- Eigenwertgleichung!

19.1.

3.5.2 Stationäre Zustände

a) Lösungen der Art (3.49)

$$\Psi(\underline{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \, \varphi(\underline{r}) \qquad (3.53)$$

heißen „stationäre Zustände", da

$$P(\underline{r}) = |\varphi(\underline{r})|^2 \quad \text{und}$$

$$\underline{j}(\underline{r}) = -\frac{\hbar}{2mi} \left\{ \varphi^* \nabla \varphi - (\nabla \varphi)^* \varphi \right\} \qquad (3.54)$$

zeitunabhängig sind. Ferner ist $\nabla \cdot \underline{j} \overset{(3.34)}{=} 0$

b) Der Erwartungswert (3.43) eines zeitunabängigen Operators von einem stationären Zustand ist zeitlich konstant.

c) Wenn Ψ quadratintegrabel ist, so auch φ.

d) (3.52) ist eine Eigenwertgleichung. Die Bedingung der Normierbarkeit schränkt die möglichen Werte für E stark ein.

e) $\Delta E \overset{(3.44b)}{=} \langle H^2 - \langle H \rangle^2 \rangle^{1/2}$

$$\langle H \rangle = E \quad \langle H^2 \rangle = E^2 \,, \quad \Delta E = 0$$

stationäre Zustände haben scharfe Energie!

3.6. Eigenwertgleichungen

3.6.1. Vorbemerkungen

a) $\mathbb{C}^n$ ist komplexer Vektorraum mit innerem Produkt (3.18). Jede komplexe Matrix $A \in \mathbb{C}^{(n,n)}$ ist linearer Operator in $\mathbb{C}^n$, d.h. beschreibt eine lineare Abbildung

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^n &\longrightarrow \mathbb{C}^n \\ \underline{u} &\longmapsto A\underline{u} \end{aligned} \qquad (3.55)$$

- Alle Begriffe aus $\mathbb{C}^n$ können auf L^2 übertragen werden.

b) Der Raum der quadratintegrablen Wellenfunktionen, genannt L^2, ist ein unendlichdimensionaler komplexer Vektorraum mit innerem Produkt.

$$\langle f | g \rangle := \int d^3\underline{r}\; f^*(\underline{r})\, g(\underline{r}) \qquad (3.19)$$

NB! $\quad u_i \Longleftrightarrow f(\underline{r}) \qquad \sum_i \longleftrightarrow \int d^3\underline{r}$

- Ein linearer Operator A über L^2 ist eine lineare Abbildung

$$\begin{aligned} A: \; L^2 &\longrightarrow L^2 \\ f &\longmapsto Af \end{aligned} \qquad (3.56)$$

mit $A(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1 A f_1 + c_2 A f_2$,

$$c_i \in \mathbb{C}, \; f_i \in L^2 \qquad (3.57)$$

- Beispiele linearer Operatoren:

$$x_i, \; \frac{\partial}{\partial x_i}, \; \frac{\partial}{\partial t}, \; f(\underline{r}, t) \text{ als Faktor}$$

c) Operationen mit linearen Operatoren

$$\left.\begin{array}{l} \text{i) Multiplikation mit } c \in \mathbb{C}: A \to cA \\ \text{ii) Summe } A+B, \text{ Produkt } A \cdot B \end{array}\right\} \quad (3.58)$$

ergibt wieder einen linearen Operator.

d) Eins- und Nulloperator:

$$\left.\begin{array}{l} 1\psi = \psi, \quad 0\psi = 0 \\ 1A = A1 = A, \quad 0A = A0 = 0 \end{array}\right\} \quad (3.59)$$

Name: „Operatoralgebra"

e) Kommutator von zwei Operatoren:

$$\boxed{[A, B] = AB - BA} \qquad (3.60)$$

f) Wiederholung: Adjungierter Operator A^+:

$$\langle f | Ag \rangle = \langle A^+ f | g \rangle \quad \text{für alle } f, g \in L^2 \qquad (3.61)$$

- Selbstadjungiert oder hermitesch:

$$A = A^+ \qquad (3.62)$$

g) ψ ist Eigenfunktion zum linearen Operator A mit Eigenwert $a \in \mathbb{C}$, wenn gilt:

$$A\psi = a\psi \qquad (3.63)$$

55

3.6.2. Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Beweis: Aus (3.63) folgt:

$$\langle \psi | A\psi \rangle \overset{(3.63)}{=} \langle \psi | a\psi \rangle \overset{\text{lin}}{=} a \langle \psi | \psi \rangle \quad (3.64)$$

$$\langle A\psi | \psi \rangle = \langle a\psi | \psi \rangle \underset{(3.21)}{\overset{\text{antil.}}{=}} a^* \langle \psi | \psi \rangle \quad (3.65)$$

- A hermitesch, d.h.

$$\langle A\psi | \psi \rangle = \langle \psi | A\psi \rangle, \text{ also } a^* = a \quad (3.66) \text{ qed.}$$

3.6.3. Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

$$\underline{u}, \underline{v} \in \mathbb{C}^n, \quad \underline{u} \perp \underline{v} :\Longleftrightarrow \langle \underline{u} | \underline{v} \rangle = 0$$

$$f, g \in L^2, \quad f \perp g :\Longleftrightarrow \langle f | g \rangle = 0 \quad (3.67)$$

Beweis des Satzes:

Sei $A\psi_m = a_m \psi_m$, $A\psi_n = a_n \psi_n$

$$a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | A\psi_n \rangle \overset{A^+=A}{=} \langle A\psi_m | \psi_n \rangle = a_m \langle \psi_m | \psi_n \rangle \quad (3.68)$$

$$\Rightarrow (a_n - a_m) \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \overset{a_n \neq a_m}{\Longrightarrow} \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad \psi_m \perp \psi_n$$

3.6.4. Entartung

- Liegt vor, wenn zu einem Eigenwert mehrere linear unabhängige Eigenfunktionen gehören:

$$A\psi_m = a\psi_m, \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.69)$$

- Die entarteten Eigenfunktionen zu a bilden einen Untervektorraum
- In diesem kann stets eine orthogonale Basis gewählt werden, z.B. durch das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren.

3.6.5 Vollständigkeit

a) <u>Im $\mathbb{C}^n$</u>

- Jeder hermitesche Operator besitzt ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenvektoren $\underline{v}_n$:

$$A\,\underline{v}_i = a\,\underline{v}_i \quad , i = 1, \dots, n \quad a_i \in \mathbb{R} \qquad (3.70)$$

$$\langle \underline{v}_i | \underline{v}_j \rangle = \delta_{ij} = \underline{v}_i^+ \underline{v}_j \qquad (3.71)$$

$$\sum_{i=1}^{n} \underline{v}_i \underline{v}_i^+ = \underline{\underline{1}} \quad \text{bzw.} \qquad (3.72)$$

$$\sum_{i=1}^{n} v_{ik} v_{iL}^* = \delta_{KL} = \sum_{i=1}^{n} v_{ik}^* v_{iL} \qquad (3.73)$$

- Jeder Vektor kann folgendermaßen nach dieser Basis entwickelt werden:

$$\underline{u} = \underline{\underline{1}}\,\underline{u} \overset{(3.72)}{=} \sum_{i=1}^{n} \underline{v}_i \underline{v}_i^+ \underline{u} = \sum_{i=1}^{n} \underline{v}_i \langle \underline{v}_i | \underline{u} \rangle \qquad (3.74)$$

„Einschieben der 1"

b) <u>In L^2:</u>

- Die hermiteschen Operatoren besitzen vollständige Orthonormalsysteme von Eigenfunktionen φ_i:

$$A\,\varphi_i = a_i\,\varphi_i \qquad (3.75)$$

- Orthonormalität:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \qquad (3.76)$$

- Vollständigkeit:

$$\boxed{\sum_i \psi_i(\underline{r})\, \psi_i^*(\underline{r}') = \delta(\underline{r}-\underline{r}')} \qquad (3.77)$$

$\hat{=} k$ $\hat{=} \ell$ in (3.73)

- Entwicklung von $\psi \in L^2$:

$$\psi(\underline{r}) = \int d^3\underline{r}'\, \delta(\underline{r}-\underline{r}')\, \psi(\underline{r}')$$

$$\overset{(3.77)}{=} \sum_i \psi_i(\underline{r}) \int d^3\underline{r}'\, \psi_i^*(\underline{r}')\, \psi(\underline{r}') =$$

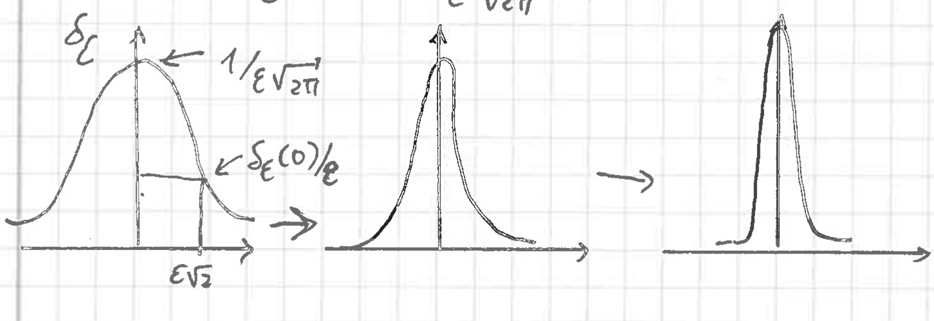
$$= \sum_i \psi_i(\underline{r}) \langle \psi_i | \psi \rangle \qquad (3.78), \text{ vgl } (3.73)$$

3.6.6. Zur diracschen δ-Funktion

- $\delta(\underline{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$ (3.79)

(3.80) $\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$

(3.81) $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{2\pi}}\, e^{-x^2/2\varepsilon^2}$



- $\int dx\, \delta(x) = 1$ (3.82)

- $\int dx'\, \psi(x-x')\, \psi(x') = \psi(x)$ (3.83)

- $x\, \delta(x-a) = a\, \delta(x-a)$ (3.84)

Eigenfunktion zum Ortsoperator x!

• Insbesondere gilt z.B.:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \left\{ (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar} (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-ipx'/\hbar} \right\} =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, e^{ip(x-x')/\hbar} = \delta(x-x') \qquad (3.85a)$$

• Kontinuumsversion von (3.77) mit Eigenfunktionen zu $\underline{p}$. Allgemeiner:

$$\delta(x) = \frac{\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, e^{i\alpha k x} \qquad (3.85b)$$

23.1.

3.6.7 Entwicklung nach stationären Zuständen

• Hamiltonoperator besitzen ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$H \psi_n(\underline{r}) = E_n \psi_n(\underline{r}) \qquad (3.86)$$

• Folglich kann jedes $\psi \in L^2$ danach entwickelt werden:

ggf. Integral, wenn Kont. Basis

$$\psi(\underline{r}) \overset{(3.78)}{=} \sum_n \psi_n(\underline{r}) \langle \psi_n | \psi \rangle =$$

$$=: \sum_n c_n \psi_n(\underline{r}), \quad c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle \qquad (3.87)$$

· Satz:

Die Funktion

$$\Psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n \Psi_n(\underline{r},t) \qquad (3.88)$$

mit

$$\Psi_n(\underline{r},t) = e^{-iE_nt/\hbar} \underbrace{\psi_n(\underline{r})}_{\text{Eigenf. von } \hat{H}} \qquad (3.89)$$

löst die zeitabhängige Schrödingergleichung mit $\Psi(\underline{r},t=0) = \psi(\underline{r})$.