9.2 ....

e) Darstellung von Operatoren

- diskrete Basis ....
- kont. Basis: VONS $\{\dots|\varphi_\lambda\rangle\dots\}$ mit $1 = |\varphi_\lambda\rangle\langle\varphi_\lambda|$

$$\boxed{\begin{aligned} &A = \iint d\lambda\, d\lambda'\; A(\lambda,\lambda')\, |\varphi_\lambda\rangle\langle\varphi_{\lambda'}| \quad \text{mit } A(\lambda,\lambda') = \langle\varphi_\lambda|A|\varphi_{\lambda'}\rangle \quad (9.48) \\ &A|\psi\rangle = |\chi\rangle \longrightarrow \int A(\lambda,\lambda')\underbrace{c(\lambda')}_{\langle\varphi_{\lambda'}|\psi\rangle}d\lambda' = \underbrace{b(\lambda)}_{\langle\varphi_\lambda|\chi\rangle} \quad (9.49) \\ &(AB)(\lambda,\lambda') = \int d\lambda''\; A(\lambda,\lambda'')\, B(\lambda'',\lambda') \quad (9.50) \end{aligned}}$$

- Bsp: (ii) Hamilton Operator H
  (1) diskretes VONS ....

(2) Ortsdarstellung:

$$\left.\begin{aligned} \langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}|\underline{r}'\rangle &= \underline{r}'\langle\underline{r}|\underline{r}'\rangle = \underline{r}'\,\delta(\underline{r}-\underline{r}') \\ \langle\underline{r}|\hat{\underline{p}}|\underline{r}'\rangle &= \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_r\,\delta(\underline{r}-\underline{r}') \end{aligned}\right\} \quad (9.53)$$

$$\left.\begin{aligned} \langle\underline{r}|H|\underline{r}'\rangle &= \langle\underline{r}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\underline{r}})|\underline{r}'\rangle \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}_r^2 + V(\underline{r}')\right]\delta(\underline{r}-\underline{r}') \\ \langle\underline{r}|H\psi\rangle &= \int d^3r'\,\langle\underline{r}|H|\underline{r}'\rangle\,\psi(\underline{r}') \\ &\qquad 1 = \int d^3r'\,|\underline{r}'\rangle\langle\underline{r}'| \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}_r^2 + V(\underline{r})\right]\psi(\underline{r}) \end{aligned}\right\} \quad (9.54)$$

(3) Impulsdarstellung:

$$\left.\begin{aligned} \langle p|\hat{p}|p'\rangle &= p'\langle p|p'\rangle = p'\,\delta(p-p') \\ \langle p|\hat{r}|p'\rangle &\underset{(4.10)}{=} i\hbar\nabla_p\,\delta(p-p') \end{aligned}\right\} (9.55)$$

<u>damit:</u>

$$\left.\begin{aligned} \text{(I)}\quad \langle p|H|p'\rangle &= \langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})|p'\rangle \\ &= \left[\frac{p^2}{2m} + V(i\hbar\nabla_p)\right]\delta(p-p') \\ \langle p|H\underset{\uparrow}{}\psi\rangle &= \int d^3p'\,\langle p|H|p'\rangle\underbrace{\langle p'|\psi\rangle}_{\bar{\psi}(p')} \\ 1 = \int d^3p'\,|p'\rangle\langle p'| \quad & \\ &= \left[\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V(i\hbar\nabla_p)}_{\text{„Differentialoperator"}}\right]\bar{\psi}(p) \end{aligned}\right\} (9.56)$$

$$\begin{aligned} \text{(II)}\ \text{mit}\ \langle p\underset{\uparrow 1}{|}V(\hat{r})\underset{\uparrow}{|}p'\rangle &= \iint d^3r\,d^3r'\,\langle p|r\rangle\langle r|V(\hat{r})|r'\rangle\langle r'|p'\rangle \\ &= \int\frac{d^3r\,d^3r'}{(2\pi\hbar)^3}\,V(r')\,\delta(r-r')\,e^{\frac{i}{\hbar}(p'\cdot r' - p\cdot r)} \\ &= \int\frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3}\,V(r)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')\cdot r} \\ &= \bar{V}(p-p') \end{aligned}$$

$$\left.\begin{aligned} \longrightarrow\ \langle p|H|p'\rangle &= \frac{p^2}{2m}\,\delta(p-p') + \bar{V}(p-p') \\ \langle p|H\underset{\uparrow 1}{}\psi\rangle &= \frac{p^2}{2m}\,\bar{\psi}(p) + \underbrace{\int d^3p'\,\bar{V}(p-p')\,\bar{\psi}(p')}_{\substack{\text{Integraloperator} \\ \text{„Faltung"}}} \end{aligned}\right\} (9.57)$$

• EW-Problem: $A|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle$ (9.58)

... kompakte Schreibweise

Darstellung in $\{\dots|\varphi_n\rangle\dots\}$: $\langle\varphi_n|$ (9.58) & $\mathbb{1}$ einschieben

$$\boxed{\sum_m A_{nm}\, c_m^{(i)} = a_i\, c_n^{(i)}\,, \quad c_n^{(i)} = \langle\varphi_n|a_i\rangle} \quad (9.59)$$

... EW-Problem in Matrizen-form!

kont. Basis:

$$\boxed{\int d\lambda'\, A(\lambda,\lambda')\, c^{(i)}(\lambda') = a_i\, c^{(i)}(\lambda)\,, \quad c^{(i)}(\lambda) = \langle\varphi_\lambda|a_i\rangle} \quad (9.60)$$

• Spektraldarstellung von A: nimm VONS der EV $\{\dots|a_n\rangle\dots\}$

$$A_{nm} = \langle a_n|A|a_m\rangle = a_m\,\langle a_n|a_m\rangle$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} A_{nm} &= a_n\,\delta_{nm} \\ A &= \sum_n a_n\,|a_n\rangle\langle a_n| \end{aligned}} \quad (9.61)$$

(vgl. Matrizen / Tensoren)

analog: $A|a(\lambda)\rangle = a(\lambda)\,|a(\lambda)\rangle$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} A(\lambda,\lambda') &= a(\lambda)\,\delta(\lambda-\lambda') \\ A &= \int d\lambda\; a(\lambda)\,|a(\lambda)\rangle\langle a(\lambda)| \end{aligned}} \quad (9.62)$$

• **Bsp:**

(i) adjungierter Operator: A^+

$$(A^+)_{nm} = \langle\varphi_n|A^+|\varphi_m\rangle = \langle A\varphi_n|\varphi_m\rangle = \langle\varphi_m|A\varphi_n\rangle^*$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{(A^+)_{nm} = A^*_{mn}} \quad (9.63)$$

[vgl. transponierte Matrix: $(T^t)_{ij} = T_{ji}$]

(ii) hermitesche Operatoren: $A = A^+$

$$\xrightarrow{(9.63)} \boxed{A_{nm} = A^*_{mn}} \quad (9.64)$$

[vgl. symmetrische Matrixe: $T_{ij} = T_{ji}$]

EW-Problem $\longrightarrow$ reelle EW, VONS von EV

(iii) unitäre Operatoren: $U^{-1} = U^+$

$$\boxed{(U^{-1})_{nm} = U^*_{mn} = (U^+)_{nm}} \quad (9.65)$$

[vgl. $\underline{D} \in O(3)$: $(D^{-1})_{ij} = D_{ji}$

$\underline{\underline{D}}^{-1} = \underline{\underline{D}}^t$!]

EW-Problem $\longrightarrow$ VONS von EV

f) <u>Transformationstheorie</u>:

- Motivation: Transformiere Darstellung bzgl. $\{\dots|\varphi_m\rangle\dots\}$ nach $\{\dots|\varphi_n'\rangle\dots\}$

$$|\varphi_n'\rangle = 1\,|\varphi_n'\rangle = \sum_m |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\varphi_n'\rangle$$

$$\longrightarrow \boxed{|\varphi_n'\rangle = \sum_m |\varphi_m\rangle\, U_{mn} \quad \text{mit } U_{mn} = \langle\varphi_m|\varphi_n'\rangle} \quad (9.66)$$

Es gilt:

$$\boxed{\begin{gathered} \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{U}}^+ = \underline{\underline{U}}^+\underline{\underline{U}} = 1 \Longleftrightarrow \underline{\underline{U}}^+ = \underline{\underline{U}}^{-1} \\ \sum_n U_{mn}(U^+)_{nl} \overset{(9.63)}{=} \sum_n U_{mn}\, U^*_{ln} \overset{!}{=} \delta_{ml} \end{gathered}} \quad (9.67)$$

$\underline{\underline{U}}$ ... unitäre Matrix

vermittelt unitäre Trafo

Beweis: $\sum_n U_{mn} U^*_{ln} = \sum_n \langle \varphi_m | \varphi'_n \rangle \langle \varphi_l | \varphi'_n \rangle^*$

$$= \underline{\sum_n} \langle \varphi_m | \underbrace{\varphi'_n \rangle \langle \varphi'_n}_{=\mathbb{1}} | \varphi_l \rangle = \langle \varphi_m | \varphi_l \rangle = \delta_{ml} \quad \text{qed}$$

- Trafo zwischen Darstellungen von $|\psi\rangle$:

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} c'_n = \langle \varphi'_n | \psi \rangle \\ c_m = \langle \varphi_m | \psi \rangle \end{array}\right\} \longleftrightarrow \left\{\begin{array}{l} c'_n \stackrel{(i)}{=} \sum_m c_m U^*_{mn} = \sum_m (U^+)_{nm} c_m \\ c_m \stackrel{(ii)}{=} \sum_n U_{mn} c'_n \end{array}\right.} \quad (9.68)$$

Beweise:

(i) $\langle \varphi'_n | \psi \rangle = \sum_m \underbrace{\langle \varphi'_n | \varphi_m \rangle}_{\langle \varphi_m | \varphi'_n \rangle^* = U^*_{mn}} \underbrace{\langle \varphi_m | \psi \rangle}_{c_m}$

$\mathbb{1}$

(ii) $c_m = \sum_n U_{mn} c'_n = \underline{\sum_{nl}} \underbrace{U_{mn} c_l U^*_{ln}}_{=\delta_{ml}} = c_m$

- Trafo zwischen Darstellungen von A:

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} A'_{nm} = \langle \varphi'_n | A | \varphi'_m \rangle \\ A_{kl} = \langle \varphi_k | A | \varphi_l \rangle \end{array}\right\} \longleftrightarrow \left\{\begin{array}{l} A'_{nm} \stackrel{(i)}{=} \sum_{ij} A_{ij} U^*_{in} U_{jm} = \sum_{ij} (U^+)_{ni} A_{ij} U_{jm} \\ A_{ij} \stackrel{\text{oB}}{=} \sum_{nm} U_{in} A'_{nm} (U^+)_{mj} \end{array}\right.} \quad (9.69)$$

Beweis zu (i): $\langle \varphi'_n | A | \varphi'_m \rangle = \sum_{ij} \underbrace{\langle \varphi'_n | \varphi_i \rangle}_{U^*_{in}} \underbrace{\langle \varphi_i | A | \varphi_j \rangle}_{A_{ij}} \underbrace{\langle \varphi_j | \varphi'_m \rangle}_{U_{jm}}$ qed

$\mathbb{1}$ $\mathbb{1}$

- analog: (i) für kontinuierliche VONS
  (ii) für Wechsel zwischen kont. und diskreten VONS

- konkreter Fall: „$\underline{\mathbb{1}}$ einschieben" !

- Bsp: Wechsel von Orts- nach Impulsdarstellung:

$$U(\underline{r}, p) = \langle \underline{r} | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot \underline{r}}$$

$$\int d^3p\, U(\underline{r},p)\, U^+(p,\underline{r}') = \int d^3p\, U(\underline{r},p)\, \underbrace{U^*(\underline{r}',p)}_{\langle \underline{r}'|p\rangle^*}$$

$$= \int d^3p\, \langle \underline{r}|p\rangle\langle p|\underline{r}'\rangle = \langle \underline{r}|\underline{r}'\rangle = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$\underbrace{\int d^3p \ldots |p\rangle\langle p|}_{\mathbb{1}}$$

10. Formale Grundlagen der QT

- zurück zur Physik

10.1. Die Axiome der QT

- Formulierung mit Ket-Vektoren $\longrightarrow$ s. Blatt

10.2. Vollständiger Satz kommutierender Observabler

- Motivation: Klass. Mechanik: Observable $\underline{r}, p$ bestimmen Zustand!

  QT : $|\psi\rangle$ " "

  eindeutige Präparation eines $|\psi\rangle$?

- Idee: Messe Observable $A \longrightarrow |\psi\rangle = |a_n\rangle$ ... EV von A zu EW a_n

  Fall 1: a_n ... nichtentarteter EW

  $\longrightarrow |\psi\rangle = |a_n\rangle$ eindeutig beschrieben durch Quantenzahl a_n

  Fall 2: a_n ... g-fach entarteter EW mit EV $|a_n^{(i)}\rangle$, $i = 1, \ldots, g$

  weitere Info nötig