III. Plenum am Aktionstag (07.11.22)

Einschub: Impulsoperator als Generator von Translation

$P \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (1D)

wie wirkt $e^{-\frac{i}{\hbar} a P}$ mit $a \in \mathbb{R}$?

$$e^{-\frac{i}{\hbar} aP} \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} a\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)} = e^{-a\frac{\partial}{\partial x}}$$

$$e^{-a\frac{\partial}{\partial x}} f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}}{n!} f(x)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[(x-a)-x]^n}{n!} f^{(n)}(x) = f(x-a)$$

$\Rightarrow$ Impulsoperator ist Generator von Translation

Reminder für Taylorentwicklung:

$$f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y-y_0)^n}{n!} f^{(n)}(y_0)$$

$\leftarrow$ Entwicklung von $f(y)$ um y_0

wähle z.B. $y = x-a$ und $y_0 = x$

Zusammenhang: Dirac-Notation, Orts-/Impulsoperator, ebene Wellen

1. Ortsoperator und Ortsdarstellung in 1D

Formale Definition als Operator mit kontinuierlichen Eigenwerten in $\mathbb{R}$:

Eigenwert des Ortsoperators

$$X\,|e_x\rangle = x\,|e_x\rangle \quad , \qquad x \in \mathbb{R}$$

Ortsoperator

Eigenfunktion des Ortsoperators

Achtung! Don't confuse X and x

Eigenfunktionen bilden Orthonormalbasis:

$$\langle e_x | e_{x'} \rangle = \delta(x - x')$$

$$\int dx\, |e_x\rangle\langle e_x| = \mathbb{1}$$ ← Einheitsoperator (Übung)

Wir definieren nun eine Wellenfunktion $\psi(x)$ als Ortsdarstellung des Ket-Vektors $|\psi\rangle$: $\quad \psi(x) = \langle e_x | \psi \rangle$

Die Wirkung von X in Ortsdarstellung ist dann nichts anderes als eine einfache Multiplikation:

$$\underbrace{\langle e_x | X | \psi \rangle}_{\text{Ortsdarstellung von } X|\psi\rangle} = \langle e_x | X \underbrace{\int dx' \, |e_{x'}\rangle\langle e_{x'}|}_{\mathbb{1}} \psi \rangle = \int dx' \underbrace{\langle e_x | X | e_{x'} \rangle}_{x' \langle e_x | e_{x'} \rangle} \underbrace{\langle e_{x'} | \psi \rangle}_{\psi(x')}$$

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

8. Impulsoperator in Ortsdarstellung

Analog definieren wir formal die Eigenfunktionen und kontinuierlichen Eigenwerte des Impulsoperators:

$$P\,|e_p\rangle = p\,|e_p\rangle \quad , \quad p \in \mathbb{R}$$

$$\langle e_p | e_{p'} \rangle = \delta(p-p')$$

$$\int dp\, |e_p\rangle\langle e_p| = \mathbb{1}$$

Postulat der Quantenmechanik:
kanonische Vertauschungsrelation

$$\underbrace{[X,P]}_{\text{Kommutator}} := XP - PX = i\hbar\,\mathbb{1}$$

(mehr dazu in der Vorlesung)

↑
Analogon zur Poisson-Klammer
aus der klassischen Mechanik: $\{x,p\} = 1$

Behauptung: Die kanonische Vertauschungsrelation ist erfüllt, wenn die Wirkung des Impulsoperators in Ortsdarstellung durch die Ableitung gegeben ist. Mathematisch:

$$\langle e_x | P | e_{x'} \rangle = -i\hbar\,\delta(x-x')\,\frac{\partial}{\partial x'}$$

Beweis:

$$[X,P]|\psi\rangle = (XP-PX)|\psi\rangle = XP|\psi\rangle - PX|\psi\rangle$$

$$= X\mathbb{1}P\mathbb{1}|\psi\rangle - \mathbb{1}P\mathbb{1}X|\psi\rangle$$

$$= \int dx\int dx'\ X|e_x\rangle\langle e_x|P|e_{x'}\rangle\langle e_{x'}|\psi\rangle - \int dx\int dx'\ |e_x\rangle\langle e_x|P|e_{x'}\rangle\langle e_{x'}|X|\psi\rangle$$

$$= \int dx\int dx'\ x|e_x\rangle\left(-i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x') - \int dx\int dx'\ |e_x\rangle\left(-i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}\right)x'\psi(x')$$

$$= \int dx\ \ x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\ |e_x\rangle - \int dx\ \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\ \psi(x)\ |e_x\rangle$$

$$= \int dx\ \left[x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x)\ |e_x\rangle$$

(zeige, dass $\left[x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right] = i\hbar$ $\leftarrow$ Übung)

$$= \int dx\ (i\hbar)\ \psi(x)\ |e_x\rangle$$

$$= \int dx\ (i\hbar)\ \langle e_x|\psi\rangle\ |e_x\rangle$$

$$= i\hbar\ \underbrace{\int dx\ |e_x\rangle\langle e_x|}_{\mathbb{1}}\psi\rangle = i\hbar\ |\psi\rangle$$

$\Rightarrow$ $[X,P] = i\hbar$ da $|\psi\rangle$ beliebig qed

Nebenbemerkung: Aus $\langle e_x|P|e_{x'}\rangle = -i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}$ folgt:

$$\langle e_x|P|\psi\rangle = \langle e_x|P\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle e_x|P\int dx'\ |e_{x'}\rangle\langle e_{x'}|\psi\rangle$$

$$= \int dx'\ \underbrace{\langle e_x|P|e_{x'}\rangle}_{-i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}}\ \psi(x') = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

Mit diesem Wissen können wir nun die Eigenwertgleichung des Impulsoperators in Ortsdarstellung aufschreiben und lösen:

$$P|e_p\rangle = p|e_p\rangle \xrightarrow{\langle e_x|} \underbrace{\langle e_x|P|e_p\rangle}_{\text{Ortsdarstellung von } P|e_p\rangle} = p\,\underbrace{\langle e_x|e_p\rangle}_{\text{Ortsdarstellung von } |e_p\rangle}$$

Außerdem ist aber

$$\langle e_x|P|e_p\rangle = \int dx'\, \underbrace{\langle e_x|P|e_{x'}\rangle}_{-i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}}\langle e_{x'}|e_p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle e_x|e_p\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle e_x|e_p\rangle = p\,\langle e_x|e_p\rangle}$$

Eigenwertgleichung des Impulsoperators in Ortsdarstellung

Lösung: Ebene Wellen: $\langle e_x|e_p\rangle = \alpha\, e^{ipx/\hbar}$ (check durch Einsetzen)

Über $\delta(p-p') = \langle e_p|e_{p'}\rangle$ bekommen wir $\alpha^{-1} = \sqrt{2\pi\hbar}$ (Übung).

<u>Nebenbemerkung</u>: Wie sieht $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit $H = \frac{1}{2m}P^2$ in Ortsdarstellung aus?

$$\begin{aligned}
\langle e_x|H|\psi\rangle &= \frac{1}{2m}\langle e_x|P^2|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\langle e_x|P\mathbb{1}P\mathbb{1}|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\int dx'\int dx''\,\langle e_x|P|e_{x'}\rangle\langle e_{x'}|P|e_{x''}\rangle\langle e_{x''}|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\int dx'\int dx''\left(-i\hbar\,\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}\right)\left(-i\hbar\,\delta(x'-x'')\frac{\partial}{\partial x''}\right)\psi(x'') \\
&= \frac{1}{2m}(-\hbar^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)
\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\psi(x)$$