6.3 Hilbertraum & hermitesche Operatoren

Bisher haben wir Wahrscheinlichkeitsamplituden, unsere Wellenfkt. $\Psi(\vec{x},t)$, sowie lineare Operatoren, z.B. den Hamiltonoperator $\hat{H}$ und den Impulsop. $\hat{p} = \hbar/i \, \vec{\nabla}$, eingeführt.

Physikalische Observable werden durch Erwartungswerte dargestellt. Wir interessieren uns daher für den Raum aller Wellenfkt.:

$$L^2 = \{ \Psi(\vec{x},t) \mid \int d^3x \, |\Psi|^2(\vec{x},t) < \infty \} \qquad (6.55)$$

den Raum der quadratintegrablen Funktionen.

L^2 ist ein Hilbertraum:

$$\begin{aligned} &(1) \text{ Vektorraum} \\ &(2) \text{ Skalarprodukt} \\ &(3) \text{ Vollständigkeit} \end{aligned} \qquad (6.56)$$

Wir führen die bra-ket Notation ein:

Vektoren in L^2, die durch eine (Wellen) Fkts $\psi(x)$ definiert sind, bezeichnen wir als

$$|\psi\rangle \quad \text{(ket)} \qquad \text{Beispiel } \mathbb{R}^2 \quad \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \tag{6.57}$$

Die entsprechenden dualen Vektoren, mit $\psi^*(x)$, wir als

$$\langle\psi| \quad \text{(bra)} \qquad \text{Beispiel } \mathbb{R}^2 \quad (1,0) \tag{6.58}$$

Das Skalarprodukt in L^2 ($\mathbb{R}^2$)

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int d^3x \; \varphi^*(x)\, \psi(x)$$

Wir zeigen nun die Eigenschaften (6.56):

(1) $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in L^2 \Rightarrow \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in L^2$

linearer Vek.raum

mit $\lambda_i \in \mathbb{C}$

da

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 \int d^3x\, \varphi^*(x)\, \psi_1(x)$$

$$+ \lambda_2 \int d^3x\, \varphi^*(x)\, \psi_2(x)$$

$$= \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$$

$$< \infty \tag{6.59}$$

(ii) $\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*$ mit

Skalarprod.

$$\langle \psi | \underset{\underset{\mathbb{C}}{\Uparrow}}{\lambda} \varphi \rangle = \lambda \langle \psi | \varphi \rangle \qquad (6.60)$$

$$\langle \lambda \varphi | \psi \rangle = \lambda^* \langle \varphi | \psi \rangle$$

und $\langle \psi | \psi \rangle \geqq 0$

(iii) Vollst.

$$|\psi\rangle \in L^2 \Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \underbrace{\langle \varphi_n | \psi \rangle}_{c_n}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle \qquad (6.61)$$

mit Basis $\{|\varphi_n\rangle\}$ und $\mathbb{1} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$

Außerdem betrachten wir Operatoren A (Matrizen) auf diesem Vektorraum

$$|\psi\rangle \xrightarrow{A} |A\psi\rangle \qquad (6.62)$$

$$L^2 \xrightarrow{A} L^2$$

mit

$$\langle \varphi | A \psi \rangle = \int d^3x \; \varphi^*(\vec{x}) \, A \, \psi(\vec{x})$$

z.B. $A = \vec{\hat{p}}$: $\langle \varphi | \vec{\hat{p}} \psi \rangle = \int d^3x \; \varphi^*(\vec{x}) \, \vec{\hat{p}} \, \psi(\vec{x}) \qquad (6.63)$

$$= \int d^3x \; \varphi^*(\vec{x}) \, \tfrac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \, \psi(x)$$

Strikt erfüllt $\hat{p}$ (und auch $\hat{H}$) nicht die Eigenschaft (6.62), da $\hat{p}$ und $\hat{H}$ Ableitungen beinhalten und nicht auf ganz L^2 definiert sind.

Der zu einem Operator A adjungierte Operator $\hat{A}^+$ hat die Eigenschaft

$$\langle \varphi | A \psi \rangle = \langle A^+ \varphi | \psi \rangle \qquad \forall\, |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in L^2 \tag{6.64}$$

Es gilt daher mit (6.64)

$$(A\,B)^+ = B^+ A^+ \tag{6.65}$$

und

$$(\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)^+ = \lambda_1^* A_1^+ + \lambda_2^* A_2^+$$

Beispiel: Der Impulsoperator $\vec{\hat{p}} = \hbar/i\, \vec{\nabla}$:

$$\langle \varphi | \vec{\hat{p}}\, \psi \rangle = \int d^3x\, \varphi^*(\vec{x})\, \hbar/i\, \vec{\nabla}\, \psi(\vec{x})$$

$$= - \int d^3x\, \hbar/i\, \vec{\nabla}\, \varphi^*(\vec{x})\, \psi(\vec{x}) \tag{6.66}$$

$$= \int d^3x\, \left(\hbar/i\, \vec{\nabla}\, \varphi(\vec{x})\right)^* \psi(\vec{x}) = \langle \vec{\hat{p}}\, \varphi | \psi \rangle$$

D.h., der Impulsoperator hat die Eigenschaft, daß

$$\boxed{\hat{p}^{+} = \hat{p}} \qquad (6.67)$$

Einen solchen Operator nennt man selbstadjungiert,

$$\boxed{A^{+} = A} \qquad (6.68)$$

[eigentlich nur dann, wenn A auf dem ganzen L^2 definiert ist]. Selbstadj. Operatoren haben reelle Eigenwerte (Spektralwerte): Gelte

$$A\,|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle$$

Dann haben wir mit $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$,

$$\begin{aligned}\lambda_n &= \langle \varphi_n | A\varphi_n\rangle = \langle A^{+}\varphi_n|\varphi_n\rangle \\ &= \langle A\varphi_n|\varphi_n\rangle = \lambda_n^{*}.\end{aligned} \qquad (6.69)$$

Wir bemerken auch, daß wir mit den Eigenvektoren von A eine Orthonormalbasis bilden können:

Sei $\lambda_n \neq \lambda_m$. Dann folgt

$$\lambda_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | A \varphi_n \rangle = \langle A \varphi_m | \varphi_n \rangle$$

$$= \lambda_m \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = 0} \qquad (6.70)$$

Nun kennen wir die Eigenfunktionen des Impulsoperators

$$\hat{\vec{p}}\, e^{i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{x}} = \vec{p}\, e^{i/\hbar\, \vec{p}\vec{x}}, \qquad (6.71)$$

die ebenen Wellen. Diese Relation wollen wir in Form von bra und kets schreiben,

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

$$(6.72)$$

und

$$\langle \vec{x} | \hat{\vec{p}} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle$$

Wir wissen außerdem, daß für $\vec{p} \neq \vec{p}\,'$

$$\langle \vec{p}\,' | \vec{p} \rangle = 0 \qquad (6.73)$$

Damit schreiben wir

$$\mathbb{1} = \int d^3p \; |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| \tag{6.74}$$

mit

$$|\vec{p}\,'\rangle = \int d^3p \; |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{p}\,'\rangle$$

und damit

$$\boxed{\langle\vec{p}\,|\,\vec{p}\,'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')} \tag{6.75}$$

Normierung folgt aus (6.74)

Analog haben wir

$$|\vec{x}\rangle = \int d^3p \; |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}\,|\,\vec{x}\rangle \tag{6.76}$$

sowie

$$\mathbb{1} = \int d^3x \; |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \tag{6.77}$$

mit $\langle\vec{x}\,|\,\vec{x}\,'\rangle = \delta(\vec{x}-\vec{x}\,')$

Damit ergibt sich aus

$$\langle\vec{x}\,'|\vec{x}\rangle = \delta(\vec{x}-\vec{x}\,') = \int d^3p \; \langle\vec{x}\,'|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle$$

daß

$$\boxed{\langle\vec{x}\,|\,\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}} \tag{6.78}$$

Die Wellenfkt. sind als

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle \qquad (6.79)$$

definiert. Fouriertransformationen ergeben sich als

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle$$

$$= \int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\vec{x})\, e^{i \vec{p}\vec{x}/\hbar}$$

und

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(p)\, e^{-i \vec{p}\vec{x}/\hbar} \qquad (6.80)$$

siehe (6.7) und (6.35), S. 131.

Wir kommen nun nochmals auf die stationären Zustände, S. 137, zurück. Sei $\hat{H} = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$ ein Operator, der nur von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ abhängt, und nicht -explicit- von t. Es gilt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \qquad (6.81)$$

was wir mit einem Separationsansatz lösen

$$\psi_E(\vec{x},t) = \psi_E(\vec{x}) \cdot \phi_E(t) \qquad (6.82)$$

mit

$$\frac{1}{\psi_E(\vec{x},t)}\, i\hbar \frac{\partial \psi_E(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{1}{\phi_E(t)}\, i\hbar \frac{\partial \phi_E}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{\psi_E(\vec{x})}\, \hat{H}\, \psi_E(\vec{x}) \qquad (6.83)$$

Damit sind beide Seiten in (6.83) konstant,

mit

$$\frac{1}{\phi_E}\, i\hbar \frac{\partial \phi_E}{\partial t} = E \Rightarrow \boxed{\hat{H}\, \psi_E(\vec{x}) = E\, \psi_E(\vec{x})} \qquad (6.84)$$

Nun gilt allgemein

$$\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = \int d^3x\, \psi^* \hat{H}\, \psi = \int d^3x\, \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi$$

$$= \int d^3x \left[\left(-\hbar^2/2m\, \Delta + V\right)\psi^*\right]\psi = \langle \hat{H}\psi | \psi \rangle, \qquad (6.85)$$

d.h. $\hat{H}$ ist hermitesch und damit

$$\boxed{E \in \mathbb{R}} \qquad (6.86)$$

Dies erlaubt es uns auch, die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustands zu bestimmen.

Seien die $\psi_n(\vec{x})$ die EF von $\hat{H}$:

$$\hat{H}\,\psi_n(\vec{x}) = E_n\,\psi_n(\vec{x})$$

und damit (5.87)

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n c_n\,\psi_n(\vec{x})$$

Dann gilt, mit $\psi(\vec{x},0) = \psi(\vec{x})$:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x},t) &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,\psi(\vec{x},0) \\ &= \sum_n c_n\,e^{-iE_n t/\hbar}\,\psi_n(\vec{x})\end{aligned} \tag{5.88}$$

mit

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \hat{H}\,\psi(\vec{x},t) \tag{5.89}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}\int d^3x\,\psi^*(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t) &= \int d^3x \left[\underbrace{e^{i\hat{H}t/\hbar}}_{\mathcal{U}^+}\psi^*(\vec{x})\right]\underbrace{e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\mathcal{U}}\psi(\vec{x}) \\ &= \int d^3x\,\psi^*(\vec{x})\,\underbrace{\mathcal{U}^+\mathcal{U}}_{\mathbb{1}}\,\psi(\vec{x}) \\ &= \int d^3x\,\psi^*(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) = 1\end{aligned} \tag{5.90}$$

Die bisherigen Ergebnisse und die neue Notation erlauben es uns, die Unschärferelation für Gaußsche Wellenpakete, Gl. (5.20), S. 126, zu verallgemeinern. Dazu benötigen wir noch die Schwarzsche Ungleichung:

$$\boxed{\langle\psi|\psi\rangle\,\langle\varphi|\varphi\rangle \geq |\langle\psi|\varphi\rangle|^2} \qquad (5.90)$$

Gl. (5.90) folgt mit der Parametrisierung

$$|\varphi\rangle = \alpha|\psi\rangle + |\phi\rangle \quad \text{mit } \langle\psi|\phi\rangle = 0 \qquad (5.91)$$

Damit gilt

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = |\alpha|^2\langle\psi|\psi\rangle^2 \,, \quad \langle\varphi|\varphi\rangle = |\alpha|^2\langle\psi|\psi\rangle + \langle\phi|\phi\rangle$$

und daher

$$1 \geq \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2 + \frac{\langle\phi|\phi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}} \qquad \blacksquare \qquad (5.92)$$

Nun benutzen wir

$$|\psi\rangle = (A - \langle A\rangle)|\chi\rangle \,, \quad |\varphi\rangle = (B - \langle B\rangle)|\chi\rangle \qquad (5.93)$$

mit hermiteschen Op. A & B: $\boxed{A^\dagger = A,\ B^\dagger = B.}$ und

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \ , \ \langle B \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle$$

Es gilt die Schwarzsche Ungleichung

$$\begin{aligned} \Delta A^2 \Delta B^2 &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle \\ &\geq \Big| \langle \psi | \underbrace{(A - \langle A \rangle)}_{\Delta \hat{A}} \underbrace{(B - \langle B \rangle)}_{\Delta \hat{B}} | \psi \rangle \Big|^2 \end{aligned} \qquad (5.94)$$

Nun gilt

$$(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) = \frac{1}{2} \Big[\underbrace{[A, B]}_{\text{Kommutator}} + \underbrace{\{ A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle \}}_{\text{Anti-Kommutator}} \Big] \qquad (5.95)$$

mit $\{A, B\} = AB + BA$. Für hermitesche Op.

A und B ist $[A, B]$ anti-hermitesch:

$$[A, B]^\dagger = -[A, B] ,$$

der Anti-Kommutator ist hermitesch $\qquad (5.96)$

$$\{A, B\}^\dagger = \{A, B\}$$

Es folgt, daß

$$\left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 = \left|\langle\psi|\tfrac{1}{2}[A, B] + \tfrac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle\right|^2$$

$$= \tfrac{1}{4}|\langle\psi|[A, B]|\psi\rangle|^2 + \tfrac{1}{4}\langle\psi|\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle$$

$$\geq \tfrac{1}{4}|\langle\psi|[A, B]|\psi\rangle \qquad (5.97)$$

und damit

$$\boxed{\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle[A,B]\rangle|} \qquad (5.98)$$

die allgemeine Heisenbergsche Unschärferelation.

Für unsere Unschärferelat. in $\hat{x}, \hat{p}$ folgt

$$\boxed{\Delta x_i\,\Delta p_j \geq \frac{1}{2}|\langle\underbrace{[\hat{x}_i, \hat{p}_j]}_{i\hbar}\rangle| = \hbar/2\,\delta_{ij}} \qquad (5.99)$$

Drehimpulskomponenten $\hat{L}_i$ sind durch

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_j\,\hat{p}_k \qquad (5.100)$$

gegeben. Damit gilt

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k$$

Was ist die Unschärfe $\Delta L_i \Delta L_j$?