II.2. Operatoren im Hilbertraum

allgemein:
Quantenmechanische „Observablen" (physikalische Meßgrößen) wie z.B. Impuls, Ort, Energie, Drehimpuls werden dargestellt durch (lineare, hermitesche) Operatoren

Beispiele: $\hat{\underline{p}}$ Impulsoperator (Vektor-operator)
$\hat{\underline{r}}$ Ortsoperator
$\hat{H}$ Hamiltonoperator → Energie-

$\hat{H}|\psi\rangle = \underbrace{E}_{\text{Energie-}}|\psi\rangle$ zeitunabhängige SG

Die Wirkung dieser Beispieloperatoren ($\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{r}}, \hat{H}$) hängt davon ab, ob man in der Orts- oder Impulsdarstellung arbeitet!

allgemein:
$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$: $\boxed{\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle} \in \mathcal{H}$ ← darstellungs-unabhängig!

Ortsdarstellung:
$\hat{\underline{r}} \to \underline{r}$
$\hat{\underline{p}} \to \frac{\hbar}{i}\nabla$
$\hat{H}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}) \to \hat{H}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla)$

Impulsdarstellung
$\hat{\underline{r}} \to -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}$
$\hat{\underline{p}} \to \underline{p}$

sieht man z.B. bei der Betrachtung der Erwartungswerte!

Jetzt: Abstrakte Definition dieser Operatoren

Ausgangspunkt: $\langle \underline{r} | p \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$ Impulszustand in der Ortsdarstellung! (analog: $\langle \underline{r} | \varphi \rangle$ $\varphi(\underline{r})$)

$$\hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \underline{r} | p \rangle = p \langle \underline{r} | p \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle = p \langle \underline{r} | p \rangle$$ „multiplizieren" von links mit $|r\rangle$ und integrieren!

$$\Rightarrow \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle = p \underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|}_{\hat{1}} p \rangle = p |p\rangle$$

$$\Leftrightarrow \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \underline{r} | p \rangle = p |p\rangle$$

Ablesen $\Rightarrow$ $\hat{p} = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \underline{r}|$ (*) neue Definition des Impulsoperators

und $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$ Eigenwertgleichung

Folgerungen:

- $\langle p' | \hat{p} | p \rangle \underset{\text{Eigenwertgleichung}}{=} p \langle p' | p \rangle = p\, \delta(p - p')$

- Anwendung von (*) auf Impuls-Eigenzustände

$$\hat{\underline{p}}|\underline{p}\rangle = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i}\nabla \underbrace{\langle \underline{r}|\underline{p}\rangle}_{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar\, \underline{p}\cdot\underline{r}}}$$

$$= \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\, \underline{p} \langle \underline{r}|\underline{p}\rangle = \underline{p} \underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}|}_{1} \underline{p}\rangle$$

$$= \underline{p}\, |\underline{p}\rangle$$

- Anwendung von (*) auf Ortszustände bzw. Ortsraum-Wellenfunktion

$$\hat{\underline{p}}|\underline{r}'\rangle = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i}\nabla \underbrace{\langle \underline{r}|\underline{r}'\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')} \qquad ??$$

besser:

$$\langle \underline{r}'|\hat{\underline{p}}|\psi\rangle = \int d\underline{r}\, \underbrace{\langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')} \frac{\hbar}{i}\nabla \underbrace{\langle \underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}'}\psi(\underline{r}')$$

Analog findet man für den Ortsoperator

$$\hat{\underline{r}} = \int d\underline{p}\, |\underline{p}\rangle \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}\right) \langle \underline{p}|$$

$$\hat{\underline{r}}|\underline{r}\rangle = \underline{r}|\underline{r}\rangle \quad ; \quad \langle \underline{r}|\hat{\underline{r}}|\underline{r}'\rangle = \underline{r}'\delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

Hamilton-Operator:

$\hat{H} = \hat{H}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}})$ „Operator-Funktion"

Zeitunabhängige SG: $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

$|\varphi_n\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}$ zum Eigenwert E_n

Ortsdarstellung: $\hat{H} \to \hat{H}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla)$

$\hat{H}\,\varphi_n(\underline{r}) = E_n\,\varphi_n(\underline{r})$ mit $\varphi_n(\underline{r}) = \langle\underline{r}|\varphi_n\rangle$

„multipliziere" von links mit $|r\rangle$ und integriere

$$\int d\underline{r}\,|\underline{r}\rangle\,\hat{H}(\underline{r}, \tfrac{\hbar}{i}\nabla)\,\langle r|\varphi_n\rangle = \int d\underline{r}\,|\underline{r}\rangle\,E_n\,\langle\underline{r}|\varphi_n\rangle$$

$$= E_n \underbrace{\int d\underline{r}\,|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}_{\hat{1}}\,\varphi_n\rangle$$

$$= E_n|\varphi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \int d\underline{r}\,|\underline{r}\rangle\,\hat{H}(\underline{r}, \tfrac{\hbar}{i}\nabla)\,\langle\underline{r}|$$

Wir führen nun noch eine neue Darstellung ein:

nehme dazu an, daß die Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ eine diskrete, vollständige Basis bilden!

$\sum^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \hat{1}$ Vollständigkeitsrelation

$n=0$

$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{mn}$ Kronecker-Delta

Jetzt:

$\hat{H} = \hat{H}\hat{1} = \hat{H}\sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$

benutzte $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}$ Darstellung über die Energie-Eigenzustände „Energiedarstellung"

allgemein: Spektraldarstellung (Darstellung eines Operators über seine Eigenzustände)

III.3. Erste Rechenregeln für Operatoren

Lineare Operatoren:

$\hat{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle)$ $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$= \lambda_1 \hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{A}|\psi_2\rangle$

wie in der Linearen Algebra Anwendung von Matrizen auf Operatoren

$(\hat{A}+\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$

$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$

Im allgemeinen ist $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$

Kommutator:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

speziell: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ „Die Observablen A und B vertauschen"

Adjungierter Operators

sei $\hat{A}|\psi_2\rangle = |\phi\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle \psi_1 | \phi \rangle}_{\text{Skalarprodukt}} = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

ergibt eine (komplexe) Zahl

„Matrixelement" von $\hat{A}$ mit den Zuständen $\langle\psi_1|$ und $|\psi_2\rangle$

Beachte: In $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$ wirkt $\hat{A}$ „nach rechts", d.h. auf $|\psi_2\rangle$!

(alternative Schreibweise $\langle \psi_1 | \hat{A}\, \psi_2 \rangle$)

Der zu $\hat{A}$ adjungierte Operator $\hat{A}^+$ ist definiert durch die Relation

$$\textcircled{*} \quad \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

adjungierter Operator

In Worten:
Zieht man im Matrixelement den Operator „nach vorne", so geht dieser Operator in seinen adjungierten Operator über!

Bemerkungen.

i) Ortsdarstellung von (*)

$$\mathbb{1} = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \mathbb{1} \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r}\, \underbrace{\langle \psi_1 | \underline{r} \rangle}\langle \underline{r} | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r}\, \psi_1^*(\underline{r}) \left(A_{\underline{r}} \psi_2(\underline{r}) \right)$$

$$\overset{!}{=} \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r} \left(\hat{A}^+ \psi_1(\underline{r}) \right)^* \psi_2(\underline{r})$$

ii) Alternativ zu (*) kann man den adjungierten Operator auch wie folgt einführen:

$$\hat{A} | \psi_2 \rangle = | \Phi \rangle$$

$$\Longleftrightarrow \langle \psi_2 | \hat{A}^+ = \langle \hat{A}^+ \psi_2 | = \langle \Phi |$$

Wirkung nach links

iii) Einige Regeln für adjungierte Operatoren.

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle\psi|\phi\rangle\\ &=\langle\phi|\psi\rangle^*\end{aligned}}$$

Grund: $\langle\psi_1|\underbrace{\hat{A}|\psi_2\rangle}_{|\phi\rangle} = \langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle$

$$= \langle\psi_2|\hat{A}^+\psi_1\rangle^*$$

$$= \langle(\hat{A}^+)^+\psi_2|\psi_1\rangle^*$$

$$= \left(\langle\psi_1|(\hat{A}^+)^+\psi_2\rangle^*\right)^*$$

$$= \langle\psi_1|(\hat{A}^+)^+\psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow (\hat{A}^+)^+ = \hat{A} \qquad \text{q.e.d.}$$

$$(\lambda\hat{A})^+ = \lambda^*\hat{A}^+$$

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$$

„<u>Spezialfall</u>"

- extrem wichtig für solche Operatoren, die zu wirklichen physikalischen Meßgrößen gehören!

Ein <u>selbstadjungierter</u> bzw. hermitescher Operator ist dadurch definiert, daß $\boxed{\hat{A}^+ = \hat{A}}$

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle$$

Führe schließlich noch ein:

- Inverser Operator:

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}$$

inverser Operator

- Unitärer Operator: $\hat{A}^+ = \hat{A}^{-1}$

III.3. Matrixelemente und Erwartungswert eines Operators

Matrixelement: $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{A}^+\psi_1\rangle^*$$

Spezialfall: $\hat{A}$ ist hermitesch ($\hat{A}^+ = \hat{A}$)

$$\Rightarrow \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle^*$$

Erwartungswert

$\Leftrightarrow$ Matrixelement eines Operators zwischen zwei gleichen Zuständen!

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$

$$= \langle\hat{A}^+\psi|\psi\rangle$$

Dabei wurde vorausgesetzt, daß $|\psi\rangle$ normiert!

d.h. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

sonst: $\langle\hat{A}\rangle = \dfrac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

Sei $\hat{A}$ hermitesch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle^* \;!$$
$$= \langle \hat{A} \rangle^*$$

$\Rightarrow$ Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind immer reell!

Das muss auch für jede quantenmechan. Meßgröße (Observable) gelten!

$\Rightarrow$ Quantenmechanische Observablen werden durch hermitesche Operatoren dargestellt !!!