2.2 Operatoren im Hilbertraum

Eigenwertgl. in $\underline{r}$-Darstellung des Impulsop. $\hat{\underline{p}}$

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

Mult. mit $|\underline{r}\rangle$ u. Integr.

$$\underbrace{\int d^3r\, |\underline{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)\langle \underline{r}|}_{\hat{\underline{p}}}\underline{p}\rangle = \underline{p}\underbrace{\int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}|}_{1}\underline{p}\rangle$$

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

mit dem abstrakten Impuls-Op.

$$\boxed{\hat{\underline{p}} := \int d^3r\, |\underline{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)\langle \underline{r}|}$$

Sei $F(\underline{r},\underline{p})$ eine klass. Obs.

$$F(\underline{r},\underline{p}) \longrightarrow \hat{F}\left(\underline{r},\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)$$

$$\boxed{\hat{F} = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle \hat{F}\left(\underline{r},\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)\langle \underline{r}|}$$

Umkehrung: $\hat{F}$ geg., $|\phi\rangle = \hat{F}\,|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \langle \underline{r}|\phi\rangle = \langle \underline{r}|\hat{F}\underset{\uparrow\, 1}{|}\psi\rangle = \int d^3r'\, \langle \underline{r}|\hat{F}|\underline{r}'\rangle\langle \underline{r}'|\psi\rangle$$

$$\boxed{\phi(\underline{r}) = \int d^3r'\, \langle \underline{r}|\hat{F}|\underline{r}'\rangle\, \psi(\underline{r}')}$$

i.a. werden Op. in einer Darstellung zu **linearen Integralop.** (nichtlokal!)

Für die Ortsdarstell. für 1 Teilchen im (klass.) Pot.:

$$\langle \underline{r}|\hat{F}|\underline{r}'\rangle = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\,\hat{F}\left(\underline{r},\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right) \quad *$$

(**lokaler** Diff. op.)

Ortsop.: $\hat{\underline{r}}\,\psi(\underline{r}) = \underline{r}\,\psi(\underline{r})$ (multiplikativ)

$$\underbrace{\hat{\underline{r}}}_{\text{Op.}}\langle \underline{r}|\psi\rangle \overset{!}{=} \underbrace{\underline{r}}_{\text{EW}}\langle \underline{r}|\psi\rangle$$

$$\langle \underline{r}|\hat{\underline{r}}|\psi\rangle = \int d^3r' \underbrace{\langle \underline{r}|\hat{\underline{r}}|\underline{r}'\rangle}_{*}\langle \underline{r}'|\psi\rangle \overset{!}{=} \underline{r}\langle \underline{r}|\psi\rangle$$

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

Impulsdarst.: $|\phi\rangle := \hat{\underline{r}}|\psi\rangle$

$$\phi(\underline{p}) \equiv \langle \underline{p}|\phi\rangle = \langle \underline{p}|\hat{\underline{r}}|\psi\rangle$$

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

$$= -\frac{\hbar}{i}\nabla_p\left[\langle \underline{p}|\psi\rangle\right]$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\nabla_p\,\tilde{\psi}(\underline{p})$$

$\tilde{\psi}(\underline{p}) = \langle \underline{p}|\psi\rangle$

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

Also $\boxed{\hat{\underline{r}} \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\nabla_p}$ in der Impulsdarst.

Energiedarstellung

Sei in der Ortsdarstellung $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

mit Eigenfkt.en $\hat{H}\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$ $n = 0, 1, \ldots$

$$\hat{H}\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\langle x|n\rangle = E_n \langle x|n\rangle$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle \hat{H}\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\langle x|}_{=\hat{H}} n\rangle = E_n |n\rangle$$

Orthonormieren:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi_m^*(x)\varphi_n(x) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx}\, \langle m|\underbrace{x\rangle\langle x}|n\rangle = \langle m|n\rangle$$

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

Häufig (!) ist die Energiedarst. vollständig

(z.B. 1-dim. harm. Osz)

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\psi\rangle\langle x|n\rangle$$

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$\boxed{\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}}$$

Hamilton-Op.:

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H}|n\rangle\langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}}$$

Proj.-Op. auf den n-ten Eigenzustand

$\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$

<u>Allg.:</u>

Qu. Obs. $\longrightarrow$ lineare Op. im Hilbertraum $\hat{F}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$\hat{F}\left(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1 \hat{F}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{F}|\psi_2\rangle$$

<u>Def.</u>: zu $\hat{F}$ <u>adjungierter Op.</u> $\hat{F}^+$ ist def. durch

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\phi\rangle \iff \langle\psi|\hat{F}^+ = \langle\phi|$$

$$(\psi_1, \hat{F}\psi_2) = (\hat{F}^+\psi_1, \psi_2)$$

<u>Def.</u>: Ein lin. Op. $\hat{F}$ heißt <u>selbstadjungiert</u> (<u>hermitesch</u>), falls $\hat{F} = \hat{F}^+$

$$(\psi_1, \hat{F}\psi_2) = (\hat{F}\psi_1, \psi_2)$$

Die lin. Op. bilden eine <u>Algebra</u>, wobei die Multiplikation def. ist durch

$$(\hat{F}\cdot\hat{G})|\psi\rangle := \hat{F}\left(\hat{G}|\psi\rangle\right)$$

Einheitsop. $\mathbb{1}$: $\mathbb{1}\cdot\hat{F} = \hat{F}\cdot\mathbb{1} = \hat{F}$

Nullop. $\mathcal{O}$: $\mathcal{O}\cdot\hat{F} = \hat{F}\cdot\mathcal{O} = \mathcal{O}$

Kommutator $[\hat{F}, \hat{G}] := \hat{F}\cdot\hat{G} - \hat{G}\cdot\hat{F}$

Es gilt: (i) $(\hat{F}\cdot\hat{G})^+ = \hat{G}^+\cdot\hat{F}^+$

(ii) $\hat{F}^{++} = \hat{F}$

Matrixelement $\langle\psi_1|\hat{F}|\psi_2\rangle$

hermitesche Op.: $\langle\psi_1|\hat{F}|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{F}|\psi_1\rangle^*$

$$F_{ij} = F_{ji}^*$$

Erwartungswerte

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

Erwartungswerte hermite'scher Op. sind reell:

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle^*$$

$\Rightarrow$ Phys. Obs. durch hermitesche Op. darstellen!

1.3 Eigenwerte u. Eigenzust. von hermiteschen Op.

Annahme: Eine phys. Obs. F habe im Zustand $|\psi\rangle$ einen scharfen Wert

qu. Unschärfe $\langle(\Delta\hat{F})^2\rangle = \langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^2\rangle$
$= \langle\hat{F}^2\rangle - \langle\hat{F}\rangle^2 \overset{!}{=} 0$

$\Rightarrow$ $\hat{F}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$ d.h. $|\psi\rangle$ Eigenzustand

Theorem 1: Eigenwerte hermite'scher Op. sind reell.

Theorem 2 : Eigenzustände hermite'scher Op. zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

bei Entartung : Eigenraum mit Dim $d > 1$ zu einem Eigenwert

$\rightarrow$ Eigenzustände können orthonormiert gewählt werden (Schmidt'sche Orthogonalisierung)

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

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

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

$$U^+ U = U U^+ = 1$$

$$\Longleftrightarrow \quad U^+ = U^{-1}$$

Skalarprodukt ist bei unitären Trafo invariant

$\Rightarrow$ Unitäre Op. transformieren von einer Basis (vollst. ONS) in eine andere

Trafo in die Eigenbasis eines Op. $\hat{F}$

$$\langle \phi' | \hat{F}' | \psi' \rangle = \langle \phi | U^+ \hat{F}' U | \psi \rangle = F_\psi \, \delta_{\phi\psi}$$

falls Eigenbasis

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