5. Zeitunabhängige SG & Eigenwertprobleme

5.2 Eigenwertgleichungen hermitescher Operatoren: $\hat{A}^+ = \hat{A}$

- Observablen in QT!
- vgl. EW-Problem symmetr. Matrizen/Tensoren!
- Unterscheidung nötig:

a) $\hat{A}$ mit diskretem EW-Spektrum:

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{A}\varphi_n(\underline{r}) = \underbrace{a_n}_{\text{Eigenwert (EW)}} \underbrace{\varphi_n(\underline{r})}_{\text{Eigenfkt./-vektor (EF)}} \quad , n = 1, 2, \ldots \\ \hat{A} = \hat{A}^+ \longrightarrow \text{(i) } a_n \in \mathbb{R} \\ \qquad\qquad\quad \text{(ii) } \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad \ldots \text{Orthonormierung} \end{array}} \tag{5.6}$$

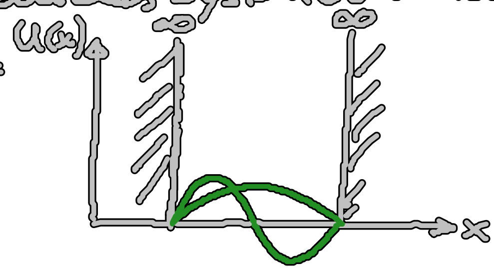
Beweis: (i), (ii) s. Übungen

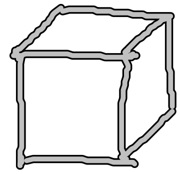
- Bem.: entarteter EW a_n $\hat{=}$ $\varphi_n^{(i)}$ $(i = 1, \ldots m)$ zu gleichem a_n
  $\hat{=}$ „Entartungsraum“

verwende Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren $\longrightarrow \langle \varphi_n^{(i)} | \varphi_n^{(j)} \rangle = \delta_{ij}$

• <u>Bsp:</u> $\hat{A} = \hat{H}$, $\hat{A}\varphi_n = E_n \varphi_n \longrightarrow (E_n, \varphi_n)$ ... diskrete Eigenzustände für Teilchen

(i) endliches Systemvolumen:

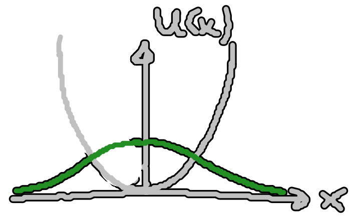
1D: 

3D:  $V = L \times L \times L$

s. Übungen

(ii) $\varphi(\underline{r}) \longrightarrow 0$, $|\underline{r}| \longrightarrow \infty$

harmonischer Oszillator



b) <u>$\hat{A}$ mit kontinuierlichem EW-Spektrum</u>

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{A}\varphi_\lambda(\underline{r}) = \lambda \varphi_\lambda(\underline{r}), \quad \lambda \text{ ... kont.} \\ &\hat{A} = \hat{A}^+ \longrightarrow \text{(i) } \lambda \in \mathbb{R} \\ &\qquad\qquad\quad \text{(ii) } \langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle \overset{!}{=} \delta(\lambda - \lambda') \end{aligned}} \quad (5.7)$$

... „Orthonormierung"

Beweis: (i) wie in a)

(ii) $\longrightarrow$ Messiah, Nolting

• unendliches Systemvolumen

• Bsp: (i) $\hat{A} = \hat{\underline{p}}$:

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{\underline{p}}\varphi_p(\underline{r}) \overset{(3.21)}{=} \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\varphi_p(\underline{r}) = \underline{p}\,\varphi_p(\underline{r}) \\ &\longrightarrow \varphi_p(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \end{aligned}} \quad (5.8)$$

$\underline{p}$ ... kont. Impuls

Orthonormierung: $\boxed{\langle \varphi_p | \varphi_{p'} \rangle = \delta(\underline{p} - \underline{p}')}$ (5.9)

Beweis: $\int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}' - \underline{p})} \overset{!}{=} \delta(\underline{p}' - \underline{p})$

$= \delta(p-p')$

$\longrightarrow$ Fouriertrafo = Entwicklung nach Impuls-eigenfkt.

Vorteil: $\hat{p}$ wirkt als Zahl im Impulsraum

(ii) $\hat{A} = \hat{x}$ (1D):

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{x}\,\varphi_{x_0}(x) \overset{!}{=} x_0\,\varphi_{x_0}(x) \\ &\longrightarrow \varphi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0) \end{aligned}} \qquad (5.10)$$

mit $$\boxed{\langle \varphi_{x_0} | \varphi_{x_0'} \rangle = \delta(x_0 - x_0')} \qquad (5.11)$$

$$\int dx\; \delta(x-x_0)\,\delta(x-x_0') = \delta(x_0'-x_0)$$

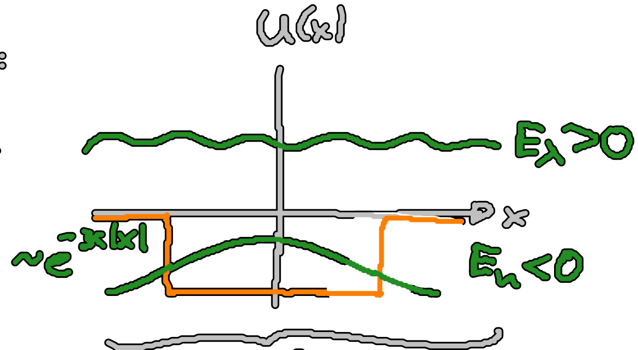
c) <u>$\hat{A}$ mit diskretem & kont. EW-Spektrum:</u>

- Bsp: $\hat{A} = \hat{A}$

(i) Potentialtopf endlicher Tiefe (1D):

$E_n \leq 0$ ... gebundene, diskrete Zustände

$E_\lambda > 0$ ... ungebundene, kont. Zustände = Streuzustände



$\longrightarrow$ einfaches Kern-modell

(ii) H-Atom

5.3 Vollständigkeit

- Entwicklung von $\psi(\underline{r},t)$ nach Eigenfkt. von $\hat{A}$

[vgl. " " Vektor $\underline{v}$ " " Vektoren $\underline{e}_i$ von Matrix/Tensor $\underline{\underline{A}}$: $\underline{v} = v_i \underline{e}_i$]

a) $\hat{A}$ mit diskretem EW-Spektrum

Satz: Die Eigenfunktionen $\{\varphi_n, n=1,2,\ldots\}$ eines hermiteschen Operators können ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) bilden. D.h. für jedes $f(\underline{r}) \in L^2$ gilt die Entwicklung:

$$f(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad c_n = \langle \varphi_n | f \rangle \tag{5.12}$$

Beweis: $\langle \varphi_n | \sum_m c_m \varphi_m \rangle = \sum_m c_m \underbrace{\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle}_{\delta_{nm}} = c_n$ qed

Bsp: für hermiteschen Operator ohne VONS?

- Parsevalsches Theorem:

Sei $\psi_1(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r})$, $\psi_2(\underline{r}) = \sum_m d_m \varphi_m(\underline{r})$

$$\longrightarrow \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_n c_n^* d_n \tag{5.13}$$

Beweis: selber

insbes. gilt: $\langle |\psi|^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1!$ (5.14)

- Satz: Ein VONS erfüllt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n \varphi_n^*(\underline{r}') \varphi_n(\underline{r}) = \delta(\underline{r}-\underline{r}') \tag{5.15}$$

Beweis: $f(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) \overset{(5.12)}{=} \sum_n \left[\int d^3r' \varphi_n^*(\underline{r}') f(\underline{r}') \right] \varphi_n(\underline{r})$

$$= \int d^3r' \underbrace{\sum_n \varphi_n^*(\underline{r}') \varphi_n(\underline{r})}_{= \delta(\underline{r}-\underline{r}')} f(\underline{r}') \quad \text{qed}$$

- Beachte: $\boxed{\text{Observable} = \text{hermitesches } \hat{A} \text{ mit VONS als Eigenfktn.}}$

wichtig für Meßprozeß, s. Kap. 6!

b) $\hat{A}$ mit kont. EW-Spektrum

- Beachte: $\varphi_\lambda(\underline{r}) \notin L^2$, wegen $\langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda')$ [s. (5.7)]
- trotzdem:

Satz: $\boxed{\begin{array}{l}\text{Eigenfktn. } \varphi_\lambda(\underline{r}) \text{ einer Observablen } \hat{A} \text{ bilden ein VONS für } f(\underline{r}) \in L^2: \\ f(\underline{r}) = \int d\lambda\, c(\lambda)\, \varphi_\lambda(\underline{r}) \quad \text{mit } c(\lambda) = \langle \varphi_\lambda | f \rangle\end{array}}$

Beweis: $\langle \varphi_\lambda | \int d\lambda' c(\lambda') \varphi_{\lambda'}(\underline{r}) \rangle$

$$= \int d\lambda' c(\lambda') \underbrace{\langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle}_{\delta(\lambda-\lambda')}$$

$$= c(\lambda) \quad \text{qed}$$

- Bsp. Fourierentw. $\longleftrightarrow$ Darstellung in Impulseigenfkt s(5.8)

$$\boxed{\begin{array}{l} f(\underline{r}) = \int d^3p\, \bar{f}(\underline{p})\, \varphi_p(\underline{r}) \qquad (5.17) \\ \text{mit } \varphi_p(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \quad \text{und } \bar{f}(\underline{p}) = \langle \varphi_p | f \rangle \\ \qquad = \int d^3r \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} f(\underline{r}) \end{array}}$$

- Vollständigkeitsrelation:

$$\boxed{\int d\lambda\, \varphi_\lambda^*(\underline{r}')\, \varphi_\lambda(\underline{r}) = \delta(\underline{r}-\underline{r}')} \quad (5.18)$$

Beweis: selber

Bsp: Impulseigenfktn.

$$\int d^3p\, \varphi_p^*(\underline{r}')\varphi_p(\underline{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot(\underline{r}-\underline{r}')} \overset{!}{=} \delta(\underline{r}-\underline{r}') \quad (5.19)$$

- Parsevals Theorem:

$$\boxed{\begin{aligned} &\psi_i(\underline{r}) = \int d\lambda\, c_i(\lambda)\varphi_\lambda(\underline{r}) \qquad i=1,2 \\ &\longrightarrow \langle \psi_1|\psi_2\rangle = \int d\lambda\, c_1^*(\lambda)\, c_2(\lambda) \end{aligned}} \quad (5.20)$$

Beweis: selber

NB: verschiedene Wege $\langle \psi_1|\psi_2\rangle$ zu berechnen!

5.4. Zeitentwicklung eines Zustandes

- Darstellung für diskretes EW-Spektrum von $\hat{A}$:

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{allg. Anfangszustand: } \psi(\underline{r},0) \overset{\text{VONS}}{=} \sum_n c_n\varphi_n(\underline{r}),\quad \sum_n |c_n|^2 = 1 \\ &\qquad \text{mit } \hat{A}\varphi_n(\underline{r}) = E_n\varphi_n(\underline{r}) \text{ und } c_n = \langle\varphi_n|\psi(\underline{r},0)\rangle \\ &\longrightarrow \text{Zeitentwicklung: } \psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\varphi_n(\underline{r}) \end{aligned}} \quad (5.21)$$