rangle \text{ ist auch Eigenvektor von } B \text{ mit Eigenwert } b = \alpha(a) \tag{IV.111}$$

$$\Rightarrow \text{ Zwei kommutierende Operatoren haben ein gemeinsames} \tag{IV.112}$$

$$\text{Eigenfunktionssystem (Basis)} \tag{IV.113}$$

Fall 2:
Der Eigenwert a ist entartet, P_a ist Projektor auf den Entartungsraum h_a

$$\Rightarrow P_a(B\,|\Psi\rangle) = B\,|\Psi\rangle \text{ für alle } |\Psi\rangle \text{ mit } P_a\,|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \tag{IV.114}$$

$$\Rightarrow P_a\;B\;P_a = B\;P_a, \tag{IV.115}$$

d.h. falls $|\Psi\rangle$ in h_a liegt, gilt alles auch für $B\,|\Psi\rangle$.

- Vollständiger Satz kommutierender Observablen:

$$A_1, \ldots,\; A_2 \text{ mit } [A_i, A_j] = 0 \tag{IV.116}$$

$\Rightarrow$ Es existiert eine Basis gemeinsamer Eigenfunktionen $\{|a_1, \ldots,\; a_n\rangle\}$ (wobei $a_1, \ldots,\; a_n$ die Eigenwerte sind). Mit

$$A_i\,|a_1, \ldots,\; a_n\rangle = a_i\,|a_1, \ldots, a_n\rangle \tag{IV.117}$$

ist die Basis durch die $A_1, \ldots, A_n$ **eindeutig festgelegt** (und nicht wie bei Entartungen; in diesem Fall kann in den Unterräumen eine beliebige Basis gewählt werden).

$\Rightarrow$ vollständiger Satz von Observablen

- Schrödingergleichung

$$H\,|n\rangle = \mathrm{E}_n\,|n\rangle \tag{IV.118}$$

$$H = \sum_n \mathrm{E}_n\,|n\rangle\,\langle n|\,,\ \text{Spektraldarstellung von H} \tag{IV.119}$$

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\Psi(t)\rangle = H\,|\Psi(t)\rangle \tag{IV.120}$$

$$\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-iHt/\hbar}}_{Propagator}\ |\Psi(0)\rangle\,. \tag{IV.121}$$

falls $|\Psi\rangle$ ein Eigenzustand zu H mit Eigenwert E_n ist:

$$|n(t)\rangle = e^{iHt/\hbar}\ |n(0)\rangle \tag{IV.122}$$

$$= \sum_k \left(\frac{-i}{\hbar}t\right)^k \frac{H^k}{k!}\,|n\rangle \tag{IV.123}$$

$$= \left(\sum_k \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^k \frac{\mathrm{E}_n^k}{k!}\right)|n\rangle \tag{IV.124}$$

$$= e^{-i\mathrm{E}_n t/\hbar}\,|n\rangle\,. \tag{IV.125}$$

Die Zeitentwicklung ist eine unitäre Transformation $\rightarrow$ kontinuierlicher Basiswechsel.
Die Lösung zum Zeitpunkt $t = 0$ (stationärer Fall) lässt sich somit ausdrücken als

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n\,|n\rangle\,,$$

die Lösung für die zeitabhängige Schrödingergleichung ist

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\mathrm{E}_n t/\hbar}\,|n\rangle\,,$$

das Skalarprodukt der beiden Lösungen

$$\begin{aligned}\langle\Psi(t)|\Psi(0)\rangle &= \sum_{n,m} c_n^*\ e^{i\mathrm{E}_n t/\hbar}\,\langle n|m\rangle\,c_m\\ &= \sum_n |c_n|^2\ e^{i\mathrm{E}_n t/\hbar.}\end{aligned}$$

Anmerkung: Funktionen von Operatoren $f(\hat{A})$ werden verstanden als Potenzreihen der entsprechenden c-Zahl Funktion

$$f(x) = \sum_n f_n x^n \text{ mit } x \to \hat{A}.$$