Review: General selfadj. operator $\hat{A}$ can have

discrete and/or continuous spectrum of real eigenvalues

heute: und

a_n $\qquad$ a

with eigenvectors

$|n\rangle \in \mathcal{H}$ $\qquad$ improper $|a\rangle \notin \mathcal{H}$

not normalizable, but useful basis functions e.g. for wave packets

Special cases: (improper) eigenstates of $\hat{Q}$ or $\hat{P}$ with continuous spectrum only and orthonormalization

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

Completeness relation (for discrete spec. $\hat{\mathbb{1}} = \sum_n |n\rangle\langle n|$

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

Vorlesung heute: 7.1 Spektrum selbstadj. Operatoren ✓

7.2 Darstellungen ✓

Basiswechsel ✓

7.3 Zeitliche Entwicklung

Bilder der QM

7.1 Spektrum selbstadj. Operatoren continued

Für allg. Potential sind Zustände mit diskreten und kontinuierlichen Eigenwerten möglich

$E_0, E_1, E_2, \dots$

$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$

$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$

normierbare Eigenzustände

Streuzustände $|k\rangle$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ in 1d Fall 2-fach entartet

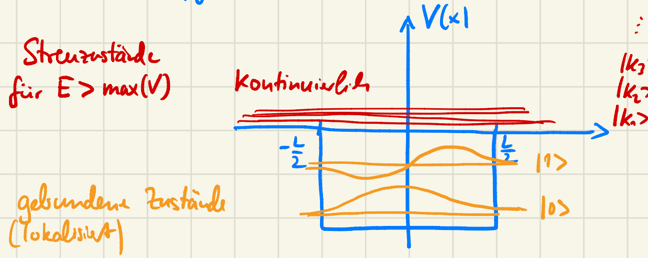
$|\pm k\rangle \to$ gleiche E

uneigentliche Eigenzustände

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

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

z.B. endlicher Potentialtopf



hier kann nicht $\hat{\mathbb{1}} \neq \sum_i |i\rangle\langle i|$ + Streuzustände

Allg. Wellenfkt. lässt sich in Basis von eigentlichen $|n\rangle$ und uneigentlichen $|k\rangle$ entwickeln (beide $\hat{H}\, \begin{matrix}|n\rangle \\ |k\rangle\end{matrix} = \begin{matrix}E_n |n\rangle \\ E_k |k\rangle\end{matrix}$)

fallen asymptotisch ab   oszillieren

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \underbrace{\sum_{n=0}^{N} \underset{\langle n|\psi\rangle}{c_n}\, \underset{\langle x|n\rangle}{\varphi_n(x)}}_{\text{lokalisiert/gebunden}} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \underset{\langle k|\psi\rangle}{c(k)}\, \underset{\langle x|k\rangle}{u_k(x)}}_{\text{Wellenpaket}}$$

$$= \sum_{n=0}^{N} \langle x|n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \langle x|k\rangle\langle k|\psi\rangle$$

Allg. Vollständigkeitsrelation

$$\boxed{\hat{\mathbb{1}} = \sum_{n=0}^{N} |n\rangle\langle n| + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} |k\rangle\langle k|}$$ oder $\hat{\mathbb{1}} = \sum\!\!\!\!\!\!\int |\alpha\rangle\langle\alpha|$

mit $|\alpha\rangle = |n\rangle$ oder $|k\rangle$

$$\delta(x-x') = \langle x|\hat{\mathbb{1}}|x'\rangle = \sum_{n=0}^{N} \varphi_n^*(x)\,\varphi_n(x') + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, u_k^*(x)\, u_k(x')$$

Allg. Spektralsatz für selbstadj. Operatoren

$\longrightarrow$ Hilbert + von Neumann

(oben $\hat{A} = \hat{H}$)

$\hat{A}$ sei selbstadj. Op., $\quad \psi_a = \underset{\text{eigentlich}}{|n\rangle}$ oder $\underset{\text{uneigentlich}}{|a\rangle}$

$\rightarrow$ a_n $\quad$ a $\quad$ reell

und alle Eigenvektoren orthogonal

$(\psi_a, \psi_b) = 0 \quad$ für $a \neq b$

ψ_a spannen Hilbertraum auf $\longrightarrow$ Vollständigkeit

d.h. jedes $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int da\, |a\rangle\langle a|\psi\rangle$

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

7.2 Darstellungen

bisher: nur diskretes Spektrum $\hat{A}\,|n\rangle = a_n\,|n\rangle$

Spektraldarstellung $\quad \underbrace{\hat{A}}_{} \overset{=\hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}}}{=} \sum_n a_n\,|n\rangle\langle n|$

Fkt. von Op. (z.B. $f(\hat{A}) = e^{\hat{A}}$): $\quad f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n)|n\rangle\langle n|$

für allg. selbstadj. Op. mit eigentlichen und uneigentlichen Eigenvektoren

→ Spektraldarstellung $\quad \boxed{\hat{A} \overset{=\hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}}}{=} \sum_n a_n\,|n\rangle\langle n| + \int da\; a\;|a\rangle\langle a|}$

Fkt. von Op. $\quad f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n)\,|n\rangle\langle n| + \int da\; f(a)\;|a\rangle\langle a|$

Ortsdarstellung $\quad$ in Eigenbasis des Ortsoperators $\hat{\vec{Q}}\,|\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\vec{r}\rangle$
nur uneigentliche EW's

$$\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}\,\overset{\hat{\mathbb{1}}}{|}\psi\rangle = \int d^3r'\; \underbrace{\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle}\langle\vec{r}\,'|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r'\;\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\;\psi(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$$

Wellenfkt ist Ortsdarstellung des Zustands

Operator in Ortsdarstellung?

$$\big(\underbrace{\hat{A}\psi}\big)(\vec{r}) = \langle\vec{r}\,\overset{\hat{\mathbb{1}}}{|}\,\underbrace{\hat{A}|\psi\rangle} = \int d^3r'\;\underbrace{\langle\vec{r}|\hat{A}|\vec{r}\,'\rangle}_{\substack{\text{Kern des Operators}\\ \hat{A}(\vec{r},\vec{r}\,')}}\;\underbrace{\langle\vec{r}\,'|\psi\rangle}_{\psi(\vec{r}\,')}$$

Bsp. Ortsoperator $\quad \hat{\vec{Q}}(\vec{r},\vec{r}\,') = \langle\vec{r}|\vec{Q}\underset{\hat{\mathbb{1}}}{|}\vec{r}\,'\rangle = \vec{r}\;\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$

↳ diagonal in Ortsdarstellung

Impulsdarstellung

uneigentlichen Eigenvektoren von $\hat{\vec{P}}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\vec{p}\rangle$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle$$

Bsp.: Impulsoperator in Impulsdarstellung

$$\hat{\vec{P}}(\vec{p},\vec{p}\,') = \langle \vec{p}|\,\hat{\vec{P}}\,\underbrace{\;}_{\mathbb{1} \,=\, \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|}|\vec{p}\,'\rangle = \vec{p}\,\langle \vec{p}|\vec{p}\,'\rangle = \vec{p}\,(2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$$

Darstellung in allg. Basis

mit diskreten + kont. Spektrum

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

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

mit Matrixelemente $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle =$ $\langle n|\hat{A}|m\rangle$ diskrete Matrix; $\langle a|\hat{A}|a'\rangle$, $\langle n|\hat{A}|a\rangle$ kont. Matrix

Operatordarst.

$$\hat{A} = \overbrace{\left(\sum_n |n\rangle\langle n| + \int da\, |a\rangle\langle a|\right)}^{\hat{\mathbb{1}}} \hat{A} \left(\sum_m |m\rangle\langle m| + \int da'\, |a'\rangle\langle a'|\right)$$

$$= \sum_n\sum_m |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m| + \sum_n \int da'\, |n\rangle\langle n|\hat{A}|a'\rangle\langle a'|$$

$$+ \sum_m \int da\, |a\rangle\langle a|\hat{A}|m\rangle\langle m| + \int da \int da'\, |a\rangle\langle a|\hat{A}|a'\rangle\langle a'|$$

$\langle a|\hat{A}|a'\rangle = \langle k_n|\hat{A}|k'_n\rangle$ einfachstes Bsp. ebene Wellen von $0 \dots L$

$$\langle x|k_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x} \qquad k = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots = \frac{n\pi}{L}, \; n \in \mathbb{N}$$

$\vdots$

$$= \langle k_n|\hat{A}|k_{n'}\rangle$$

Basiswechsel

Betrachte Wechsel zwischen Orts- und Energiedarstellung (ang. rein diskretes Energiespektrum)

$$\{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r}\in\mathbb{R}} \longrightarrow \{|n\rangle\}$$

$$\hat{Q}|\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\vec{r}\rangle \qquad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

aus Vollständigkeit

$$\mathbb{1}|n\rangle = \int d^3r\, |\vec{r}\rangle \underbrace{\langle\vec{r}|n\rangle}_{\varphi_n(\vec{r})}$$

$\varphi_n(\vec{r})$ Energie-Eigenfkt.

mit Matrix (kont.-diskret)

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

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

$\langle\vec{r}|$

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

d.h. $\hat{U}$ transformiert von Energie- $\rightarrow \psi_n$
zu Ortsdarst. $\rightarrow \psi(\vec{r})$

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

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

($\hat{U}^+$ transformiert von Orts- zu Energiedarstellung)

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

$$= \sum_n \langle \vec{r}|n\rangle \langle n|\vec{r}'\rangle = \langle \vec{r}|\vec{r}'\rangle$$

$$= \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$\Rightarrow \hat{U}\hat{U}^+ = \mathbb{1}$ = 1-Transformation von Orts- zu Orts...

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

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

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

$$= \delta_{n',n}$$

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

Basiswechsel ist unitäre Transformation $\quad \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

unitäre Transformationen erhalten Eigenwerte und Wahrscheinlichkeiten

mit Matrixelementen $\quad \hat{U}_{neu,alt} = \langle neu \,|\, alt \rangle$

zwischen Eigenvektoren der alten und neuen Basis

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

$$|\psi\rangle_{alt} \longrightarrow |\psi\rangle_{neu} = \hat{U} \, |\psi\rangle_{alt}$$

Beispiel: Basiswechsel von Orts- zur Impulsdarstellung

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

$\rightarrow$ Basiswechsel ist Fouriertransformation

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

7.3 Zeitliche Entwicklung

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

hier: betrachte als Abbildung $|\psi(t=0)\rangle \xrightarrow{\hat{U}} |\psi(t)\rangle$
ist unitäre Abbildung, da Ws'en erhalten bleiben

Betrachte zeitunabh. $\hat{H}$

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

erfüllt S-Glg.

mit Zeitentwicklungsoperator $\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t}$

$$\hat{U}^+ = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

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