II Mathematische Hilfsmittel

A Wellenpaket als Zustandsraum $\mathcal{F}$

1) linearer Raum $\mathcal{F}$

Skalarprodukt

$$\langle \varphi, \psi \rangle \equiv \int d\vec{r}\; \varphi^* \psi$$

Es gilt $\quad \langle \varphi, \psi \rangle^* = \langle \psi, \varphi \rangle$

$$\langle \varphi, \psi \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi \perp \psi$$

Norm: $\quad \langle \psi, \psi \rangle^{\frac{1}{2}} = |\psi|$

Schwarzsche UGL

$$|\langle \psi_1, \psi_2 \rangle| \leq |\psi_1| \cdot |\psi_2|$$

un lineare Operatoren

- lin. Abbildung $A \qquad \varphi = A\psi$

  mit $\varphi, \psi \in \mathcal{F}$

$$A(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 A \psi_1 + \lambda_2 A \psi_2$$

Beispiele

Ortsoperator $X \;\hat{=}\;$ Multiplikation mit x

$$X \psi(x, y, z) = x \cdot \psi$$

Ableitungsoperator: $\quad D_x \psi = \frac{d}{dx} \psi$

Paritätsoperator: $\quad \Pi\, \psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$

Anmerkung: Ein Operator A ist i.A. nicht für alle Zustände definiert.

Beispiel

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{2}}\,\frac{1}{a+|x|} \quad , \quad \int dx\, |\psi|^2 = 1$$

aber: $\int |x|\, |\psi|^2\, dx$ divergiert

Produkt AB ist def. durch

$$(AB)\,\psi = A\,(B(\psi))$$

i. A. gilt $(AB) \neq (BA)$

$$[A, B] = AB - BA \quad \text{Kommutator}$$

Operatoren entsprechen Messungen, Reihenfolge wichtig.

Beispiel: $[x, D_x]\,\psi = \left(x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}\,x\right)\psi$

$$= x\frac{d}{dx}\psi - \psi - x\frac{d}{dx}\psi$$

$$= -\psi$$

also $[x, D_x] = -1$

so $\left[x, \frac{\hbar D_x}{i}\right] = i\hbar$

$\uparrow$

Impulsoperator

2) Orthonormalbasis

Vektor wird charakterisiert durch seine Komponenten bezüglich einer orthonormierten Basis $\{u_i\}$

$u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, $i = 1, \ldots, n$ (evtl. bis ∞)

$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}$ $\hat{=}$ orthonormiert

$\{u_i\}$ ist Basis, wenn jedes $\psi \in \mathcal{F}$

als $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\vec{r})$ geschrieben werden kann.

Berechnung der c_i

① ausführliche Schreibweise für Wellenfkt

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\vec{r})$$

$$\int d\vec{r} \left(u_j^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r}) \right)$$

$$= \sum_i c_i \int d\vec{r} \, \underbrace{u_j^*(\vec{r}) \, u_i(\vec{r})}_{\delta_{ij}}$$

$$= \int d\vec{r} \, u_j^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r}) = c_j$$

② Kurzschreibweise (viel allgemeiner)

$$\psi = \sum_i c_i u_i$$

$$\langle u_j, \psi \rangle = \sum_i c_i \underbrace{\langle u_j, u_i \rangle}_{\delta_{ij}}$$

$$= c_j$$

$$\langle u_j, \psi \rangle = c_j$$

Skalarprodukt in Komponentenschreibweise

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i \, u_i(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\vec{r})$$

$$\int d\vec{r} \, \varphi^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r}) = \sum_i b_i^* c_i$$

$$\varphi = \sum_i b_i u_i$$

$$\psi = \sum_i c_i u_i$$

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \sum b_i^* c_i$$

Speziell $\langle \psi, \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2$

Vollständigkeitsrelation

Für jede Fkt. $\psi(\vec{r})$ aus $\mathcal{F}$ gilt

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\vec{r}) = \sum_i \int d\vec{r}' \, \underbrace{u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}')}_{\delta_{ij}} u_i(\vec{r})$$

$$= \int d\vec{r}' \, \psi(\vec{r}') \Big(\underbrace{\sum_i u_i(\vec{r}) \, u_i^*(\vec{r}')}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \Big)$$

$$\Rightarrow \sum_i u_i(\vec{r}) \, u_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

(kurz: $\psi = \sum_j \langle u_j, \psi \rangle u_j = \sum u_i \langle u_i, \psi \rangle$)

$$\Rightarrow \sum_i u_i \langle u_i , \cdot \rangle = \mathbb{1}$$

Beispiel für 3 dim.

Dyadisches Produkt $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} (x \; y \; z) = \begin{pmatrix} ax & ay & az \\ bx & by & bz \\ cx & cy & cz \end{pmatrix}$

3. Ebene Wellen und verallgemeinerte Basiszustände

Eindim. ebene Wellen

$$v_p(x) = e^{i \frac{px}{\hbar}}$$

nicht normierbar $\Rightarrow$ nicht für ψ zulässig

aber als Idealisierung oft bequem.

$p \mathrel{\hat=}$ Index (hier kontinuierlich)

Zerlegung eines Wellenpakets nach Ebenen Wellen

$\mathrel{\hat=}$ Entwicklung nach Basis $\{v_p\}$

Fourier-Transformation ist Zerlegung nach dieser Basis.

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) e^{ipx} = \underbrace{\int dp}_{\sum_i} \underbrace{\tilde{\psi}}_{c_i} \underbrace{v_p(x)}_{u_i}$$

Darstellung des Zustandsvektors

umgekehrt

$$\underbrace{\tilde{\psi}(p)}_{c_i} = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) e^{ipx} = \underbrace{\int dx \, v_p^{*}(x) \psi(x)}_{\langle u_i , \psi \rangle}$$

Berechnung der Koeffizienten

Parsevalsche Gleichung der Fourier-Trafo

$$\int dx \, \psi^{*}(x) \psi(x) = \int dp \, \tilde{\psi}^{*}(p) \tilde{\psi}(p)$$

$$\langle \psi , \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2$$

Vollständigkeit

$$\sum_i u_i(x)\, u_i^*(x') = \delta(x-x')$$

$$\int dp\, \frac{e^{ip\frac{x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \frac{e^{-i\frac{px'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{i\frac{(x-x')}{\hbar}}$$

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

Orthonormiertheit

$$\langle v_p, v_{p'}\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{-i\frac{px}{\hbar} + i\frac{p'x}{\hbar}} = \delta(p-p')$$

Entsprechendes gilt für die verallg. Basis

$$\{\xi_{x_0}(x)\} \quad \text{mit} \quad \xi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$$

Für bel. kontinuierliche Basis $\{w_\alpha\}$

$$\langle w_\alpha, w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha-\alpha') \quad \text{Orthonormiert}$$

$$\int d\alpha\, w_\alpha(x)\, w_\alpha^*(x') = \delta(x-x') \quad \text{Vollständ.}$$

Häufig brauchen wir eine gemischte Basis

z.B. mit Bindungs- u_i und Streuzuständen w_α

$$\{u_i, w_\alpha\}$$

$$\langle u_i, u_j\rangle = \delta_{ij} \quad ; \quad \langle w_\alpha, w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha-\alpha')$$

$$\langle u_i, w_\alpha\rangle = 0 \qquad \text{(Orthonormiertheit)}$$

Vollständigkeit

$$\sum_i u_i(x)\, u_i^*(x') + \int d\alpha\, w_\alpha(x)\, w_\alpha^*(x') = \delta(x-x')$$