

English Summary :
 2.2 Operators in Hilbert space

eigenvalue eq. of momentum op. $\hat{p}|\underline{p}\rangle = \underline{p}|\underline{p}\rangle$

position representation $\psi(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \psi \rangle$

momentum representation $\hat{\psi}(\underline{p}) = \langle \underline{p} | \psi \rangle$

completeness relation:

$$\langle \underline{r} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \underbrace{\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}_{\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle} \langle \underline{p} | \psi \rangle \Rightarrow \begin{cases} \int d^3p |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| = 1 \\ \int d^3r |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = 1 \end{cases}$$

class. obs. $F(\underline{r}, \underline{p}) \rightarrow$ op $\hat{F}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla) = \int d^3r' |\underline{r}\rangle \hat{F}(\underline{r}', \frac{\hbar}{i}\nabla) \langle \underline{r}' |$

energy representation $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1$

spectral representation $\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \underbrace{|n\rangle \langle n|}_{\text{projector}}$

self-adjoint (Hermitian) op.: $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ (adjoint $\langle \psi | \hat{F}^\dagger$)

matrix element $\langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle$, commutator $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F}$

expectation value $\langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$

2.3 Eigenwerte und Eigenzustände von hermiteschen Operatoren

Annahme: Eine physikal. Observable F habe in normierten Zustand $|\psi\rangle$ einen scharfen Wert:

qm. Unschärfe
 $\Delta F^2 := \langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle = \langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{F}^2 \rangle - \langle \hat{F} \rangle^2 \stackrel{!}{=} 0$
 $= \langle \hat{F}^2 - 2\hat{F}\langle \hat{F} \rangle + \langle \hat{F} \rangle^2 \rangle$
 $\Leftrightarrow \langle \psi | \hat{F}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2 \quad (1)$

Sei $\hat{F}|\psi\rangle = |\phi\rangle$

$\langle \psi | \hat{F} = \langle \phi |$ da \hat{F} hermitesch (phys. Obs.!)

$$(1) \Leftrightarrow \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^2 = |\langle \psi | \phi \rangle|^2$$

Schwarz'sche Ungleichung:

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \|\phi\|^2 \underbrace{\|\psi\|^2}_{= \langle \phi | \phi \rangle}$$

Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn $|\phi\rangle \sim |\psi\rangle$

$$\Leftrightarrow |\phi\rangle = \alpha |\psi\rangle \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

$$\Leftrightarrow \hat{F}|\psi\rangle = \alpha |\psi\rangle \quad \text{d.h. } |\psi\rangle \text{ ist } \underline{\text{Eigenzustand}} \text{ von } \hat{F}.$$

Theorem 1: Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.

$$\begin{aligned} \text{Beweis: } \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle &= \alpha \langle \psi | \psi \rangle = \alpha \\ &= \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^* = \alpha^* \langle \psi | \psi \rangle^* = \alpha^* \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle} \right\} \alpha \in \mathbb{R} \quad \square$$

Eigenwerte hermitescher Operatoren können diskret oder kontinuierlich sein.

Theorem 2: Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis, diskreter Fall:

$$\text{Sei } \hat{F}|n\rangle = F_n |n\rangle$$

$$\hat{F}|m\rangle = F_m |m\rangle$$

$$\Rightarrow \langle m | \hat{F} | n \rangle = F_n \langle m | n \rangle \quad (1)$$

$$\langle n | \hat{F} | m \rangle = F_m \langle n | m \rangle$$

konj. kompl.

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}, \quad F_m = F_m^*$$

$$\langle m | \hat{F} | n \rangle = F_m \langle m | n \rangle \quad (2)$$

$$(2) - (1) : (F_m - F_n) \langle m | n \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle m | n \rangle = 0 \quad \text{für } F_m \neq F_n \quad \square$$

Orthogonalität:

$$\langle m | n \rangle = \int d^3x \psi_m^*(x) \psi_n(x) = 0 \quad \text{für } m \neq n$$

normiert: $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$

kontinuierl. Fall: $\langle F | F' \rangle = \delta(F - F')$

vgl. $\langle r | r' \rangle = \delta(r - r')$

Entartung (verschied. Eigenzustände zum selben Eigenwert).

$$\hat{F} |n, \alpha\rangle = F_n |n, \alpha\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$\alpha = 1, 2, 3, \dots, \alpha_n$ Entartungsindex
(α_n -fache Entartung)

$$\Rightarrow (\hat{F}_m - \hat{F}_n) \langle m, \alpha | n, \alpha' \rangle = 0 \quad \Rightarrow \langle m, \alpha | n, \alpha' \rangle = 0 \text{ für } F_m \neq F_n$$

Möglich wäre $\langle n, \alpha | n, \alpha' \rangle \neq 0$ für $\alpha \neq \alpha'$,
d. h. miteinander entartete Zustände sind nicht notwendig
orthogonal.

Man kann jedoch im Unterraum der entarteten Zustände
(„Eigenraum“ zum Eigenwert F_n) durch eine lineare
Trafo orthonormierte Eigenvektoren $|n, \beta\rangle$ einführen:

$$|n, \beta\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_n} |n, \alpha\rangle c_{\alpha\beta}$$

(z.B. Schmidt'sches Orthogonalisierungsverfahren:



$$\text{Also } \boxed{\langle n, \beta' | m, \beta \rangle = \delta_{mn} \delta_{\beta\beta'}}$$

Theorem 3: Zwei hermite'sche Operatoren \hat{F}, \hat{G}
kommutieren genau dann, wenn sie
ein gemeinsames System von Eigenzuständen
besitzen.

Beweis: Sei $[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \quad \hat{F}|n\rangle = F_n |n\rangle$

$$\Rightarrow (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})|n\rangle = \hat{F}(\hat{G}|n\rangle) - F_n(\hat{G}|n\rangle) = 0$$

$$\Rightarrow (\hat{G}|n\rangle) \text{ ist Eigenvektor von } \hat{F} \text{ zum Eigenwert } F_n.$$

(a) F_n nicht entartet $\Rightarrow \hat{G}|n\rangle \sim |n\rangle$ d.h. $\hat{G}|n\rangle = g_n|n\rangle$
d.h. $|n\rangle$ ist auch Eigenvektor von \hat{G}

(b) F_n entartet: Der Eigenraum E von \hat{F} zum Eigenwert F_n werde durch $|n, \beta\rangle$, $\beta=1, \dots, s$ (orthonormiert) aufgespannt.

Dann gilt für den Eigenvektor $\hat{G}|n, \beta\rangle = \sum_{\beta'} |n, \beta'\rangle c_{\beta'/\beta}$
(Entwicklung)

Die Matrix $c_{\beta'/\beta} := \langle n, \beta' | \hat{G} | n, \beta \rangle = c_{\beta\beta'}^*$

ist hermitesch, kann also durch eine unitäre Trafo U diagonalisiert werden:

$|n, \gamma\rangle = \sum_{\beta} U_{\gamma\beta} |n, \beta\rangle$ mit $\sum_{\beta} U_{\gamma'\beta}^* U_{\gamma\beta} = \delta_{\gamma\gamma'}$
("Drehung der Basis")

$\Rightarrow c_{\gamma'\gamma} = \langle n, \gamma' | \hat{G} | n, \gamma \rangle = G_{n\gamma} \delta_{\gamma'\gamma}$

$\Rightarrow \hat{G}|n, \gamma\rangle = \sum_{\beta} |n, \beta\rangle c_{\beta\gamma} = G_{n\gamma} |n, \gamma\rangle$

d.h. $|n, \gamma\rangle$ ist auch Eigenvektor zu \hat{G} !

NB: Im allgemeinen wird dabei die Entartung aufgehoben.

Umkehrung: Sei $\{|n\rangle\}$ ein vollständiges System von Eigenvektoren zu \hat{F}, \hat{G} .

$\hat{F}\hat{G}|n\rangle = F_n G_n |n\rangle = G_n F_n |n\rangle = \hat{G}\hat{F}|n\rangle \Rightarrow [\hat{F}, \hat{G}] = 0$

Def.: Ein lin. Op. $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt unitär, falls \square

$$U^\dagger U = U U^\dagger = 1$$

Daraus folgt: $U^\dagger = U^{-1}$

Mit $|\psi'\rangle := U|\psi\rangle$, $\langle\phi'| := \langle\phi|U^\dagger$ folgt für bel. ψ, ϕ :

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi| \underbrace{U^\dagger U}_1 |\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$$

Skalarprodukt ist bei unitären Transformationen invariant.

\Rightarrow Unitäre Operatoren transformieren von einer Basis (vollständiges DNS) in eine andere.

Zusbesondere: Trafo in die Eigenbasis eines Op. \hat{F}
(= Diagonalisierung von \hat{F})

$$\langle \phi' | \hat{F}' | \psi' \rangle = \langle \phi | \underbrace{U^\dagger \hat{F}' U}_{\hat{F}} | \psi \rangle = F \delta_{\phi\psi}$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= U^\dagger |\psi'\rangle \\ \hat{F} &= U^\dagger \hat{F}' U \end{aligned}$$

diagonal

↑
Eigenwert
falls $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in$ Eigenbasis