
Mathematische Ergänzungen zur
Vorlesung Theoretische Physik 4 -
Quantenmechanik 1

SS 2009



Harald Jeschke
Institut für Theoretische Physik
Goethe-Universität Frankfurt

0. Einführung

0.1 Mittelpunkt der Quantenmechanik: Die Schrödingergleichung

Die Gleichung, die eine entscheidende Rolle in der Quantenmechanik spielt, ist die Schrödingergleichung; sie ist eine partielle Differentialgleichung, die in der Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) \quad (1)$$

geschrieben werden kann (mit Masse m , Planckschem Wirkungsquantum $\hbar = h/(2\pi)$) wobei die Funktion $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ die physikalische Situation repräsentiert (V ist zunächst als zeitunabhängig angenommen).

Aus dieser Gleichung ergeben sich die mathematischen Probleme, die Thema dieser Vorlesung sind:

a) Ebene Wellen

Wellen spielen insgesamt in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle; monochromatische ebene Wellen sind als vollständiges Funktionensystem geeignet zur Darstellung beliebiger Lösungen der Schrödingergleichung.

b) Fourieranalyse, Diracsche Deltafunktion

Bei der Überlagerung von monochromatischen ebenen Wellen zu Wellenpaketen hat man es mit Fourierintegralen zu tun, und die Umkehrung der Fouriertransformation führt zur Diracschen Deltafunktion; beides nimmt in der Quantenmechanik einen zentralen Platz ein.

c) Hilbertraumstruktur der Quantenmechanik

Definition eines Hilbertraums: Ein Hilbertraum ist ein linearer Vektorraum über den komplexen Zahlen, in dem eine positiv-definite Hermite-sche Bilinearform (Skalarprodukt) definiert ist und der in Bezug auf die durch diese Bilinearform erzeugte Norm vollständig ist.

Die quantenmechanischen Zustände $\psi(x, y, z, t)$, d.h. die Lösungen von Gl. (1), stellen einen Vektor in einem Hilbertraum dar.

d) Differentialgleichungen

Verschiedene Lösungsmethoden (z.B. der Separationsansatz) spielen für Gl. (1) eine Rolle. Wir werden uns mit der Sturm-Liouville-Theorie beschäftigen, die einen Zusammenhang zwischen der Theorie der Operatoren in Hilberträumen und der Lösung von Differentialgleichungen herstellt.

e) Orthogonale Funktionensysteme

Insbesondere orthogonale Polynome spielen bei der Lösung der Schrödingergleichung eine wichtige Rolle, und zwar

- Hermite-Funktion beim Harmonischen Oszillator
- Laguerre-Funktion im Wasserstoffatom
- Legendre-Funktion bei Drehimpuls und Spin

0.2 Literatur

Die Vorlesung basiert unter anderem auf folgenden Monographien:

1. H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker* (Teubner, Stuttgart).
2. K. F. Riley, M. P. Hobson, S. J. Bence, *Mathematical Methods for Physics and Engineering* (Cambridge University Press).
3. G. Behrendt, E. Weimar, *Mathematik für Physiker I, II* (Physik-Verlag, Weinheim).
4. G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press).
5. T. L. Chow, *Mathematical Methods for Physicists* (Cambridge University Press).
6. C. Harper, *Analytic Methods in Physics* (Wiley-VCH, Berlin).
7. B. W. Roos, *Analytic Functions and Distributions in Physics and Engineering* (John Wiley & Sons, New York).
8. R. M. Dreizler, C. S. Lüdde, *Theoretische Physik 3* (Springer, Berlin).

Außerdem fanden folgende Skripte Verwendung:

1. Michael Karbach, *Mathematische Methoden der Physik*.

2. Andreas Ruffing, *Mathematische Methoden der Quantenmechanik*.
3. Cornelius Noack, *Hilbertraum-Kompendium*.
4. H. G. Evertz, W. von der Linden, *Quantenmechanik*.
5. Kim Boström, *Quantenmechanische Konzepte*.

0.3 Ebene Wellen

Dieses Kapitel liefert eine kurze Wiederholung von Erkenntnissen aus der Elektrodynamik über ebene Wellen und Wellenpakete, die in der Quantenmechanik wieder Verwendung finden.

In der Elektrodynamik hat man Differentialgleichungen vom Typ

$$\square f(\vec{x}, t) = 0 \quad (2)$$

mit der Abkürzung

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (3)$$

für den *d'Alembert-Operator* \square zu lösen, wobei f für irgendeine Komponente vom elektrischen Feld \vec{E} , von der magnetischen Induktion \vec{B} oder vom Vektorpotential \vec{A} steht. Die Lösungen für \vec{E} , \vec{B} und \vec{A} sind dann wegen der Coulombgleichung noch der Nebenbedingung unterworfen, dass die Divergenz verschwindet (Transversalitätsbedingung).

Allgemeine ebene Wellen

Ein allgemeiner wichtiger Lösungstyp von (2) sind ebene Wellen:

$$f(\vec{x}, t) = f(\vec{n} \cdot \vec{x} \mp ct) \quad (4)$$

für beliebige (mindestens zweifach differenzierbare) Funktionen f und dem Einheitsvektor \vec{n} in einer beliebigen Raumrichtung, mit $|\vec{n}| = 1$. Um zu zeigen, dass Gl. (4) eine Lösung der Wellengleichung ist, verwenden wir die Abkürzung

$$\xi = \vec{n} \cdot \vec{x} \mp ct \quad (5)$$

und bilden:

$$\begin{aligned} (\nabla f)_\alpha &= \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial f}{\partial \xi} n_\alpha \rightsquigarrow \nabla f = \vec{n} \frac{df}{d\xi}; & \Delta f &= \vec{n}^2 \frac{d^2 f}{d\xi^2} = \frac{d^2 f}{d\xi^2}; \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial f}{\partial \xi} (\mp c) \rightsquigarrow \mp \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{df}{d\xi} & \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} &= \frac{d^2 f}{d\xi^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

und somit

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0. \quad (7)$$

Damit ist

$$\vec{E} = \vec{E}_0 f(\vec{x}, t) \quad (8)$$

Lösung der Gleichung $\square \vec{E} = 0$; analog für \vec{B} und \vec{A} .

Zum Begriff „Ebene Wellen“

Funktionen vom Typ (4) beschreiben Wellen, deren Wellenfronten Ebenen sind: Die Punkte \vec{x} , in denen $f(\vec{x}, t)$ zu einer festen Zeit t den gleichen Wert annimmt, liegen auf einer Ebene (Hesse'sche Normalform)

$$\vec{n} \cdot \vec{x} = \text{const}, \quad (9)$$

die senkrecht zu \vec{n} steht. Je nach Wahl des Vorzeichens in (4) erhält man Wellen, die in $\pm \vec{n}$ -Richtung laufen.

Monochromatische ebene Wellen

Eine spezielle Form der ebenen Welle ist die Wahl

$$f(\xi) = \exp\left(i \frac{\omega}{c} \xi\right)$$

mit der man z.B. die elektrische Feldstärke in der Form

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} \mp \omega t)) \quad (10)$$

erhält. Dabei ist

$$\vec{k} = k\vec{n}, \quad (11)$$

und ω und \vec{k} hängen über die *Dispersionsrelation*

$$\omega^2 = k^2 c^2 \quad (12)$$

zusammen, wie man durch Einsetzen von Gl. (10) in die Wellengleichung $\square \vec{E} = 0$ sofort sieht. Eine ebene Welle vom Typ (10) nennt man *monochromatisch*, da sie nur eine (Kreis-)Frequenz ω enthält. Entsprechende Lösungen findet man für \vec{A} und \vec{B} .

Terminologie

| | | |
|------------------|-----------|------------------------------|
| Wellenvektor | \vec{k} | |
| Wellenzahl | k | $k = \vec{k} $ |
| Kreisfrequenz | ω | $\omega = c k$ |
| Frequenz | ν | $\nu = \omega/(2\pi)$ |
| Wellenlänge | λ | $\lambda = (2\pi)/k = c/\nu$ |
| Schwingungsdauer | T | $T = (2\pi)/\omega = 1/\nu$ |

Anhand von Gl. (10) sieht man, dass T die zeitliche Periodizität der Welle bei festgehaltenem Ort \vec{x} beschreibt,

$$\exp(i\omega(t+T)) = \exp(i\omega t + 2\pi i) = \exp(i\omega t); \quad (13)$$

analog gibt die Wellenlänge λ die räumliche Periodizität an:

$$\exp(ik(z+\lambda)) = \exp(ikz + 2\pi i) = \exp(ikz) \quad (14)$$

für eine Welle in z -Richtung zu fester Zeit t .

Phasengeschwindigkeit

Die Größe

$$\phi = \vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t \quad (15)$$

nennt man die *Phase* der Welle. Unter der Phasengeschwindigkeit v_{ph} versteht man die Geschwindigkeit, mit der sich ein Wellenpunkt mit vorgegebener fester Phase bewegt. Um v_{ph} zu bestimmen, betrachten wir wieder eine ebene Welle in z -Richtung und bilden das totale Differential von $\phi(z, t)$:

$$d\phi = k dz - \omega dt. \quad (16)$$

Für $\phi = \text{const.}$ folgt dann:

$$v_{ph} = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} = c; \quad (17)$$

die Phasengeschwindigkeit ist also gleich der Lichtgeschwindigkeit c .

Wellenpakete, Phasen und Gruppengeschwindigkeit

Zur Vereinfachung betrachten wir jetzt zunächst ein Wellenpaket, das sich nur in einer Koordinatenrichtung, z.B. in z -Richtung ausbreitet. $\mathbf{u}(z, t)$ sei eine Komponente von \vec{E} oder \vec{B} .

Aus $\square \mathbf{u} = 0$ folgt die Darstellung

$$\mathbf{u}(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} + \tilde{\mathbf{u}}^*(k) e^{-i(kz - \omega(k)t)} \right\} \quad (18)$$

mit $\omega(k) = ck$ für elektromagnetische Wellen, wobei $\mathbf{u}(z, t)$ so gewählt ist, dass die Überlagerung ebener Wellen reell ist, wie für eine reelle Feldkomponente erforderlich. Da aber das folgende im Prinzip auch für Wellen mit anderer Dispersion $\omega(k)$ gilt, bleiben wir zunächst bei der Schreibweise $\omega(k)$. Wir nehmen jetzt an, dass die auftretenden Wellenzahlen aus einem *Band*, d.h. einem begrenzten Bereich in der Nähe der Wellenzahl k_0 stammen. Wir wählen als Amplitudenfunktion $\tilde{\mathbf{u}}(k)$ eine Gaußfunktion

$$\tilde{\mathbf{u}}(k) = \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

mit Maximum $k = k_0$ und Breite σ , die auf $\int dk \tilde{\mathbf{u}}(k) = \mathbf{u}_0$ normiert ist. Das bedeutet auch, dass

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mathbf{u}}(k)}{\mathbf{u}_0} = \delta(k - k_0).$$

Wir setzen $\tilde{\mathbf{u}}(k)$ in das erste Integral von Gl. (18) ein und substituieren dabei $\kappa = (k - k_0)/\sigma$, d.h. $d\kappa = dk/\sigma$ und $k = k_0 + \sigma\kappa$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2} + i(kz - \omega(k)t)\right] \\ &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2} + i(k_0 + \sigma\kappa)z - i\omega(k_0 + \sigma\kappa)t\right]. \end{aligned}$$

Hier kommen wir ohne Kenntnis von $\omega(k)$ nicht weiter; aber für eine hinreichend schmale Gaußkurve (für kleines σ) können wir $\omega(k_0 + \sigma\kappa)$ nach $\sigma\kappa$ entwickeln und mit der linearen Näherung arbeiten:

$$\omega(k_0 + \sigma\kappa) \approx \omega(k_0) + v\sigma\kappa \quad \text{mit} \quad v = \left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)_{k=k_0}$$

Für elektromagnetische Wellen ist $\omega(k) = ck$ linear, und diese Näherung wird exakt. Einsetzen ergibt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 z - \omega(k_0)t)} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2} + i\sigma(z - vt)\kappa\right] \\ &= \mathbf{u}_0 e^{i(k_0 z - \omega(k_0)t)} \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(z - vt)^2\right] \end{aligned}$$

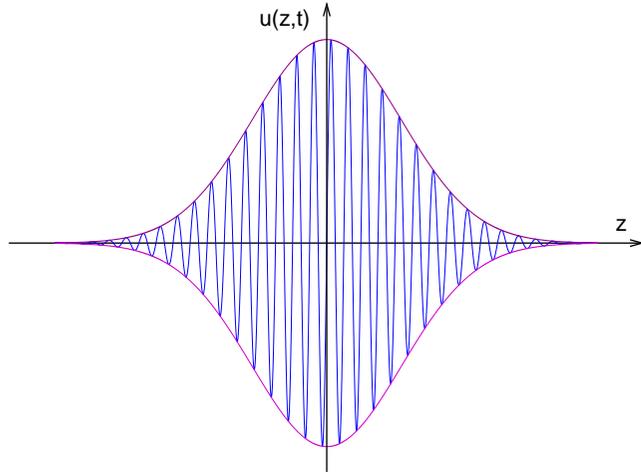


Abbildung 1:
Momentaufnahme
des Wellenpakets für eine
feste Zeit t .

(19)

wegen

$$\begin{aligned} -\frac{\kappa^2}{2} + i\sigma(z - vt)\kappa &= \frac{1}{2} \{ (i\kappa)^2 + 2i\sigma(z - vt)\kappa + \sigma^2(z - vt)^2 \} - \frac{1}{2} \sigma^2(z - vt)^2 \\ &= \frac{1}{2} (i\kappa + \sigma(z - vt))^2 - \frac{1}{2} \sigma^2(z - vt)^2 \end{aligned} \quad (20)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp \left[\frac{1}{2} (i\kappa + \sigma(z - vt))^2 \right] = \sqrt{2\pi} \quad (21)$$

Der zweite Teil von Gl. (18) liefert das konjugiert Komplexe davon. End-
ergebnis:

$$\mathbf{u}(z, t) = 2u_0 \cos[k_0 z - \omega(k_0)t] \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (z - vt)^2 \right] \quad (22)$$

Abb. 1 zeigt die z -Abhängigkeit der Lösung für eine feste Zeit t .
Die Welle

$$\propto \cos[k_0 z - \omega(k_0)t] = \cos \left[k_0 \left(z - \frac{\omega(k_0)}{k_0} t \right) \right]$$

bewegt sich mit Phasengeschwindigkeit

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k_0)}{k_0}$$

in z -Richtung. Sie wird begrenzt durch den z -abhängigen Amplitudenfaktor

$$\pm \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (z - vt)^2 \right]$$

der Breite $1/\sigma$, der sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_{\text{gr}} = v = \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)_{k=k_0}$$

in z -Richtung bewegt. Der Amplitudenfaktor formt das Wellenpaket. Im
Allgemeinen sind Phasengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeit ver-
schieden; dann gleitet die Welle durch das Wellenpaket hindurch. Im Fall
elektromagnetischer Wellen jedoch sind beide gleich der Lichtgeschwindig-
keit:

$$\begin{aligned} \text{Phasengeschwindigkeit } v_{\text{ph}} &= \frac{\omega(k)}{k} = c \\ \text{Gruppengeschwindigkeit } v_{\text{gr}} &= \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} = c \end{aligned} \quad (23)$$

Welle und Wellenpaket sind hier also starr verbunden. Die Verallgemeine-
rung auf eine allgemeine Ausbreitungsrichtung \vec{k} ist unproblematisch; das
Wellenpaket wird dann durch

$$\mathbf{u}(\vec{x}, t) = \int d^3k \tilde{\mathbf{u}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \quad (24)$$

dargestellt, und man erhält für das Wellenpaket die Gleichung

$$\text{Re } \mathbf{u}(\vec{x}, t) = \cos [\vec{k}_0 \vec{x} - \omega(\vec{k}_0)t] \int d^3k f(\vec{k} - \vec{k}_0) \cos [(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{v}t)] \quad (25)$$

mit einer um \vec{k}_0 zentrierten Amplitudenfunktion $\tilde{\mathbf{u}}(\vec{k}) = f(\vec{k} - \vec{k}_0)$.