

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 diskontinuierlichem EW-Spektrum:

$$\hat{A}\varphi_n(\underline{r}) = a_n \varphi_n(\underline{r}), \quad n=1,2,\dots \quad (5.6)$$

Eigenwert (EW) Eigenfkt./-vektor (EF)

$$\hat{A} = \hat{A}^+ \rightarrow (i) a_n \in \mathbb{R}$$
$$(ii) \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad \dots \text{Orthonormierung}$$

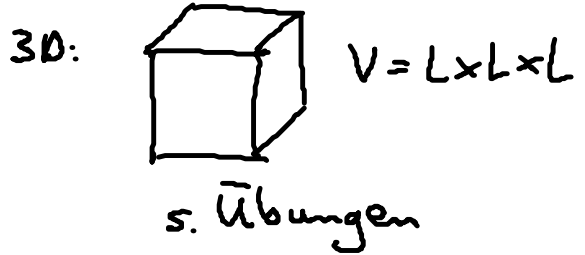
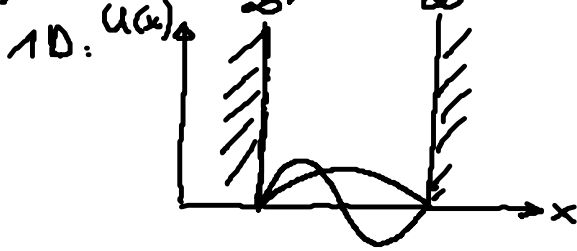
Beweis: (i), (ii) s. Übungen

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

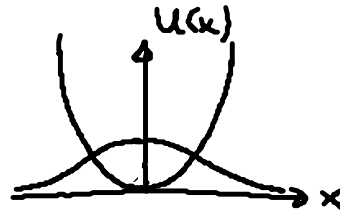
verwende Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren $\rightarrow \langle \varphi_n^{(i)} | \varphi_n^{(j)} \rangle = \delta_{ij}$

Bsp: $\hat{A} = \hat{H}$, $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n \rightarrow (E_n, \varphi_n) \dots$ diskrete Eigenzustände für Teilchen

(i) endliches Systemvolumen:



(ii) $\varphi(x) \rightarrow 0, |x| \rightarrow \infty$
harmonischer Oszillator



b) \hat{A} mit kontinuierlichem EW-Spektrum

$$\hat{A}\varphi_\lambda(x) = \lambda\varphi_\lambda(x), \lambda \dots \text{kont.} \quad (S.7)$$

$$\hat{A} = \hat{A}^+ \rightarrow (i) \lambda \in \mathbb{R}$$

$$(ii) \langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle \stackrel{!}{=} \delta(\lambda - \lambda') \dots \text{„Orthonormierung“}$$

Beweis: (i) wie in a)

(ii) \rightarrow Messiah, Nolting

• unendliches Systemvolumen

• Bsp: (i) $\hat{A} = \hat{p}$:

$$\hat{p}\varphi_p(r) \stackrel{(S.21)}{=} \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi_p(r) = p\varphi_p(r) \quad (S.8)$$

$$\rightarrow \varphi_p(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{p \cdot r}{\hbar}}$$

$p \dots$ kont. Impuls

Orthonormierung: $\langle \varphi_p | \varphi_{p'} \rangle \stackrel{!}{=} \delta(p - p') \quad (S.9)$

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

$$= \delta(p-p')$$

→ Fouriertrafo = Entwicklung nach Impuls-eigenfkt.

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

(ii) $\hat{A} = \hat{x}$ (10):

$$\hat{x} \varphi_{x_0}(x) = x_0 \varphi_{x_0}(x) \rightarrow \varphi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0) \quad (S.10)$$

mit $\langle \varphi_{x_0} | \varphi_{x'_0} \rangle = \delta(x_0 - x'_0) \quad (S.11)$

$$\int dx \delta(x-x_0) \delta(x-x'_0) = \delta(x'_0 - x_0)$$

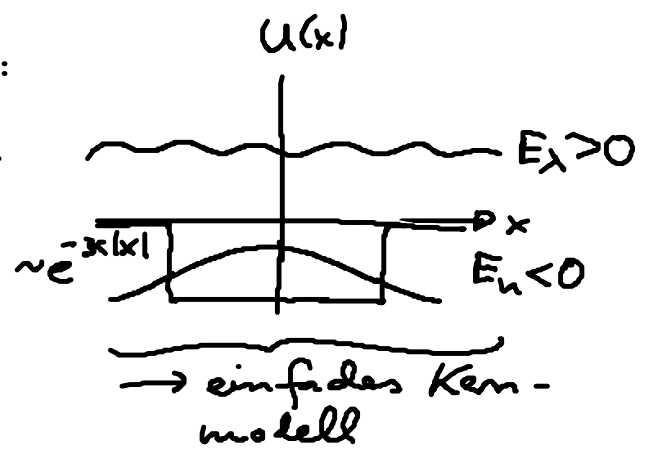
c) \hat{A} mit diskretem & kont. EW-Spektrum:

• Bsp: $\hat{A} = \hat{A}$

(i) Potentialtopf endlicher Tiefe (10):

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

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



(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{A} :
 $\underline{v} = v_i \underline{e}_i$]

a) \hat{A} mit diskretm EW-Spektrum

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

$$f(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad c_n = \langle \varphi_n | f \rangle \quad (S.12)$$

Bsp: für hermiteschen Operator ohne VONS? 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

• Parsevalsches Theorem:

$$\text{Sei } \varphi_1(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}), \quad \varphi_2(\underline{r}) = \sum_m d_m \varphi_m(\underline{r}) \quad (S.13)$$

$$\rightarrow \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \sum_n c_n^* d_n$$

Beweis: selber

insbes. gilt: $\langle |\varphi|^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1!$ (S.14)

• Satz: Ein VONS erfüllt die Vollständigkeitsrelation (S.15)

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

Beweis: $f(\underline{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\underline{r}) \stackrel{(S.12)}{=} \sum_n \left[\int d^3r' \varphi_n^*(\underline{r}') f(\underline{r}') \right] \varphi_n(\underline{r})$

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

• Beachte: Observable = hermitesches \hat{A}
mit VONS als Eigenfktn.

wichtig für Meßprozeß, s. Kap. 6!

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

• Beachte: $\varphi_\lambda(r) \notin L^2$, wegen $\langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda')$ [s. (S.7)]

• trotzdem:

Satz: Eigenfktn. $\varphi_\lambda(r)$ einer Observablen \hat{A} bilden ein VONS für $f(r) \in L^2$:

$$f(r) = \int d\lambda c(\lambda) \varphi_\lambda(r) \quad \text{mit } c(\lambda) = \langle \varphi_\lambda | f \rangle$$

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

• Bsp. Fourierreue \longleftrightarrow Darstellung in Impulseigenfkt s. (S.8)

$$f(r) = \int d^3 p \bar{f}(p) \varphi_p(r) \quad (S.17)$$

$$\text{mit } \varphi_p(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot r}$$

$$\text{und } \bar{f}(p) = \langle \varphi_p | f \rangle$$

$$= \int d^3 r \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot r} f(r)$$

• Vollständigkeitsrelation:

$$\int d\lambda \varphi_\lambda^*(r') \varphi_\lambda(r) = \delta(r-r') \quad (S.18)$$

Beweis: selber

Bsp: Impulseigenfktn.

$$\int d^3p \varphi_p^*(\underline{r}') \varphi_p(\underline{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')} \stackrel{!}{=} \delta(\underline{r} - \underline{r}') \quad (5.17)$$

Parsevalsches Theorem:

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

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} :

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