8.) Mathematischer Rahmen: Hilbertraum, Operatoren, Spektraldarstellung, Basiswechsel, Dirac-Schreibweise

8.1 Raum der Zustandsfunktionen: $L_2(-\infty, +\infty)$ der

quadratintegrablen Funktionen (Integration im Lebesgueschen Sinne → Abgeschlossenheit)
ist ein Hilbertraum $\mathcal{H}$, ein Vektorraum mit (komplexem) inneren Produkt

- $(\psi_1, \psi_2) = \int d^3x\, \psi_1^*(\vec{x})\, \psi_2(\vec{x})$
- $\|\psi\|^2 = (\psi, \psi)$ $\Rightarrow$ metrischer Raum, abgeschlossen, d.h. Cauchy-Folgen konvergieren
- fordern weiterhin Separabilität, d.h. abzählbar ∞ Dimension – abzählbar ∞ Orthogonalsystem liegt dicht

8.2 Operatoren $\mathcal{O}$ (linear: additiv + homogen)

- (hermitesch) adjungierter Operator $\mathcal{O}^+$ zu $\mathcal{O}$

$$(\psi_1, \mathcal{O}\psi_2) =: (\mathcal{O}^+\psi_1, \psi_2) \quad \forall \quad \psi_1 \in D_{\mathcal{O}^+}, \ \psi_2 \in D_{\mathcal{O}}$$

(Def.-Bereich D)

$D_{\mathcal{O}^+} \supset D_{\mathcal{O}}$

- $\mathcal{O}^+ = \mathcal{O}$ auf $D_{\mathcal{O}}$ → $\mathcal{O}$ ist hermitescher Operator

- $D_{\mathcal{O}^+} = D_{\mathcal{O}}$, $\mathcal{O}^+ = \mathcal{O}$ auf $D_{\mathcal{O}}$ → selbstadjungierte Operator

---

Es gibt interessante Sätze über selbstadjungierte Operatoren (diesen sollen dann unsere Observablen entsprechen!)

Ausgangspunkt: "Gelfandsches Raumtripel"

Wollen diskrete und kontinuierliche Zustandsfunktion in einen Topf werfen!

$$\boxed{S \subset L_2 \subset S^*}$$

(i) S: Raum der ∞ oft diff.-baren, stärker als jede Potenz abfallende Funktionen in $[-\infty, +\infty]$ "brav"

(ii) $\psi \in L_2$ kann als lineare Funktional über S aufgefaßt werden

korrekt?

$$\varphi \in S \xrightarrow{\psi} (\psi, \varphi)$$

(iii) Raum der Funktionale läßt sich abschließen zu S^* ("temperierte Distributionen") "abenteuerlustig"

(iv) Operatoren wirken im Distributionenraum: betrachte immer $(\varphi, \mathcal{O}\psi)$! $\varphi \in S$!

(v) Eigenwertgleichung $\mathcal{O}\psi = \lambda\psi$ mit eigentlichen Eigenfunktionen $\psi \in L_2$

! und uneigentlichen Eigenfunktionen (Distributionen)

Die Gesamtheit der eigentlichen + uneigentlichen <u>Eigenwerte</u> λ nennt man Spektrum.

<u>Satz</u> Die Gesamtheit der eigentlichen + uneigentlichen Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators bilden ein vollständiges System, das sich orthogonalisieren läßt. (Die uneigentlichen Eigenfunktionen sind polynombeschränkt).

($\rightsquigarrow$ Gelfand, Schilow "Distributionen III, IV")

Traditionell: Untersuchung des Spektrums (Dunford, Schwartz) mit der <u>Resolvente</u> $(\mathbb{O} - \lambda I)^{-1}$: existiert <u>nicht</u> für Punkte λ des Spektrums $\to$ Spektraldarstellung eines Operators (später)

8.3 <u>Beispiele für s.a. Operatoren</u>

a) $\vec{X}$ ist s.a. (völlig symmetrisch in Schreibweise!)

$$D_{\vec{X}} : \{\psi \mid x\psi(x),\ \psi(x) \in L_2\}$$

b) $\vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$: $D_{\mathbb{P}}$: diffbare Funktionen des L_2

$$(\psi_1, P\psi_2) = \int d^3x\ \psi_1^*(\vec{x})\ \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi_2(x)$$

$$\overset{!}{=} (-1)^2 \int \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi_1(x)\right)^* \psi_2(x) \quad \text{wenn } \psi_1 \text{ diffbar in } L_2$$

$\rightsquigarrow$ s.a.

• ein hermitescher Operator, der nicht s.a. ist (1-dim)

$$D_P = \{ \psi \mid \psi \in L_2[0,+\infty] \text{ (Halbraum)}, \psi \text{ diff'bar}, \psi(0) = 0 \}$$

$$\{\psi_1, \mathbb{P}\psi_2\} = \int_0^\infty dx\, \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_2(x)$$

$$= \underbrace{\psi_1^* \frac{\hbar}{i} \psi_2(x) \Big|_0^\infty}_{=0 \text{ für } \psi_2 \in D_P} + \int_0^\infty dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x)$$

$\rightarrow$ $\mathbb{P}$ ist hermitesch!

<u>aber</u> $D_{\mathbb{P}^+}$: $\psi_1(0) \neq 0$ erlaubt $\neq D_{\mathbb{P}}$

beobachte die Eigenfunktion von $\mathbb{P}$ liegen nicht in D_P ...

8.4 abstrakter Hilbertraum (Dirac-Schreibweise) weniger mathematisch!?

<u>1' Bemerkung</u> (ψ_1, ψ_2) bei festem ψ_1 ist lineares Funktional auf $\mathcal{H}$, also $\in \mathcal{H}^*$ (bei festem ψ_2: "antilineares" Funktional)

$\mathcal{H}^* = \mathcal{H}$ isomorph

! bisher $\psi \in L_2$ (oder besser (s.o.) $\psi \in S^*$)
wir können $\psi(x)$ auffassen als die <u>Koordinaten</u> eines <u>abstrakten Hilbertraum-Vektors</u> (oder besser S^*-Vektors)
(wie in der Mechanik $\underset{\text{abstrakt}}{\vec{r}} = \sum \overset{\text{koord.}}{x_i}\, \vec{e}_i$!)

Bezeichnung (nach Dirac)

Vektor $|\psi\rangle$ im linearen Vektorraum mit inneren Produkt $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ (bilinear)

- $\langle\psi|a_1\psi_1 + a_2\psi_2\rangle = a_1\langle\psi|\psi_1\rangle + a_2\langle\psi|\psi_2\rangle$
- $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$

$\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

"bra" "ket" - Vektoren ($\langle\psi_1|$ ist lineares Funktional)

"Dirac-Vektoren"

alles wie bisher...

Vollständiges Orthonormalsystem $|\psi_n\rangle$ mit

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \qquad \text{kurz } |n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|}_{= \mathbb{1}_{\text{operator}}}\underbrace{\psi\rangle}_{c_n}$$

$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

$\sum_n |n\rangle\langle n| = \underline{\mathbb{1}}$

$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle \; (= \langle n|\psi\rangle$

auch für uneigentliche Vektoren:

$|\vec{x}\rangle$ sei Eigenvektor zu Ortsoperator $\vec{X}_{op}$ mit E.W. $\vec{x}$

$$\boxed{\psi(x) = \langle\vec{x}|\psi\rangle} \; !$$

(Provokation: $\vec{X}_{op}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle$!
(s. später)

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle &= \delta^3(\vec{x}-\vec{x}') \\ \int d^3x \; |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| &= \mathbb{1} \end{aligned}}$$ abstrakter Einheits-Operator

dann $\psi(x) = \langle \vec{x} | \psi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \vec{x} | n \rangle}_{\psi_n(x)} \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{c_n}$

wie bisher

8.5 Spektraldarstellung

(besonders elegant in Dirac-Schreibweise)

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

$|n\rangle\langle n|$ ist ein Operator (lin.)

ist Projektionsoperator P_n mit $\overset{(i)}{P_n^2 = P_n}$, $\overset{(ii)}{P_n \text{ hermitesch}}$

Bew (i) $\underbrace{|n\rangle\langle n|}_{P_n}\overset{1}{\widetilde{|}}\underbrace{n\rangle\langle n|}_{P_n} = |n\rangle\langle n|$ $\quad (|-)(|-) \ldots$

(ii) $\langle \psi | P_n | \psi \rangle = \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle$ Zahl!

$= \langle n | \psi \rangle^* \langle n | \psi \rangle = \langle (\langle n|\psi\rangle) n | \psi \rangle$

$= \langle P_n \psi | \psi \rangle$

$\rightsquigarrow$ P_n hermitesch

P_n hat E.W. 0, 1 $\quad$ Bew. $P_n|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

$P_n^2|\alpha\rangle = \alpha^2|\alpha\rangle \overset{!}{=} P_n|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

• P_n mißt Wahrscheinlichkeit, in $|\psi\rangle$ den Zustand $|n\rangle$ zu finden

$$\langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = |c_n|^2$$

$|n\rangle$ sei E.V zu A : $\quad A|n\rangle = a_n|n\rangle$

dann

$$A|\psi\rangle = A\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n a_n P_n|\psi\rangle$$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{n,n'} \langle\psi|n'\rangle\underbrace{\langle n'|A|n\rangle}_{a_n\delta_{nn'}}\langle n|\psi\rangle$$

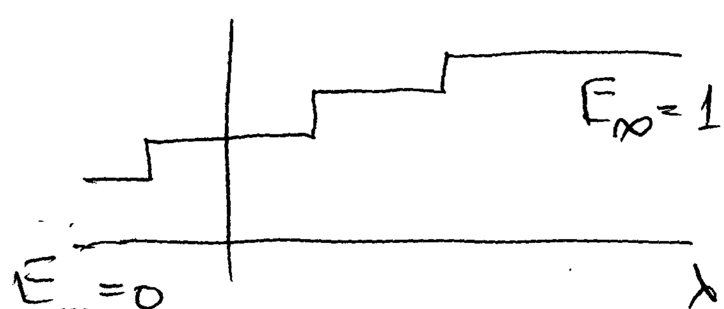
$$= \sum_n a_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \in D_A$$

$$\boxed{A = \sum_n a_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{P_n}}$$

"Spektraldarstellung"

Spektralschar:

$$E_\lambda = \sum_{a_n \le \lambda} P_n$$



dann

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dE_\lambda \quad \text{(Stieltjes Integral)}$$

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE_\lambda$$

elegante Darstellung der Spektraldarst.

gilt auch für kontinuierliches Spektrum

(allgem. Def. der Spektralschar $E_{\mu'} \geq E_\mu$ für $\mu' \geq \mu$

$\lim_{\epsilon \to 0_+} E_{\mu+\epsilon} = E_\mu$)

Bem. $P_R = \sum_{|n\rangle \in R} P_n$ ist Projektor auf Unterraum R

P_R mißt Wahrscheinlichk., daß Zustand im Unterraum R liegt.

---

z. B. Operator X (1-dim.)

$$E_\lambda f(x) = \begin{cases} f(x) & x \leq \lambda \\ 0 & x > \lambda \end{cases}$$

$$\langle f | E_\lambda | f \rangle = \int_{-\infty}^{\lambda} |f(x)|^2 dx$$

$$X = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dE_\lambda \quad \text{Spektraldarstellung}$$

Merke: Vollständigkeit der s.a. Operatoren

$\Leftrightarrow$ s.a. Operatoren haben Spektraldarstellung

Bem. Falls $A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dE_\lambda$

$\rightarrow f(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda) \, dE_\lambda$

8.5 Transformationstheorie (Koordinatenwahl)

haben S.a. Operatoren mit vollständigem Satz von Eigenvektoren:

(i) $\vec{X}_{op}\,|\vec{x}\rangle = \vec{x}\,|\vec{x}\rangle$ scharfer Ort (provozierend!) $\int dx\,|x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$

$\vec{P}_{op}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\vec{p}\rangle$ scharfer Impuls ~~einfach (üb.)~~ $\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,|p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$, $\langle p|p'\rangle = 2\pi\hbar\,\delta(p-p')$ $\rightsquigarrow$ 1-d. !

$H\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$ scharfe Energie E_n $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$

... weitere Operatoren (S.a.)

ein beliebiger Zustandsvektor $|\psi\rangle$

- charakterisiert durch $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ im "Ortsraum" ("Ortsraumdarstellung")

$$|\psi\rangle = \int dx\,|x\rangle\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)}$$

(1-D zur einfachen Not.)

- charakt. durch $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$ im "Impulsraum" ("Impulsraumdarstellung")

$$|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,|p\rangle\underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\tilde{\psi}(p)}$$

- charakt. durch $C_n = \langle n|\psi\rangle$ im "Energieraum"

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{C_n}$$

drei verschiedene "Koordinaten" v. ψ : $\psi(x)$, $\tilde{\psi}(p)$, C_n

Transformation zwischen „Koordinaten"

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\langle x|p\rangle\underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\tilde\psi(p)}$$

mit $\langle x|p\rangle = e^{i\frac{px}{\hbar}}$ | da $p \sim \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ im „Ortsraum"

ergibt

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{(2\pi\hbar)}\,e^{ipx}\,\tilde\psi(p)$$

auch:

$$\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}dx\,\underbrace{\langle p|x\rangle}_{e^{-ipx}}\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)}$$

Umkehrung!

(~ Fourierentw.!)

auch

$$\begin{cases}\langle x|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle x|n\rangle}_{\varphi_n(x)}\underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{c_n}\\[1ex] \langle n|\psi\rangle = \int dx\,\underbrace{\langle n|x\rangle}_{\varphi_n^*(x)}\langle x|\psi\rangle\end{cases}$$

$\psi(x)$

$\tilde\psi(p)$ $\quad$ $|\psi\rangle$ $\quad$ c_n $\qquad$ Koordinaten von $|\psi\rangle$

(ii) Operatoren $\mathbb{O}$ (a la Dirac)

$$|\psi'\rangle = \mathbb{O}|\psi\rangle$$

$$\underbrace{\langle x|\psi'\rangle}_{\psi'(x)} = \int dx'\,\underbrace{\langle x|\mathbb{O}|x'\rangle}_{O^{op}(x,x')}\underbrace{\langle x'|\psi\rangle}_{\psi(x')}$$

ähnlich

$$\underbrace{\langle n|\psi'\rangle}_{c_n'} = \sum_m \underbrace{\langle n|O|m\rangle}_{O_{nm}} \underbrace{\langle m|\psi\rangle}_{c_m}$$

hermitesche Matrix für hermitesches O

$$\begin{array}{ccc} \psi(x) & \longrightarrow & \int O^{ort}(x,x')\,\psi(x')\,dx' \\ \downarrow & & \downarrow \\ c_n & \longrightarrow & \int dx\, \varphi_n^*(x) \int dx'\, O^{ort}(x,x') \sum_m \varphi_m(x')\, c_m \end{array}$$

$$= \sum_m \Big[\underbrace{\int dx \int dx'\, \varphi_n^*(x)\, O^{ort}(x,x')\, \varphi_m(x')}_{O_{nm}} \Big] c_m$$

oft in der elementaren QM (nicht Kernphysik, Festkörperphysik)

$$O^{ort}(x,x') = O(x)\,\delta(x-x')$$

mit lokalen oder semilokalen Operator O im Ortsraum

z.B. $\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle}$ Schrödinger-Gl. in Dirac-Schreibweise

$\longrightarrow$ p. 61'

$\times \langle x|$: $i\hbar \frac{d}{dt}\langle x|\psi\rangle = \int dx' \langle x|H|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle$

kann man "durchziehen" $\quad H(x)\,\delta(x-x')$

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

7.B. Schrödinger-Gleichung

abstrakt:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

abstrakt

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle \vec{x}|\psi\rangle = \langle \vec{x}|H|\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'|\psi\rangle$$

falls H Diff-operator: "pseudolokal"

oft: übliche Summe nicht mehr notiert

$$H = \frac{\vec{p}_{op}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})_{op}$$

$$\langle \vec{x}|\frac{\vec{p}_{op}^{\,2}}{2m} + V(X_{op})|\vec{x}'\rangle = \langle \vec{x}|\frac{\vec{p}_{op}^{\,2}}{2m}|\vec{x}'\rangle + V(\vec{x})\underbrace{\delta_3(\vec{x}-\vec{x}')}_{\langle \vec{x}|\vec{x}'\rangle}$$

$$\langle \vec{x}|\frac{\vec{p}_{op}^{\,2}}{2m}|\vec{x}'\rangle = \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\frac{\vec{p}_{op}^{\,2}}{2m}|\vec{p}'\rangle\langle \vec{p}'|\vec{x}'\rangle$$

$$= \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}\int\frac{d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}e^{-i\frac{\vec{p}'\vec{x}'}{\hbar}}\underbrace{\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}}\delta_3(\vec{p}-\vec{p}')(2\pi\hbar)^3$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_x\right)^2$$

$$= \delta_3(\vec{x}-\vec{x}')\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_x\right)^2\Big/2m$$

$$\int dx' f(x')\delta''(x') \overset{!}{=} \int dx' f''(x')\delta(x')$$

$$\vec{\nabla}_x\delta(\vec{x}-\vec{x}') = -\vec{\nabla}_{x'}\delta(x-x')$$

! Distribution! (~ Üb.)

Üb. auch Schrödinger-Gl. in Impuls-, Ψn-Darstellung