

**week2: Orts- und Impulsraum, Teil1:  
 Eindimensionaler Fall,  $d = 1$**

Wir betrachten ein Ortsraum-Intervall  $x \in [-L, L]$  und wollen der Einfachheit halber annehmen, dass das  $L$  ganzzahlig ist,  $L \in \mathbb{N}$ . Wir wollen dieses kontinuierliche Intervall durch ein endliches, diskretes Gitter approximieren. Dazu wählen wir einen Gitterabstand

$$\Delta x := \frac{1}{M} > 0 \quad (1)$$

und wollen ebenfalls der Einfachheit halber annehmen, dass das  $M$  ganzzahlig ist,  $M \in \mathbb{N}$ . Dann diskretisieren wir das Ortsraum-Intervall  $x \in [-L, +L]$  gemäss

$$[-L, +L] \approx [-L, +L]_{\Delta x} := \{x_{-LM}, \dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots, x_{LM}\} = \{x_m\} \quad (2)$$

mit

$$x_m := \frac{m}{M} = m \Delta x, \quad m \in \{-LM, \dots, +LM\} \quad (3)$$

Für festes  $M$  bekommen wir für  $L \rightarrow \infty$  den infinite volume limit mit festem Gitterabstand  $\Delta x = 1/M > 0$  und für festes  $L$  bekommen wir für  $M \rightarrow \infty$  den continuum limit bei endlichem Volumen  $2L < \infty$ . Beide Grenzfälle möchte man in der Physik gerne separat betrachten können und mit diesem Setup geht das offensichtlich.

**Raum der Einteilchen-Wellenfunktionen**

Die Menge aller komplexwertigen Funktionen auf  $[-L, +L]_{\Delta x}$  ist gegeben durch

$$\{f \mid f : [-L, +L]_{\Delta x} \rightarrow \mathbb{C}\} = \{f(x_m)\}_{m=-LM}^{+LM} \cong \mathbb{C}^{2LM+1} \quad (4)$$

Im Kontinuumslimit  $\Delta x \rightarrow 0$  sollen das dann die quadratintegrablen Wellenfunktionen aus

$$L^2([-L, +L]) = \{f : [-L, +L] \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{-L}^{+L} |f(x)|^2 dx < \infty\} \quad (5)$$

werden, so dass wir auch im endlich dimensionalen Fall die Notation

$$L^2([-L, +L]_{\Delta x}) := \{f : [-L, +L]_{\Delta x} \rightarrow \mathbb{C}\} \cong \mathbb{C}^{2LM+1} \quad (6)$$

benutzen wollen, obwohl das  $L^2$  in dem Fall natürlich redundant ist, die Bedingung

$$\sum_{x \in [-L, +L]_{\Delta x}} |f(x)|^2 = \sum_{m=-LM}^{+LM} |f(x_m)|^2 < \infty \quad (7)$$

ist immer erfüllt wenn wir nur endlich viele  $x_m$  haben.

## Vorwärts- und Rückwärts-Ableitung, symmetrische Ableitung

Eine Ortsraum-Ableitung  $d/dx$  können wir auf verschiedene Art und Weisen diskretisieren. Es sei

$$f : [-L, +L] \rightarrow \mathbb{C} \quad (8)$$

eine beliebige Funktion. Dann sind die Vorwärts-Ableitung  $D_+$ , die Rückwärts-Ableitung  $D_-$  und die symmetrische Ableitung  $D$  folgendermassen definiert:

$$(D_+f)(x_m) := \frac{f(x_{m+1}) - f(x_m)}{x_{m+1} - x_m} = \frac{f(x_m + \Delta x) - f(x_m)}{\Delta x} \quad (9)$$

$$(D_-f)(x_m) := \frac{f(x_m) - f(x_{m-1})}{x_m - x_{m-1}} = \frac{f(x_m) - f(x_m - \Delta x)}{\Delta x} \quad (10)$$

$$(Df)(x_m) := \frac{f(x_{m+1}) - f(x_{m-1})}{x_{m+1} - x_{m-1}} = \frac{f(x_m + \Delta x) - f(x_m - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (11)$$

Das gilt zunächst mal nur für die inneren Punkte  $x_m$  mit Index  $|m| < LM$  so dass auf der rechten Seite von (9-11) alles wohldefiniert ist. Falls  $m = \pm ML$  oder  $x_m = \pm L$  ist, tauchen auf der rechten Seite von (9-11) die Funktionswerte  $f(x_{ML+1}) = f(L + \Delta x)$  und  $f(x_{-ML-1}) = f(-L - \Delta x)$  auf, die zunächst mal nicht definiert sind. Wir müssen also sagen, was da konkret für Zahlen genommen werden sollen.

### Randbedingungen

Wenn wir etwa ein Elektron in einem Kasten  $[-L, +L]$  beschreiben wollen, ist es plausibel anzunehmen, dass die Wellenfunktion am Rand und ausserhalb des Intervalls  $[-L, +L]$  verschwinden tut, also  $f(x) = 0$  für  $|x| > L$ . Im kontinuierlichen Fall macht es keinen Unterschied, ob wir  $|x| > L$  oder  $|x| \geq L$  schreiben wenn wir stetige Funktionen voraussetzen. Im diskreten Fall macht das einen Unterschied; damit das  $L^2([-L, +L]_{\Delta x})$  keine überflüssigen Komponenten enthält, definieren wir die Dirichlet-Randbedingungen durch

$$f(x_m) := 0 \quad \forall |m| > LM \quad (\text{Dirichlet Randbedingungen}) \quad (12)$$

Neben Dirichlet-Randbedingungen betrachtet man typischerweise, im wesentlichen aus rechentechnischen Gründen, periodische Randbedingungen. Im kontinuierlichen Fall sind die definiert durch  $f(+L) = f(-L)$  oder allgemeiner durch  $f(x + 2L) = f(x)$ . Wiederum, da wir keine redundanten Komponenten in unserem  $L^2([-L, +L]_{\Delta x}) \cong \mathbb{C}^{2LM+1}$  haben wollen, definieren wir im diskreten Fall

$$f(x_{+LM+1}) := f(x_{-LM}) \quad (13)$$

$$f(x_{-LM-1}) := f(x_{+LM}) \quad (\text{periodische Randbedingungen}) \quad (14)$$

oder allgemeiner, für  $x \in [-L, +L]_{\Delta x}$ ,

$$f(x + 2L + \Delta x) := f(x) \quad (\text{periodische Randbedingungen}) \quad (15)$$

Also wir fordern nicht etwa  $f(x_{+LM}) = f(x_{-LM})$ , dann wäre der Grundraum kein  $\mathbb{C}^{2LM+1}$  mehr, sondern diese beiden Koordinaten können unabhängig voneinander frei gewählt werden.

## Matrix-Darstellungen für die diskreten Ableitungen

Wir benutzen den Index ‘dc’ für ‘Dirichlet (boundary) conditions’ und ‘pc’ für periodic boundary conditions. Weiterhin wollen wir für den Moment

$$N := LM \quad (16)$$

abkürzen (das ist hier jetzt also keine Teilchenzahl in einem  $N$ -Teilchensystem). Dann haben wir die folgenden Matrix-Darstellungen für die diskretisierten Ableitungen. Mit periodischen Randbedingungen,

$$D_+^{pc} = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & +1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & +1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & -1 & +1 \\ +1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{(2N+1) \times (2N+1)} \quad (17)$$

$$D_-^{pc} = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} +1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & +1 & 0 & & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & +1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & +1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{(2N+1) \times (2N+1)} \quad (18)$$

$$D_{pc} = \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & +1 & \ddots & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (D_+^{pc} + D_-^{pc}) \quad (19)$$

Und mit Dirichlet-Randbedingungen,

$$D_+^{dc} = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & +1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & +1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & -1 & +1 \\ \mathbf{0} & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{(2N+1) \times (2N+1)} \quad (20)$$

$$D_-^{dc} = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} +1 & 0 & \cdots & 0 & \mathbf{0} \\ -1 & +1 & 0 & & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & +1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & +1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{(2N+1) \times (2N+1)} \quad (21)$$

$$D_{dc} = \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ -1 & 0 & +1 & \ddots & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & +1 \\ \mathbf{0} & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (D_+^{dc} + D_-^{dc}) \quad (22)$$

In beiden Fällen sind das also  $(2N + 1) \times (2N + 1)$  Matrizen und in beiden Fällen ist der Grundraum, auf den diese Ableitungen wirken, derselbe, nämlich

$$L^2([-L, +L]_{\Delta x}) \cong \mathbb{C}^{2N+1} \quad (23)$$

mit Dimension  $2N + 1$ .

### Hamilton-Operator für die kinetische Energie

Die kinetische Energie ist klassisch

$$H_{\text{kin}} = \frac{m}{2} v^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (24)$$

mit dem linearen eindimensionalen Impuls  $p = mv$ . In der Quantenmechanik muss der Impuls durch den Impuls-Operator ersetzt werden, das ist gerade eine Ableitung:

$$p \xrightarrow{\text{QM}} \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (25)$$

Das liefert dann den Hamilton-Operator für die kinetische Energie

$$\hat{H}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (26)$$

Wenn wir das diskretisieren, müssen wir sagen, welche Randbedingungen wir nehmen wollen. Auf den ersten Blick würde man da Dirichlet-Randbedingungen als die natürliche Wahl ansehen wollen. Das macht man jedoch nicht aus folgendem Grund: Wenn wir Dinge berechnen wollen, ist es günstig in einer Basis zu rechnen, in der das  $\hat{H}_{\text{kin}}$  diagonal ist. Bei periodischen Randbedingungen, betrachten wir gleich weiter unten, ist eine Basis aus Eigenfunktionen gerade gegeben durch die ebenen Wellen

$$f_k(x) = e^{ikx} \quad (27)$$

und die haben eine unmittelbare physikalisch intuitive Bedeutung: Bewegt sich ein Elektron mit Impuls  $p = \hbar k$  oder mit Geschwindigkeit  $v = p/m = \hbar k/m$  in Richtung der positiven  $x$ -Achse, dann wird es beschrieben durch eine solche ebene Welle  $e^{ikx}$ . Wenn wir Dirichlet-Randbedingungen wählen würden, würden wir auf das Intervall  $[-L, +L]$  lokalisierte Wellenzüge als Eigenfunktionen erzwingen, die weniger intuitiv und analytisch aufwändiger sind, wir schauen uns das dann auf dem neuen Übungsblatt ein bisschen genauer an.

## Eigenwerte und Eigenfunktionen von $D_+$ , $D_-$ und $D$ bei periodischen Randbedingungen

Wir machen den Ansatz

$$f(x_m) = e^{ikx_m} =: f_k(x_m) \quad (28)$$

mit einem noch zu bestimmenden  $k$ . Das  $k$  hat dann die Bedeutung einer Wellenzahl, das ist  $2\pi$  durch Wellenlänge, und wenn man die mit  $\hbar$  multipliziert, hat das nach der de Broglie Beziehung  $p = h/\lambda = h/(2\pi) \cdot (2\pi)/\lambda = \hbar \cdot k$  die Bedeutung von Impuls. Diese  $k$ 's, die wir jetzt also bestimmen werden, bilden dann den Impulsraum, der wird dann genauso viel Punkte haben wie der Ortsraum,  $2N + 1$  Stück.

Für  $|m| < LM = N$  bekommen wir

$$(D_+ f_k)(x_m) = \frac{f_k(x_m + \Delta x) - f_k(x_m)}{\Delta x} = \frac{e^{+ik\Delta x} - 1}{\Delta x} e^{ikx_m} =: \lambda_k^+ f_k(x_m) \quad (29)$$

$$(D_- f_k)(x_m) = \frac{f_k(x_m) - f_k(x_m - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{1 - e^{-ik\Delta x}}{\Delta x} e^{ikx_m} =: \lambda_k^- f_k(x_m) \quad (30)$$

$$(D f_k)(x_m) = \frac{f_k(x_m + \Delta x) - f_k(x_m - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{e^{+ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} e^{ikx_m} =: \lambda_k f_k(x_m) \quad (31)$$

mit

$$\lambda_k^+ = \frac{e^{+ik\Delta x} - 1}{\Delta x} \quad (32)$$

$$\lambda_k^- = \frac{1 - e^{-ik\Delta x}}{\Delta x} \quad (33)$$

$$\lambda_k = \frac{e^{+ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = i \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x} \quad (34)$$

Damit man für die Ableitungen an den Randpunkten  $x_{\pm N} = x_{\pm ML} = \pm ML/M = \pm L$  genau dieselben  $\lambda$ 's bekommt, müssen die  $f_k$ 's genau den periodischen Randbedingungen (13,14) genügen. Das heisst,

$$f_k(+L + \Delta x) \stackrel{!}{=} f_k(-L) \quad (35)$$

$$f_k(-L - \Delta x) \stackrel{!}{=} f_k(+L) \quad (36)$$

oder

$$e^{+ik(L+\Delta x)} = e^{-ikL} \quad (37)$$

$$e^{-ik(L+\Delta x)} = e^{+ikL} \quad (38)$$

Die zweite Gleichung ist gerade das komplex konjugierte der ersten Gleichung, also redundant, und die erste Gleichung (37) liefert

$$e^{ik(\Delta x + 2L)} = 1 \quad (39)$$

Das bedeutet

$$k(\Delta x + 2L) = 2\pi j, \quad j \in \mathbb{Z} \quad (40)$$

oder mit  $\Delta x = 1/M$ ,

$$k = k_j = 2\pi \frac{j}{\frac{1}{M} + 2L} = 2\pi \frac{jM}{2LM + 1} = 2\pi \frac{jM}{2N + 1} \quad (41)$$

Die Eigenfunktionen sind dann, wenn wir für den Moment das  $j$  anstatt das  $k_j$  als Index wählen,

$$f_j(x_m) = e^{ik_j x_m} = e^{i2\pi \frac{jM}{2N+1} \frac{m}{M}} = e^{i2\pi \frac{jm}{2N+1}} \quad (42)$$

Da  $m$  ganzzahlig ist, gilt offensichtlich

$$f_{j+2N+1}(x_m) = e^{i2\pi \frac{(j+2N+1)m}{2N+1}} = e^{i2\pi \frac{jm}{2N+1}} \times e^{i2\pi m} = e^{i2\pi \frac{jm}{2N+1}} = f_j(x_m) \quad (43)$$

und es kommen nur  $2N + 1$  verschiedene  $j$ -Werte in Frage, wir wählen

$$j \in \{-N, \dots, +N\} \quad (44)$$

Die  $k_j$  nehmen dann die folgenden Werte an:

$$k_j = 2\pi M \frac{j}{2N + 1}$$

$$\Rightarrow k_j \in \{k_{-N}, \dots, k_{-1}, k_0, k_{+1}, \dots, k_{+N}\} \subset [-\pi M, +\pi M] \quad (45)$$

mit  $k_0 = 0$  und

$$k_{\pm N} = \pm 2\pi M \frac{N}{2N + 1} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \pm \pi M = \pm \frac{\pi}{\Delta x} \quad (46)$$

Der Abstand zwischen zwei  $k_j$ 's ist

$$k_{j+1} - k_j = 2\pi M \frac{1}{2N + 1} = \frac{2\pi}{2L + 1/M} =: \Delta k \quad (47)$$

Im Kontinuumslimes  $\Delta x \rightarrow 0$  oder  $M \rightarrow \infty$  wird das zu

$$\Delta k \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \frac{2\pi}{2L} \quad (48)$$

Schreiben wir noch die normierten Eigenfunktionen hin: Für  $j, \ell \in \{-N, \dots, +N\}$  bekommen wir die Skalarprodukte

$$(f_j, f_\ell) = \sum_{m=-N}^N \overline{f_j(x_m)} f_\ell(x_m) = \sum_{m=-N}^N e^{-ik_j x_m} e^{+ik_\ell x_m} = \sum_{m=-N}^N e^{-i(k_j - k_\ell)x_m} \quad (49)$$

Mit

$$(k_j - k_\ell)x_m = 2\pi M \frac{j-\ell}{2N+1} \frac{m}{M} = 2\pi \frac{(j-\ell)m}{2N+1} \quad (50)$$

folgt dann

$$(f_j, f_\ell) = \sum_{m=-N}^N e^{-i2\pi \frac{(j-\ell)m}{2N+1}} = (2N+1) \times \delta_{j,\ell} \quad (51)$$

Also sind die normierten Eigenfunktionen gegeben durch

$$e_{k_j}(x_m) := \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \times e^{ik_j x_m} \quad (52)$$

mit  $N = ML$ ,

$$x_m = m \Delta x = \frac{m}{M} \quad (53)$$

$$k_j = j \Delta k = \frac{2\pi j}{2L + 1/M} \quad (54)$$

$$-N = -ML \leq m, j \leq +ML = +N \quad (55)$$

Fassen wir die Ergebnisse in dem folgenden Theorem zusammen:

**Theorem 2.1:** Ortsraum  $\{x_m\}_{m=-N}^N$  und Impulsraum  $\{k_j\}_{j=-N}^N$  seien gegeben durch (53-55). Dann bilden die  $2N + 1$  Funktionen oder Vektoren

$$e_{k_j}(x_m) = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} e^{ik_j x_m} \quad (56)$$

eine Orthonormalbasis des  $\mathbb{C}^{2N+1}$ , es gilt mit dem Standardskalarprodukt  $(\cdot, \cdot)$  im  $\mathbb{C}^{2N+1}$

$$(e_{k_r}, e_{k_s}) = \sum_{m=-N}^N \bar{e}_{k_r}(x_m) e_{k_s}(x_m) = \delta_{k_r, k_s} \quad (57)$$

Weiterhin gelten die Vollständigkeitsrelationen

$$\sum_{j=-N}^N e_{k_j}(x_\ell) \bar{e}_{k_j}(x_m) = \delta_{x_\ell, x_m} \quad (58)$$

Die  $e_{k_j}$  sind Eigenfunktionen für die diskretisierten Ableitungen mit periodischen Randbedingungen, es gilt insbesondere für die symmetrische diskrete Ableitung  $D_{pc}$  gegeben durch (19)

$$D_{pc} e_{k_j} = \lambda_{k_j} e_{k_j} \quad (59)$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda_{k_j} = i \frac{\sin(k_j \Delta x)}{\Delta x} \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} i k_j = i \frac{2\pi j}{2L}, \quad j \in \mathbb{Z} \quad (60)$$

und die  $e_{k_j}$  sind  $(2L + \Delta x)$ -periodische Funktionen, es gilt  $e_{k_j}(x_m + 2L + \Delta x) = e_{k_j}(x_m)$ . Für den Normierungsfaktor  $1/\sqrt{2N+1}$  gilt die Beziehung

$$\frac{1}{2N+1} = \frac{\Delta x \Delta k}{2\pi} \quad (61)$$

mit

$$\begin{aligned}\Delta x &= x_{m+1} - x_m = \frac{m+1}{M} - \frac{m}{M} = \frac{1}{M} \\ \Delta k &= k_{j+1} - k_j = \frac{2\pi(j+1)}{2L+1/M} - \frac{2\pi j}{2L+1/M} = \frac{2\pi}{2L+1/M} .\end{aligned}\quad (62)$$

### Kontinuumslimes und Infinite Volume Limit

Schauen wir uns noch die Grenzfälle  $\Delta x \rightarrow 0$  und  $L \rightarrow \infty$  an. Die Vollständigkeitsrelationen (58) sehen so aus:

$$\frac{1}{2N+1} \sum_{j=-N}^N e^{ik_j(x_\ell - x_m)} = \Delta x \sum_{j=-N}^N \frac{\Delta k}{2\pi} e^{ik_j(x_\ell - x_m)} = \delta_{x_\ell, x_m} \quad (63)$$

oder

$$\sum_{j=-N}^N \frac{\Delta k}{2\pi} e^{ik_j(x_\ell - x_m)} = \frac{1}{\Delta x} \delta_{x_\ell, x_m} \quad (64)$$

Im Limes  $\Delta x \rightarrow 0$  definiert die rechte Seite von (64) eine sogenannte  $\delta$ -Distribution, man schreibt

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \delta_{x_\ell, x_m} = \delta(x_\ell - x_m) \quad (65)$$

Auf der linken Seite von (64) geht das  $N = ML = L/\Delta x$  nach unendlich, und die  $k_j$  sind gegeben durch

$$k_j \stackrel{\Delta x \rightarrow 0}{=} \frac{2\pi j}{2L} \quad (66)$$

Wir haben dann, mit  $x = x_\ell$  und  $y = x_m$ ,

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{\Delta k}{2\pi} e^{ik_j(x-y)} = \delta(x-y) , \quad x, y \in [-L, +L] \quad (67)$$

Und im Limes Volumen nach unendlich,  $L \rightarrow \infty$ , ist die  $j$  oder  $k_j$ -Summe auf der linken Seite von (67) eine Riemannsche Summe für ein  $k$ -Integral und wir bekommen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} = \delta(x-y) , \quad x, y \in (-\infty, +\infty) \quad (68)$$