Eigenschaften des Impuls-Operators

1) Wirkung auf Wellenfunktion:

$$\psi(x) \xrightarrow{p} -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

d.h. $$\boxed{p \;\hat{=}\; -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$$

Impuls in Ortsdarstellung

2) p hermitesch: $p = p^+$

3) $[x, p] = i\hbar \mathbb{1}$

4) $T(s) = e^{-ips/\hbar}$ (vgl.: $\mathcal{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}$)

zu 1) : siehe vorherige Vorlesung

zu 2) :

wegen $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle T(a)\psi, T(a)\varphi \rangle = \langle \psi, T^+(a)\, T(a)\varphi \rangle$

(für alle ψ, φ) ist $T^+(a)\, T(a) = \mathbb{1}$ und somit

$$0 = \frac{d}{da}\left(T^+(a)\, T(a)\right) = \left(\frac{dT^+(a)}{da}\right) T(a) + T^+(a) \frac{dT(a)}{da} \qquad \Big|\cdot i\hbar\,,\ a \to 0$$

$$\to \quad 0 = \underbrace{-\left(i\hbar \frac{dT(a)}{da}\right)^+_{a=0}}_{-p^+} \underbrace{T(0)}_{=\mathbb{1}} + \underbrace{T^+(0)}_{=\mathbb{1}} \underbrace{\left(i\hbar \frac{dT(a)}{da}\right)_{a=0}}_{=p}$$

also $p = p^+$.

zu 3) wir zeigen zuerst: $[x, T(a)] = a\,T(a)$:

$$[x, T(a)]\, |\varphi_{x_0}\rangle = (\hat{x}\, T(a) - T(a)\,\hat{x})\, |\varphi_{x_0}\rangle =$$

$$= \hat{x}\, |\varphi_{x_0+a}\rangle - T(a)\, x_0\, |\varphi_{x_0}\rangle = (x_0 + a - x_0)\, |\varphi_{x_0+a}\rangle$$

$$= a\, T(a)\, |\varphi_{x_0}\rangle \,, \quad \text{gilt für } \underline{\text{alle}}\ x_0 \;\rightarrow\; [x, T(a)] = a\, T(a).$$

$$\rightarrow \quad [x, p] = i\hbar \frac{d}{da} [x, T(a)]\Big|_{a=0} = i\hbar \frac{d}{da} \big(a\, T(a)\big)_{a=0} = i\hbar\, T(0)$$

$$= i\hbar\, \mathbb{1}.$$

zu 4)

$$T(a+s_0) = T(a)\, T(s_0)$$

$$\frac{dT(s)}{ds}\Big|_{s_0} = \frac{d}{da} T(a+s_0)\Big|_{a=0} = \underbrace{\left(\frac{d}{da} T(a)\right)_{a=0}}_{= -i\frac{p}{\hbar}} T(s_0)$$

d. h. $T(s)$ genügt DGL $\frac{dT(s)}{ds} = -i\frac{p}{\hbar}\, T(s)$ mit

Anfangswert $T(0) = \mathbb{1}$

$$\rightarrow \quad T(s) = e^{-i\frac{ps}{\hbar}}\, \mathbb{1}$$

$\lrcorner$

<u>Eigenzustände und Eigenwerte des Impuls-Operators</u>

Zustand $|\tilde{\varphi}_p\rangle$ mit Wellenfunktion $\boxed{\tilde{\varphi}_p(x) = e^{ipx/\hbar}}$ ist

Impulseigenzustand zum Impulseigenwert $p \in \mathbb{R}$, d. h.

$$\hat{p}\, |\tilde{\varphi}_p\rangle = p\, |\tilde{\varphi}_p\rangle$$

$\ulcorner$ denn $\quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\varphi}_p(x) = p\, e^{ipx/\hbar} = p\, \tilde{\varphi}_p(x)$ $\lrcorner$

<u>Orthonormalität</u>: $\quad \boxed{\langle \tilde{\varphi}_p | \tilde{\varphi}_{p'} \rangle = 2\pi\hbar\, \delta(p-p')}$

<u>Vollständigkeit</u>: $\quad \boxed{\mathbb{1} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, |\tilde{\varphi}_p\rangle\langle\tilde{\varphi}_p|}$

→ Darstellung eines Zustandes in Impulseigenbasis:
(„Impulsraumdarstellung")

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}\,|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,|\tilde{\varphi}_p\rangle\langle\tilde{\varphi}_p|\psi\rangle$$

d.h. mit „Impulswellenfunktion" $\tilde{\psi}(p) := \langle\tilde{\varphi}_p|\psi\rangle$ ist

$$|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,|\tilde{\varphi}_p\rangle$$

beachte:

1) $$\boxed{\int dx\,\psi(x)\,|\varphi_x\rangle \overset{!}{=} |\psi\rangle \overset{!}{=} \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\tilde{\psi}(p)\,|\tilde{\varphi}_p\rangle}$$

$|\psi\rangle$ als Superposition von Ortszuständen ("Teilchenbild") $\Longleftrightarrow$ $|\psi\rangle$ als Superposition von Impulszuständen ("Wellenbild")

2) $$\boxed{\tilde{\psi}(p)} = \langle\tilde{\varphi}_p|\psi\rangle = \int dx\,\varphi_p^*(x)\,\psi(x) = \boxed{\int dx\,\psi(x)\,e^{-ipx/\hbar}}$$

d.h. $$\tilde{\psi}(p) \xleftrightarrow[\text{transformation}]{\text{Fourier-}} \psi(x)$$

(Beispiele in den Übungen)

Schrödingergleichung eines Punktteilchens (in 1D)

zuerst für freies Teilchen der Masse m:

↳ 1) Erhaltung von Energie und Impuls

2) Energie-Impuls-Beziehung

$$E = p^2/2m$$

beide Bedingungen erfüllt wenn $\boxed{\hat{H} \overset{!}{=} \frac{\hat{p}^2}{2m}}$

$\to [H, H] = 0,\ [H, p] = 0 \to$ 1)

$\to \langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle_{|\psi\rangle} \to$ 2)

$\to$ Zustand $|\psi(t)\rangle$ eines freien Teilchens genügt

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2m} |\psi(t)\rangle$$

d.h. zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(x,t) = \langle \varphi_x | \psi(t) \rangle$ des Teilchens genügt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t)$$

allgemeiner Fall: Teilchen unterliegt Wirkung eines Potenzials mit Potenzialfunktion $u: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $x \mapsto u(x)$

$\to$ Potenzialoperator $\hat{V} = u(\hat{x})$; d.h. genau $\hat{V} |\varphi_{x_0}\rangle = u(x_0) |\varphi_{x_0}\rangle$

$\to$ Wirkung von V auf Wellenfunktion:

$$\boxed{\psi(x) \xrightarrow{\hat{V}} u(x)\, \psi(x)}$$

→ allg. Hamiltonoperator $\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V}$

→ <u>Schrödingergleichung eines Teilchen</u>

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) |\psi(t)\rangle}$$

im <u>Ortsdarstellung</u>:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + u(x) \right) \psi(x,t)}$$

(E. Schrödinger 1926)

lineare <u>partielle</u> DGL 1. Ordnung in t,
2. Ordnung in x

<u>Standardlösungsmethode</u>:

bestimme Energieeigenzustände $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \ldots$ und Eigenenergien $E_0, E_1, \ldots$ anhand

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad ;$$

im <u>Ortsdarstellung</u>: bestimme Energieeigenfunktionen $\psi_0(x), \psi_1(x), \ldots$ und Eigenenergien $E_0, E_1, \ldots$ anhand

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + u(x) \right) \psi_n(x) = E_n \psi(x)}$$

sog. <u>zeitunabhängige</u> Schrödingergleichung

Bedingung an Energieeigenfunktionen

$$\boxed{|\psi_n(x)| < \infty \quad \text{für} \quad |x| \to \infty}$$

(„Normierbarkeit")

mit $|\psi_n\rangle$, E_n weitere Vorhergehensweise wie zuvor:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

$$\Big\downarrow t$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle$$

d.h.:

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

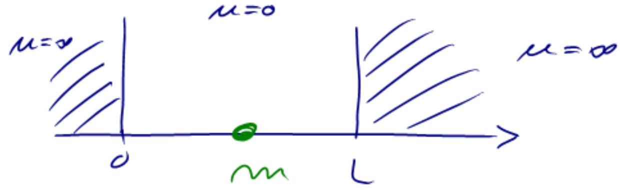
$$\Big\downarrow t$$

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)$$

Eindimensionale Modellsysteme

1) Teilchen im Kasten
2) Teilchenstreuung an Potenzialstufe, -schwelle, -barriere
   → Tunneleffekt
3) 1D harmonischer Oszillator

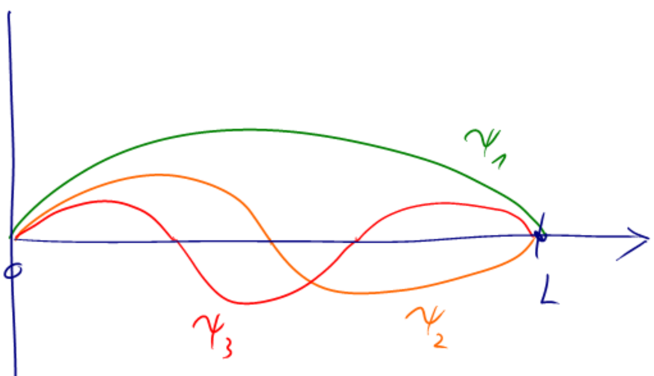
Teilchen im Kasten:



$$u(x) = \begin{cases} \infty & : \; x \notin [0,L] \\ 0 & : \; x \in [0,L] \end{cases}$$

→ stetige Energieeigenfunktion $\psi_E(x)$ verschwindet für $x \leq 0$ und $x \geq L$, und ist Lösung der freien S.-Gl. für $x \in [0,L]$

→
$$\boxed{\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} , \quad \text{wobei } k_n = \frac{\pi}{L} n \\ & \qquad\qquad n = 1, 2, 3, \ldots \end{aligned}}$$



Beachte: Beschränkung des Teilchens auf endliches Intervall $[0,L]$ führt zu gequantelten Eigenenergien

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2 , \quad n = 1, 2, \ldots$$