Wiederholung

- Wellenfunktion $\psi(\vec{x}) = \sum_k v_k u_k(\vec{x}) \Leftrightarrow$ Zustandsvektor $\vec{v}$
  Operatoren $\hat{q} \Leftrightarrow$ Matrizen $\overset{\sqcup}{q}$, mit $(\overset{\sqcup}{q})_{ij} = \langle u_i | \hat{q} | u_j \rangle$
- Unitäre Matrizen: $\overset{\sqcup}{U}^+ = \overset{\sqcup}{U}^{-1}$
  $((\overset{\sqcup}{A}^+)_{ij} = A^*_{ij}) \Rightarrow |\overset{\sqcup}{U}\vec{v}| = |\vec{v}|$
- Falls $\hat{q}\, u_k = q_k u_k$: $\overset{\sqcup}{q}$ diagonal
- Schrödinger-Bild: $\psi(\vec{x},t) = \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x})$
  $$\Rightarrow \overset{\sqcup}{H}_S \vec{\psi}_S(t) = i\hbar \frac{d\vec{\psi}_S(t)}{dt}$$

  Heisenberg-Bild: $\psi(\vec{x},t) = \sum_k \psi_k u_k(\vec{x},t)$
  $$\hat{H} u_k(\vec{x},t) = i\hbar \frac{\partial u_k(\vec{x},t)}{\partial t}$$

Zeitabhängigkeit der Operatoren im Heisenberg Bild

$$\frac{d}{dt} q_{ik} = \langle \frac{\partial u_i}{\partial t} | \hat{q} | u_k \rangle + \langle u_i | \hat{q} | \frac{\partial u_k}{\partial t} \rangle + \langle u_i | \frac{\partial \hat{q}}{\partial t} | u_k \rangle$$

$$\underset{\text{Schr.Gl.}}{=} \frac{i}{\hbar} \left(\langle \hat{H} u_i | \hat{q} | u_k \rangle - \langle u_i | \hat{q} | \hat{H} u_k \rangle \right) + \langle u_i | \frac{\partial \hat{q}}{\partial t} | u_k \rangle$$

$$\underset{\hat{H} = \hat{H}^+}{=} \frac{i}{\hbar} \left(\langle u_i | \hat{H}\hat{q} | u_k \rangle - \langle u_i | \hat{q}\hat{H} | u_k \rangle \right) + \langle u_i | \frac{\partial \hat{q}}{\partial t} | u_k \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \overset{\sqcup}{q}_H = \frac{i}{\hbar} (\overset{\sqcup}{H}, \overset{\sqcup}{q}_H) + \frac{\partial \overset{\sqcup}{q}_H}{\partial t} \qquad (9.29)$$

Vgl (8.2) für Erwartungswert $\langle q \rangle$,
(5.14) für klassische Observablen

Formal: Können aus Schrödinger-Basisfunktionen Heisenberg-Basisfunktionen erhalten durch Anwendung der „Zeitentwicklungsoperatoren"

$$\hat{U}_t := e^{-i\hat{H}t/\hbar} \qquad (9.30)$$

Ist unitär, da $(e^{\hat{A}})^+ = e^{\hat{A}^+}$, $e^{-\hat{A}}e^{\hat{A}} = 1$, $\hat{U}_t^+ = e^{i\hat{H}t/\hbar}$

$$u_n(\vec{x},t) = \hat{U}_t\, u_n(\vec{x}) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\, u_n(\vec{x}) \qquad (9.31)$$

Denn

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_n(\vec{x},t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right) u_n(\vec{x}) = \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} u_n(\vec{x})$$

$$\underset{(9.31)}{=} \hat{H} u_n(\vec{x},t)$$

$$\langle u_k(\vec{x},t) | u_n(\vec{x},t) \rangle \underset{(9.31)}{=} \langle u_k(\vec{x}) | \underbrace{\hat{U}_t^+ \hat{U}_t}_{1} | u_n(\vec{x}) \rangle = \delta_{kn}$$

$$\langle u_k(\vec{x}) | \hat{q}_s | u_n(x) \rangle = \langle \underbrace{u_k(\vec{x},t)\hat{U}_t}_{\langle u_k(\vec{x})|} | \underbrace{\hat{U}_t^+ \hat{q}_s \hat{U}_t}_{\hat{q}_H} | \underbrace{\hat{U}_t^+ u_n(\vec{x},t)}_{|u_n(\vec{x})\rangle} \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{q}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\, \hat{q}_s\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} \qquad (9.32)$$

Ist offensichtlich konsistent mit (9.29)

Wechselwirkungs-Darstellung

Nachteil der Heisenberg-Darstellung:
Für explizite Rechnung, brauche exakte Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

$\Rightarrow$ „Kompromiss" $\quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \qquad (9.33)$

Basisfunktionen erfüllen $\hat{H}_0 u_k(\vec{x},t) = i\hbar \frac{\partial u_k(\vec{x},t)}{\partial t}$

$$\psi(\vec{x},t) = \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x},t) \qquad (9.34)$$

$$\hat{H}\,\psi(\vec{x},t) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x},t)$$

$$= \hat{H}_1 \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x},t) + \sum_k \psi_k(t)\, i\hbar \frac{\partial u_k(\vec{x},t)}{\partial t}$$

$$= i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x},t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x},t)$$

$$= i\hbar \sum_k \left(\frac{\partial \psi_k(t)}{\partial t} u_k(\vec{x},t) + \psi_k(t) \frac{\partial u_k(\vec{x},t)}{\partial t} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_1 \sum_k \psi_k(t)\, u_k(\vec{x},t) = i\hbar \sum_k \frac{\partial \psi_k(t)}{\partial t} u_k(\vec{x},t)$$

$$\Rightarrow \sum_k (\hat{H}_1)_{nn} \psi_k(t) = (\hat{H}_1 \vec{\psi})_n = i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \qquad \forall n$$

$$\Rightarrow \breve{H}_{1I}\, \vec{\psi}_I = i\hbar \frac{\partial \psi_I}{\partial t} \qquad I:\ \text{Interaction} \qquad (9.35)$$

Zeitabhängigkeit der Operatoren:

$$\frac{d}{dt} \breve{q}_I = \frac{\partial}{\partial t} \breve{q}_I + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{0I}, \hat{q}_s] \qquad (9.36)$$

9d) überabzählbar-unendlich dimensionale "Matrizen"

Bislang: diskrete Menge von (höchstens) abzählbar-∞ vielen Basis-funktionen

jetzt: Erlaube kontinuierlichen Index r, d.h. Dimension des Vektorraums, der durch u_r aufgespannt wird, nicht mehr abzählbar.

Orthonormalität:

$$\langle u_r | u_s \rangle = \delta(r-s) \qquad \text{vgl. (6.21)} \qquad (9.37)$$

$$\sum_r |u_r\rangle\langle u_r| \to \int dr\, u_r^*(\vec{x}) u_r(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') \qquad (9.38)$$

vgl. (6.27)

Entwicklung der Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{x},t) = \int \psi(r)\, u_r(\vec{x})\, dr \qquad (9.39)$$

(6.23): $\psi(\vec{x},t)$ ist normierbar, wenn (9.37) gilt.

$$(9.39) \Rightarrow \langle u_s | \psi \rangle = \int d^3x\, u_s^*(\vec{x}) \psi(\vec{x},t)$$

$$= \int dr\, \psi(r) \underbrace{\int d^3x\, u_r(\vec{x}) u_s^*(\vec{x})}_{\delta(r-s)}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(s) = \langle u_s | \psi \rangle \qquad (9.40)$$

Matrix-Darstellung von $\hat{q}$:

$$q_{rs} = \int d^3x\, u_r^*(\vec{x})\, \hat{q}\, u_s(\vec{x}) \qquad (9.41)$$

Falls $\hat{q}\, u_q(\vec{x}) = q\, u_q(\vec{x})$: $\qquad q_{rs} = r\,\delta(r-s) \qquad (9.42)$

$\check{q}$ ist diagonal

Matrix-Produkt: $\qquad (\check{q}\hat{p})_{rs} = \int q_{rt}\, p_{ts}\, dt \qquad (9.43)$

$$\check{q}\,\vec{\psi} = \vec{\varphi} \quad \text{heißt} \quad \varphi_r = \int ds\, q_{rs}\, \psi_s \qquad (9.44)$$

<u>Beispiele</u>

- $u_r(\vec{x}) \equiv u_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{x}}$ Schrödinger-Bild: Eigenfunktion von $\hat{\vec{p}}$

$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}$ ist Fourier-Trafo von $\psi(\vec{x})$, vgl. (4.8, 4.9)

Darstellung von $\hat{\vec{p}}$ in dieser Basis (für 1-Teilchen-Zustand)

$$(\hat{p}_x)_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \; e^{-i\vec{k}\vec{x}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{i\vec{k}'\vec{x}}$$

$$= \frac{\hbar k'_x}{(2\pi)^3} \int d^3x \; e^{ix(\vec{k}-\vec{k}')}$$

$$= \hbar k_x \, \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') \quad \text{diagonal} \qquad (9.45)$$

$$(\hat{x})_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \; e^{-i\vec{k}\vec{x}} \, x e^{i\vec{k}'\vec{x}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \; e^{-i\vec{k}\vec{x}} \left(-i \frac{\partial}{\partial k_x}\right) e^{i\vec{k}'\vec{x}}$$

$$= -i \frac{\partial}{\partial k'_x} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \; e^{i\vec{x}(\vec{k}'-\vec{k})}$$

$$= -i \frac{\partial}{\partial k'_x} \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') \qquad (9.46)$$

- Eigenfunktionen von $\hat{\vec{x}}$ als Basis:

$$u_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_0) \qquad (9.47)$$

$\psi(\vec{x}) = \int d^3x_0 \; \psi_{\vec{x}_0} \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_0)$: Wellenfunktion ist hier ein Vektor im

$=$

überabzählbar-∞-dimensionalen Vektorraum, der durch die

$u_{\vec{x}_0}(\vec{x}) \equiv \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_0)$ aufgespannt wird.

10 Drehimpuls

Bisher: Alle nicht-triviale Dynamik war 1-dimensional (Kastenpotentiale, harm. Oszillator).

In mehr-dimensionalen Systemen mit Rotations-Symmetrie: Drehimpuls ist klassisch erhalten ⇒ nützlich Zustände nach dem Drehimpuls zu klassifizieren (vgl. in 1-dim. Parität)

10.a Operatoren des Bahndrehimpulses

Klassisch: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ (10.1)

d.h. $L_z = x p_y - y p_x$ und zyklisch (10.2)

Da $[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$: Quanten-Operator nach 6. Postulat eindeutig.

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \tag{10.3}$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{10.4a}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{10.4b}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{10.4c}$$

Operatoren $\hat{L}$ sind hermitisch, da $\hat{x}, \hat{p}$ hermitisch sind und nur kommutierende Komponenten von $\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{p}}$ und $\hat{\vec{L}}$ vorkommen.

Kommutatoren

$$[\hat{L}_z, \hat{z}] = [\hat{L}_z, \hat{p}_z] = 0 \qquad (10.5a,b)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{x}] = -\hat{y}\,[\hat{p}_x, \hat{x}] \underset{(6.39)}{=} i\hbar\,\hat{y} \qquad (10.5c)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_x] = [\hat{x}, \hat{p}_x]\,\hat{p}_y = i\hbar\,\hat{p}_y \qquad (10.5d)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{y}] = \hat{x}\,[\hat{p}_y, \hat{y}] = i\hbar\,\hat{x} \qquad (10.5e)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_y] = -[\hat{y}, \hat{p}_y]\,\hat{p}_x = -i\hbar\,\hat{p}_x \qquad (10.5f)$$

Andere $[\hat{L}_i, \hat{p}_j]$, $[\hat{L}_i, \hat{x}_j]$ durch zyklische Permutation.

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] \underset{(10.3)}{=} [\hat{L}_z, \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y]$$

$$= [\hat{L}_z, \hat{y}]\,\hat{p}_z - \hat{z}\,[\hat{L}_z, \hat{p}_y]$$

$$\underset{(10.5)}{=} -i\hbar\,\hat{x}\,\hat{p}_z + i\hbar\,\hat{z}\,\hat{p}_x$$

$$= i\hbar\,\hat{L}_y = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \qquad (10.6a)$$