7. Spektrum selbstadjungierter Operatoren, Darstellungen und zeitliche Entwicklung

7.1 Spektrum selbstadj. Operatoren

bisher selbstadj. Op. $\hat{A}$

mit diskretem Spektrum $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

$\uparrow$ reelle Eigenwerte

und Eigenvektoren bilden Orthonormalsystem

Wir hatten schon bei der Potentialbarriere

gesehen, daß für $E > V$: Kontinuierliches Spektrum

von Streuzuständen $\rightarrow$ nützliche Basisfunktionen für Wellenpakete / Wellenpakete, mit Orthogonalitäts- und Vollständigkeitseigenschaften,

aber nicht normierbar

Bsp.: Impulsoperator: Eigenwertglg.

$$\hat{P}|\psi\rangle = p|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = p\,\psi(x)$$

hat Lösung $\psi(x) = N e^{i\frac{p}{\hbar}x} = N\,u_k(x)$

$k = \frac{p}{\hbar}$

bis auf Normierung N.

aber nicht normierbar $(u_k, u_k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,1 = \infty$

u_k wird uneigentlicher Eigenvektor mit

p uneigentlichem Eigenwert genannt

Kontinuierliches Spektrum = Menge uneigentlicher EW's

Uneigentliche Eigenvektoren lassen sich darstellen als Grenzwert von Eigenvektoren $\in H$ aber mit Limes $\notin H$.

Bsp. Ebene Wellen $u_k(x)$ als Grenzwert von normierbaren Eigenfkten im endl. Volumen $x \in [0,L]$ (unendl. Pottopf.)

mit $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $k = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots$

(Diskretisierung des Kontinuums)

Aus der Theorie der Fouriertrafo haben wir für $u_k(x)$

Kontinuums-Orthonormalitätsbeziehung

$$(u_k, u_{k'}) = 2\pi\, \delta(k-k')$$

Dirac-Notation mit $u_k \to |k\rangle$, $\quad \hat{P}\,|k\rangle = \hbar k\,|k\rangle$ aber $|k\rangle \notin H$

$$\langle k | k' \rangle = 2\pi\, \delta(k-k')$$

Vollständigkeitsrelation

$$\int \frac{dk}{2\pi}\, u_k(x)\, u_k^*(y) = \delta(x-y)$$

$$\int \frac{dk}{2\pi}\, |k\rangle\langle k| = \hat{\mathbb{1}}$$

Weiteres Bsp: Ortoperator $\quad \hat{Q}\,|q\rangle = q\,|q\rangle$

Was sind Eigenvektoren und Eigenwerte?

$$\Rightarrow \underbrace{\hat{Q}\,\chi_q(x)}_{x\,\chi_q(x)} = q\,\chi_q(x)$$

$$\Rightarrow (x-q)\,\chi_q(x) = 0 \quad \Rightarrow \chi_q(x) = 0 \text{ für } x \neq q$$

$$\Rightarrow \chi_q(x) = \delta(x-q) \text{ mit kont. } \underbrace{q \in \mathbb{R}}_{\text{Eigenwerte}}$$

→ kontinuierliches Spektrum uneigentlicher EW q mit uneigentlichen EV $|q\rangle$

da $\chi_q(x)$ nicht normierbar $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\delta(x-q)|^2 = \infty$

auch hier Kontinuums-Orthonormalitätsrelation

$$\langle q | q' \rangle = \int dx \, \delta(x-q)\, \delta(x-q') = \delta(q-q')$$

und Vollständigkeitsrelation

$$\int dq \; \chi_q(x)\, \chi_q^*(y) = \int dq \; \delta(x-q)\, \delta(y-q) = \delta(x-y)$$

in Dirac-Notation $\int dq \, |q\rangle\langle q| = \hat{\mathbb{1}}$

Für ein <u>allg. Potential</u> sind Zustände mit

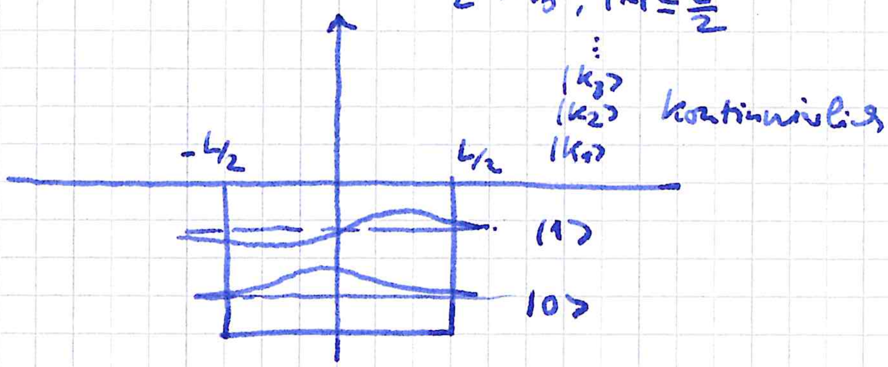
diskretem Spektrum und kontinuierlichem Spektrum möglich

↓	↓
$E_0, E_1, E_2 \ldots$	Streuzustände $\|k\rangle$
$\|0\rangle, \|1\rangle, \|2\rangle, \ldots$	mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ → zweifach entartet in 1d $\pm k$
$\langle i, j\rangle = \delta_{ij}$	uneigentliche Eigenzustände
Grundzustand, angeregte Zustände (eigentliche Eigenzustände)	allg. z.B. für $E > \max(V)$ $\langle k, k'\rangle = 2\pi\, \delta(k-k')$

und auch $\langle i | k \rangle = 0$

z.B. endlicher Pot.topf

$$V(x) = \begin{cases} 0 \;, & |x| > \frac{L}{2} \\ -V_0 \;, & |x| \leq \frac{L}{2} \end{cases}$$



Allg. Wellenfkt. lässt sich in Basis von eigentlichen $|n\rangle$ und uneigentlichen $|k\rangle$ entwickeln

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n \, \varphi_n(x) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \, c(k) \, u_k(x)$$

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle, \qquad u_k(x) = \langle x|k\rangle$$

$$c_n \rightarrow \langle n|\psi\rangle, \qquad c(k) \rightarrow \langle k|\psi\rangle$$

für geb. Zustände $c(k)=0$ wegen Normierbarkeit und asympt. Verhalten (kein oszillierender Streuzustand) wellenförmiger für $|x|\to\infty$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation allg.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\,\varphi_n^*(y) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \, u_k(x)\, u_k^*(y) = \delta(x-y)$$

Dirac-Notation

$$\underbrace{\sum_{n=0}^{N} |n\rangle\langle n| + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \, |k\rangle\langle k|}_{} = \hat{\mathbb{1}}$$

manchmal auch kompakt $\displaystyle \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}$

$\rightarrow$ allg. Spektralsatz für selbstadj. Operatoren (oben für $\hat{H}$)

$\hookrightarrow$ Hilbert + von Neumann

$\hat{A}$ selbstadj. Op., $\psi_a = |n\rangle$ oder $|a\rangle$

eigentlicher uneigentlicher Eigenvektor

$\Rightarrow$ a_n a Eigenwerte reell

und alle Eigenvektoren orthogonal

$(\psi_a, \psi_b) = 0$ für $a \neq b$

Vollständigkeit ψ_a spannen Hilbertraum auf d.h. $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int da\, |a\rangle\langle a|\psi\rangle$

bzw. $\hat{\mathbb{1}} = \sum_n |n\rangle\langle n| + \int da\, |a\rangle\langle a|$

Spezialfall: für $\hat{\vec{Q}}\,|\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\vec{r}\rangle$ uneigentlicher Eigenzustand des Ortsops.

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d\vec{r}\,'\, \underbrace{\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle}_{\chi^*_{\vec{r}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \underbrace{\langle\vec{r}\,'|\psi\rangle}_{\psi(\vec{r}\,')}$$

($\langle\vec{r}|n\rangle = 0$) oder $\hat{=}$ Spektrum voll rein kontinuierlich

$\Rightarrow \langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$ Wellenfkt. ist Ortsdarstellung des Zustandes $|\psi\rangle$

7.2. Darstellungen

bisher für rein diskretes Spektrum eines selbstadj. Ops $\hat{A}$

$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$

Spektraldarstellung $\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle\langle n|$

und für Operatorfkten $f(\hat{A})$, z.B. $e^{\hat{A}}$

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n)\, |n\rangle\langle n|$$

für allg. selbstadj. Op. mit eigentlichem / diskretem und uneigentlichem / kont. Spektrum

$$\boxed{\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| + \int da\; a\, |a\rangle\langle a|}$$

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n)\, |n\rangle\langle n| + \int da\, f(a)\, |a\rangle\langle a|$$

Ortsdarstellung

$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$ Zustände werden durch Wellenfunktionen im Ortsraum dargestellt

$\rightarrow$ Basis sind Ortseigenfunktionen $|\vec{r}\rangle$

Operator in Ortsdarstellung $(\hat{A}\psi)(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{A} | \psi \rangle$

$$= \int d\vec{r}' \langle \vec{r} | \hat{A} | \vec{r}' \rangle \psi(\vec{r}')$$

$\langle \vec{r} | \hat{A} | \vec{r}' \rangle = \hat{A}(\vec{r}, \vec{r}')$ Operatorkern

Bsp. Ortsoperator $\hat{\vec{Q}}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | \hat{\vec{Q}} | \vec{r}' \rangle = \vec{r}' \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle$

$\hookrightarrow$ diagonal in Ortsdarst. $= \vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

Impulsdarstellung

$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle$ $\rightarrow$ Basis sind Impulseigenfunktionen $|\vec{p}\rangle$

Bsp. Impulsoperator in Impulsdarstellung

$$\hat{\vec{P}}_{(\vec{p}, \vec{p}')} = \langle \vec{p} | \hat{\vec{P}} | \vec{p}' \rangle = \vec{p}' \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \vec{p}' (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

Darstellungen in allg. Basis mit diskreten und kontinuierlichen Anteil

$$\hat{1} = \sum\!\!\!\!\!\!\int\; |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_n |n\rangle\langle n| + \int da\, |a\rangle\langle a|$$

$$\Rightarrow \hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta|$$

mit Matrixelementen $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$, d.h.

$\langle n|\hat{A}|m\rangle$, $\langle\alpha|\hat{A}|n\rangle$, $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$

diskrete Matrix "kontinuierliche Matrix"

Basiswechsel

Betrachte Wechsel zwischen Orts- und Energiedarstellung

$$\{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r}\in\mathbb{R}^3} \rightarrow \{|n\rangle\}$$ angenommen nur diskretes Energiespektrum

aus Vollständigkeit

$$|n\rangle = \int d^3r\, |\vec{r}\rangle \underbrace{\langle\vec{r}|n\rangle}_{\varphi_n(\vec{r})}$$ Energie-Eigenfkten

mit Matrix (kont.-diskret)

$$\hat{U}_{\vec{r},n} = \langle\vec{r}|n\rangle$$

für allg. $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{\psi_n \equiv c_n}$

$$\Rightarrow \quad \langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r}) = \sum_n \langle\vec{r}|n\rangle\, \psi_n$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \hat{U}_{\vec{r},n}\, \psi_n$$

d.h. $\hat{U}$ transformiert von Energie- ψ_n

zur Ortsdarst. $\psi(\vec{r})$

Adjungierte Matrix $\hat{U}^+$ hat Matrixelemente

$$(\hat{U}^+)_{n,\vec{r}} = \hat{U}^*_{\vec{r},n} = \langle\vec{r}|n\rangle^* = \langle n|\vec{r}\rangle$$

$$\Rightarrow \quad (\hat{U}\hat{U}^+)_{\vec{r},\vec{r}'} = \sum_n \hat{U}_{\vec{r},n} (\hat{U}^+)_{n\vec{r}'}$$

$$= \sum_n \langle\vec{r}|n\rangle\langle n|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\Rightarrow \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{\mathbb{1}}$$

Betrachte Abbildung $\hat{U}^+\hat{U}$ von Energie- zu Energiedarstellung

$$(\hat{U}^+\hat{U})_{n,n'} = \int d^3r \, (\hat{U}^+)_{n,\vec{r}} \, \hat{U}_{\vec{r},n'}$$

$$= \int d^3r \, \langle n|\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|n'\rangle = \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$$

$$\Rightarrow \hat{U}^+\hat{U} = \hat{\mathbb{1}}$$

Basiswechsel ist eine unitäre Transformation

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$$

unitär: erhält Eigenwerte und Wahrscheinlichkeiten

Weiteres Beispiel: Basiswechsel von Orts- zu Impulsdarstellung

$$\hat{U}_{\vec{p},\vec{r}} = \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle = e^{-i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}}$$

Basiswechsel ist Fouriertrafo!

7.3 Zeitliche Entwicklung

zeitliche Entwicklung von $|\psi(t=0)\rangle \to |\psi(t)\rangle$
ist gegeben durch Schrödingergleichung. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

Abbildung von $|\psi(0)\rangle \to |\psi(t)\rangle$ ist unitäre Abb.,
da Ws'en erhalten bleiben

Betrachte zeitunabh. Hamilton-Op. $\hat{H}$

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,|\psi(t=0)\rangle$$

erfüllt Schrödinger-Glg. mit

<u>Zeitentwicklungsoperator</u>

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

in Energiedarstellung $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ angenommen rein diskretes Spektrum

$$\hat{U}(t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|n\rangle\langle n|$$

Daraus folgt für Zeitentwicklung von $|\psi(t)\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$$
$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|n\rangle\underbrace{\langle n|\psi(0)\rangle}_{c_n(0)}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,c_n(0)}$$

Eigenschaften von $\hat{U}(t)$:

- $\hat{U}$ ist unitär $\quad \hat{U}(t)\underbrace{\hat{U}^\dagger(t)}_{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}} = \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{\mathbb{1}}$ da $\hat{H}$ hermitesch und $t \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle$ ist zeitunabh.

- $\hat{U}^+(t) = \hat{U}(-t) = \hat{U}^{-1}(t)$

- Bewegungsglg. für Zeitentwicklungsoperator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t) = i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = \hat{H}\,\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\,\hat{H}$$

mit Randbed. $\hat{U}(t=0) = \hat{\mathbb{1}}$

75.1 ← Das bisherige ist das sogenannte <u>Schrödinger-Bild</u> der QM:

Zustände sind zeitabhängig, Operatoren zeitunabh. (es sei denn explizit zeitabh.)

(Physikalisch sind Erwartungswerte $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ etc. und nicht $|\psi\rangle$, $\hat{A}$ separat)

Im <u>Heisenberg-Bild</u> wird diese Rolle vertauscht:

Zustände werden zeitunabh., Operatoren zeitabh.

$$\underbrace{|\psi_H\rangle}_{\text{Heisenberg}} \equiv \hat{U}^+(t)\,\underbrace{|\psi(t)\rangle}_{|\psi_S(t)\rangle \text{ Schrödinger}} = |\psi(0)\rangle \quad \text{zeitunabh.}$$

d.h. Operator im Heisenberg-Bild

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^+(t)\,\underbrace{\hat{A}}_{\hat{A}_S}\,\hat{U}(t)$$

Operator wie bisher im Schrödinger-Bild

Schrödinger-Bild → Heisenberg-Bild ist Basiswechsel mit $\hat{U}(t)$

$|\psi_S(t)\rangle \to |\psi_H\rangle = \hat{U}^+(t)|\psi_S(t)\rangle$ Zustand und

$\hat{A}_S \to \hat{U}^+(t) A_S \hat{U}(t) = \hat{A}_H(t)$ Operator im Heisenberg-Bild

Beachte: $\hat{A}_S$ kann auch explizite t-Abhängigkeit haben

Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators heisst <u>Propagator</u>, da

$$\underbrace{\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle}_{} = \langle \vec{r} | \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3r' \underbrace{\langle \vec{r} | \hat{U}(t) | \vec{r}' \rangle}_{} \underbrace{\langle \vec{r}' | \psi(0) \rangle}_{\psi(\vec{r}', t=0)}$$

mit Propagator $K(\vec{r}, \vec{r}', t)$

$$K(\vec{r}, \vec{r}', t) = \langle \vec{r} | \hat{U}(t) | \vec{r}' \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | \vec{r}' \rangle$$

Energieeigenzustände

$$= \sum_n \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n^*(\vec{r}')$$

für <u>freies Teilchen</u>:

$$K(\vec{r}, \vec{r}', t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(- \frac{m (\vec{r} - \vec{r}')^2}{2 i \hbar t} \right)$$

<u>harmonischer Oszillator</u> (1d):

$$K(x, x', t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega t}} \exp\left(- \frac{m\omega}{2 i \hbar \sin\omega t} \left(x^2 \cos\omega t - 2xx' + x'^2 \cos\omega t \right) \right)$$

$\Rightarrow K_{HO} \rightarrow K_{frei}$ für $\omega \rightarrow 0$

Erwartungswert

$$\langle \hat{A}_H(t) \rangle = \langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle \quad \leftarrow \text{H-Bild}$$

$$= \langle \psi_S(t) | \underbrace{\hat{U}(t)\, \hat{U}^+(t)}_{\mathbb{1}} \hat{A}_S \underbrace{\hat{U}(t)\, \hat{U}^+(t)}_{\hat{\mathbb{1}}} | \psi_S(t) \rangle$$

$$= \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S | \psi_S(t) \rangle \quad \leftarrow \text{S-Bild}$$

sind gleich im H- und S-Bild

Bewegungsgleichung im H-Bild ist Bewegungsglg. für Operatoren $\hat{A}_H(t)$ (vgl. zu S-Glg. für Zustände in S-Bild)

Allg. Fall für auch explizit zeitabh. Op. $\hat{A}_S(t)$, d.h.

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\, \hat{A}_S(t)\, \hat{U}(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t)} = \hat{U}^+(t) \left(-\hat{H}\, \hat{A}_S(t) + \hat{A}_S(t)\, \hat{H} + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \right) \hat{U}(t)$$

$$= \boxed{\left[\hat{A}_H(t), \hat{H} \right] + i\hbar\, \hat{U}^+(t) \left(\frac{\partial}{\partial t} A_S(t) \right) \hat{U}(t)}$$

Heisenberg-Bild ist näher an kl. Mechanik

Bewegungsglgen für $\hat{\vec{Q}}_H$, $\hat{\vec{P}}_H$ sehen aus wie kl. Bewegungsglg.

→ Ehrenfestsches Theorem (H15)

Erhaltungsgrößen in QM

für nicht explizit zeitabh. Observable $\hat{A}$, $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S = 0$

$\Rightarrow \hat{A}$ ist Erhaltungsgröße, wenn $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H = 0$

$$\Leftrightarrow [\hat{A}_H, \hat{H}] = 0$$

$$\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{H}] = 0$$

wenn $\hat{A}$ und $\hat{H}$ kommensurabel

Wechselwirkungs-Bild (Interaction-Picture)

sowohl Zustände als auch Operatoren zeitabh.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

WW oder Teil der WW

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi_S(t)\rangle$$

$$\hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = \hat{V}|\Psi_I(t)\rangle$$

Zeitabh. von $|\Psi_I(t)\rangle$ nur durch Zeitentwicklung mit $\hat{V}$