Mathematische Methoden der Quantenmechanik

Vorlesung im Sommersemester 2001

ANDREAS RUFFING

Zentrum Mathematik
Technische Universität München
Arcisstrasse 21 / H4
D-80333 München, Germany

e-mail: ruffing@appl-math.tu-muenchen.de
http://www-m6.mathematik.tu-muenchen.de/~ruffing/
http://www-m6.mathematik.tu-muenchen.de/~ruffing/maqua

Inhaltsverzeichnis

1. Die Schrödinger-Gleichung als Eigenwertproblem

Partielle Differentialgleichungen spielen in allen Zweigen der Physik eine große Rolle. Diese Tatsache macht auch vor dem Übergang zwischen Mechanik und Quantenmechanik nicht halt. Führen wir uns die Situation vor Augen:

- **Mechanik**

Die Bewegungsgleichungen werden in der Theoretischen Mechanik in Verbindung zu den Euler-Lagrange-Gleichungen gesetzt, die ihrerseits eng an die Konzepte der Variationsrechnung gekoppelt sind. Seit der Zeit von Leonhard Euler, dem Begründer der Variationsrechnung, hat dieser Zweig der Mathematik eine stürmische Entwicklung erlebt. Für einen Einblick in die sogenannten direkten Methoden der Variationsrechnung zu erhalten, siehe z.B. das Buch von Bernard Dacorogna, "Direct Methods in the Calculus of Variations", [Da]. Auch in der aktuellen Forschung sind viele Fragen der Variationsrechnung noch offen und gestalten sich als relativ hartnäckige Probleme.

In der Physik steht die Variationsrechnung selber eher im Hintergrund und man interessiert sich in erster Linie für die Lösung der Euler-Lagrange-Gleichungen: Hierzu ist in der Theoretischen Mechanik der Grundstock gelegt worden.

- **Quantenmechanik**

Auch hier spielen partielle Differentialgleichungen eine große Rolle, wie z. B.

- Schrödinger-Gleichung (nichtrelativistische Gleichung, ohne Spin)
- Pauli-Gleichung (nichtrelativistische Gleichung, mit Spin)
- Klein-Gordon-Gleichung (relativistische Gleichung, ohne Spin)
- Dirac-Gleichung (relativistische Gleichung, mit Spin)

Jedoch kommt vom mathematischen Standpunkt aus noch eine völlig neue Komponente hinzu:

Die diskrete Struktur verschiedener Größen in der Quantenwelt erfordert, Aspekte der Funktionalanalysis zum Studium der entsprechenden partiellen Differentialgleichungen hinzuzunehmen. Grob gesagt geht es darum, die Quantisierung von physikalischen Größen im Kontext einer Eigenwerttheorie zu verstehen, ähnlich zur Situation in der Linearen Algebra.

Ausgangspunkt für viele mathematische Fragestellungen der Quantenmechanik ist die **Schrödinger-Gleichung**. Sie ist eine partielle Differentialgleichung, die in der folgenden Form geschrieben werden kann:

$$(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x,y,z))\ \psi(x,y,z,t) = i\ \frac{\partial}{\partial t}\ \psi(x,y,z,t), \tag{1}$$

wobei die Funktion $V : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ die Information über die entsprechende physikalische Situation beinhaltet (wir nehmen zunächst Zeitunabhängigkeit von V an).

Im folgenden verstehen wir unter der Menge $C^2(\mathbb{R}^n),\ n \in \mathbb{N}$, diejenigen **komplexwertigen Funktionen**, die auf ganz $\mathbb{R}^n$ definiert sind und die in jeder ihrer Variablen zweimal differenziert werden können (nicht notwendigerweise stetig differenzierbar).

Definition 1.1

Es sei $\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ zweimal partiell differenzierbar in seinen drei Variablen. Es sei fernerhin $V : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ eine stückweise stetige Funktion. $P(\mathbb{R}^3)$ bezeichne den Raum der stückweise stetigen $\mathbb{C}$-wertigen Funktionen. Die lineare Abbildung $H : C^2(\mathbb{R}^3) \to P(\mathbb{R}^3)$, gegeben durch

$$(H\psi)(x,y,z) := (-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x,y,z))\psi(x,y,z) \tag{2}$$

heißt **Hamilton-Operator** in $C^2(\mathbb{R}^3)$.

Lemma 1.2 Separation der Zeitvariablen

Es sei $\psi \in C^2(\mathbb{R}^3)$. Die Funktion $\varphi \in C^2(\mathbb{R}^4)$, gegeben durch

$$(x,y,z,t) \mapsto \varphi(x,y,z,t) := \psi(x,y,z)e^{-iEt} \tag{3}$$

mit einer Zahl $E \in \mathbb{R}$ ist genau dann Lösung der Schrödinger-Gleichung (1), sofern

$$(H\psi)(x,y,z) = E\ \psi(x,y,z) \tag{4}$$

für alle Punkte $(x,y,z) \in \mathbb{R}^3$.

Gleichung (4) wird auch **Stationäre Schrödinger-Gleichung** genannt. Die Funktion V in (1), (2) wird als **Potential** bezeichnet.

Beweis

Der Beweis kann durch direkte Rechnung sofort nachvollzogen werden: Setzt man die Funktion φ in die Schrödinger-Gleichung (1) ein, so erhält man mit der Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, gegeben durch

$$t \mapsto f(t) := e^{-iEt} \tag{5}$$

folgende Kette von Äquivalenzen:

$$(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x,y,z))\,\psi(x,y,z,t) = i\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x,y,z,t) \quad \Leftrightarrow \tag{6}$$

$$fH\psi = i\psi\frac{d}{dt}f \quad \Leftrightarrow \quad fH\psi = Ef\psi \quad \Leftrightarrow \quad H\psi = E\psi \tag{7}$$

Entscheidend ist dabei gewesen, dass die Funktion f als Exponentialfunktion keine Nullstellen besitzt und daher durch sie dividiert werden kann.

Dieses Lemma über die Variablenseparation zeigt, dass Lösungen der Schrödinger-Gleichung (1) durch das Auflösen von Gleichungen (4) gegeben werden, die von ihrer Gestalt her wie Eigenwertprobleme in der Linearen Algebra aussehen, konkret mit folgender Bedeutung:

Lineare Abbildung H **"Eigenvektor"** ψ **"Eigenwert"** E

Wir werden dieser Analogie im folgenden nachgehen, und in der Tat ist das Studium von Eigenwertproblemen des Typs (4) der Schlüssel zur stationären Schrödinger-Gleichung.

Um mit der stationären Schrödinger-Gleichung vertraut zu werden, betrachten wir im folgenden den eindimensionalen Spezialfall, an dem sich sehr viel strukturelles Vorgehen erlernen lässt:

Eindimensionale Stationäre Schrödinger-Gleichung in $C^2(\mathbb{R})$

$$(-\frac{d^2}{dx^2}\psi)(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{8}$$

Hierbei ist entsprechend dem dreidimensionalen Fall $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ als stückweise stetige Funktion vorausgesetzt, E eine reelle Zahl und die Abbildung

$$H := -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{9}$$

wird durch punktweise Anwendung auf die Funktion $\psi \in C^2(\mathbb{R})$ gegeben.

Beispiel 1.3

Das Potential V werde gegeben durch $V(x) = x^2$ und die stationäre Schrödinger-Gleichung in $C^2(\mathbb{R})$ wird zu

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{10}$$

Wir machen für ψ einen Potenzreihenansatz

$$\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \qquad x \mapsto \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \tag{11}$$

mit reellwertigen Koeffizienten c_n. Als Ergebnis erhalten wir, dass zu jedem reellen E eine solche Potenzreihenlösung vom Typ (11) existiert.

Diese Überlegungen zeigen insgesamt, dass wir für eine realistische physikalische Beschreibung noch mehr Forderungen an die Funktionen ψ stellen müssen, denn

- In der Physik hat E die Bedeutung einer Energie.
- Für das x^2-Potential ist bekannt, dass es nur diskrete E-Werte erlaubt.
- Die Funktion $\psi\overline{\psi}$ hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte.

Man wird diesen drei Forderungen dadurch gerecht, dass man die Eigenschaften der Funktion ψ und damit die Randbedingungen an die stationäre Schrödinger-Gleichung wie folgt abändert:

Eindimensionale Stationäre Schrödinger-Gleichung (SG) in $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$

$$(-\frac{d^2}{dx^2}\psi)(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{12}$$

Hierbei bedeutet $L^2(\mathbb{R})$ die Menge der messbaren Funktionen, die entlang der reellen Achse quadratintegrierbar im Sinne des Lebesgue-Integrals sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\overline{\psi(x)}dx < \infty \tag{13}$$

Die Lösung von Problemen des Typs (12) ist Gegenstand der Quantenmechanik. Um systematisch an diese Probleme herangehen zu können, bedarf es einiger mathematischer Werkzeuge, die in den folgenden Kapiteln zur Verfügung gestellt werden sollen.

Im zweiten Kapitel wird auf die Verallgemeinerung der Eigenwertsituation beim Übergang von symmetrischen linearen Abbildungen im Endlichdimensionalen auf symmetrische lineare Abbildungen in $\mathbb{C}$-Hilberträumen kurz eingegangen.

Unser Interesse richtet sich auf die Frage, inwiefern die drei Begriffe

- Eigenwerte
- Orthogonalität von Eigenfunktionen
- Symmetrie einer linearen Abbildung

im Fall allgemeiner Hilberträume noch in Verbindung zueinander stehen. Im weiteren Verlauf der Vorlesung werden wir diese Frage durch das Konzept der selbstadjungierten Operatoren beantworten, die für das Studium der Schrödinger-Gleichung unerlässlich sind.