3.4 Lineare Operatoren

[Zusammenfassung einiger Definitionen & Sätze aus der Funktionalanalysis].

Gegeben: Hilbertraum $\mathcal{H}$ (nicht notwendigerweise $L^2(\mathbb{R}^3)$)

Definition Ein Operator A ist eine Abbildung

$$A: D_A \to \mathcal{H}, \quad D_A \subset \mathcal{H}$$

D_A ist ein Teilraum von $\mathcal{H}$. D_A heißt Definitionsbereich von A.
A heißt linear, wenn

$$A(a\psi_1 + b\psi_2) = a A\psi_1 + b A\psi_2$$

(D_A sei dicht in $\mathcal{H}$.) Forderung garantiert Eindeutigkeit

Definition Der zu A adjungierte Operator A^+ ist definiert durch

$$(\phi, A\psi) = (A^+\phi, \psi) \quad \forall \psi \in D_A, \ \phi \in D_{A^+}$$

Es gilt: $(AB)^+ = B^+A^+$

A heißt hermitisch, wenn $(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi)$
$\forall \psi, \phi \in D_A$ und $D_{A^+} \subseteq D_A$

A heißt selbstadjungiert, wenn $A^+ = A$ und $D_{A^+} = D_A$

Ein selbstadjungierter Operator ist auch hermitisch.

Beispiel: $\hat{p}_j$, $\hat{x}_j$ sind selbstadjungiert

(siehe Abschnitt 1.5)

Bemerkung zur Bracket-Schreibweise:

$$(\phi, A\psi) \doteq \langle\phi|(A|\psi\rangle)$$

$$\underbrace{|\psi'\rangle \equiv (A|\psi\rangle)}_{\text{ket}} \Rightarrow \underbrace{\langle\psi'| = (\langle\psi|A^+)}_{\text{bra}}$$

$$\psi' \equiv A\psi \quad , \quad \phi' \equiv A^+\phi$$

$$|\psi'\rangle = (A|\psi\rangle) \quad , \quad |\phi'\rangle = (A^+|\phi\rangle) \Rightarrow \langle\phi'| = (\langle\phi|A)$$

Also:

$$(\phi', \psi) = (A^+\phi, \psi) = (\phi, A\psi) = (\phi, \psi')$$

$$\Leftrightarrow \langle\phi'|\psi\rangle = \underbrace{(\langle\phi|A)|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle)}_{\equiv \langle\phi|A|\psi\rangle} = \langle\phi|\psi'\rangle$$

Unterscheidung zwischen $(A^+\phi, \psi) = (\phi, A\phi)$ wird in der Bracket-Notation nicht deutlich!

(wohl mit ein Grund dafür, dass B.-Notation in der mathematischen Literatur nicht verwendet wird)

Sei A linearer Operator auf $\mathcal{H}$.
Falls ~~ex~~ $a \in \mathbb{C}$ und $\psi \in \mathcal{H}$ existiert, mit $\psi \neq 0$, so dass

$$A\psi = a\psi$$

so heißt a Eigenwert und ψ Eigenvektor
(engl.: eigenvalue, eigenvector)

Satz 1: Die Eigenwerte eines hermitischen Operators sind reell;

Beweis: $A\psi = a\psi \Rightarrow (\psi, A\psi) = a(\psi,\psi)$

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) = (a\psi, \psi) = a^*(\psi,\psi)$$

$$\Rightarrow a = a^*, \text{ somit } a \in \mathbb{R} \qquad \blacksquare$$

Bracket-Notation:

$$\cancel{\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|(A|\psi\rangle) = \langle\psi|(a|\psi\rangle) = a\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$\left.\begin{aligned} |\psi'\rangle &= A|\psi\rangle \\ &= a|\psi\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned} \langle\psi'| &= (\langle\psi|A^+) = (\langle\psi|A) \\ &= a^*\langle\psi| \end{aligned}$$

$$\cancel{\Rightarrow \langle\psi'|\psi\rangle = (\langle\psi|A)|\psi\rangle = a^*\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$\langle\psi|\psi'\rangle - \langle\psi'|\psi\rangle = (a-a^*)\langle\psi|\psi\rangle = 0$$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle \qquad \Rightarrow a = a^*$$

Satz 2: Eigenvektoren hermitischer Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

Beweis: $A\psi_1 = a_1 \psi_1 \,, \quad A\psi_2 = a_2 \psi_2 \,, \quad a_1 \neq a_2$

$$(\psi_2, A\psi_1) = a_1 (\psi_2, \psi_1) \qquad (1)$$

$$(A\psi_2, \psi_1) = a_2 (\psi_2, \psi_1) \qquad (2)$$

A hermitisch: $(1) - (2) = 0$

$$(a_1 - a_2)(\psi_2, \psi_1) = 0 \Rightarrow (\psi_2, \psi_1) = 0$$

da $a_1 \neq a_2$ n.V. ∎

Beispiel: Orthogonalität der Hermite-Polynome.

Satz 3: Die Zahl der Eigenwerte eines hermitischen Operators ist höchstens abzählbar unendlich

Beweis: In einem separablen Hilbertraum gibt es nicht mehr als abzählbar viele zueinander orthogonale Vektoren

Satz 4: Vollständigkeit

Sei A selbstadjungiert und besitze ein rein diskretes Spektrum. Dann spannen die Eigenvektoren von A den gesamten Hilbertraum $\mathcal{H}$ auf.

(ohne Beweis)

„kann jeden phys. Zustand nach Eigenfunktionen entwickeln."

3.5 Observable, Erwartungswert und Messung

Observable sind Messgrößen.

In der klassischen Physik können Observable mit beliebiger Genauigkeit gemessen werden (Messgenauigkeit limitiert durch Apparatur)

Quantenmechanik: Für einen gegebenen Zustand $|\alpha\rangle$ sind die Messwerte statistisch verteilt.

Erwartungswert : $\langle A\rangle \equiv \langle\alpha|A|\alpha\rangle$

Streuung (Varianz): $(\Delta A)^2 \equiv \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle$

(mittlere quadratische Abweichung)

T Erwartungswert ist reell $\Longleftrightarrow$ A ist selbstadjungiert.

$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$; $|\beta\rangle = (A|\alpha\rangle)$; $\langle\beta| = (\langle\alpha|A^+)$

$\langle A\rangle$ reell $\Longleftrightarrow$ $\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle^*$, somit

$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|A^+|\alpha\rangle^*$

Also muss $A = A^+$, und somit ist A selbstadjungiert.

Varianz:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Interpretation des Erwartungswerts:

$\langle A \rangle$ ist der statistische Mittelwert nach einer großen Zahl von Messungen der Observablen A an identisch präparierten Systemen (reiner Zustand).

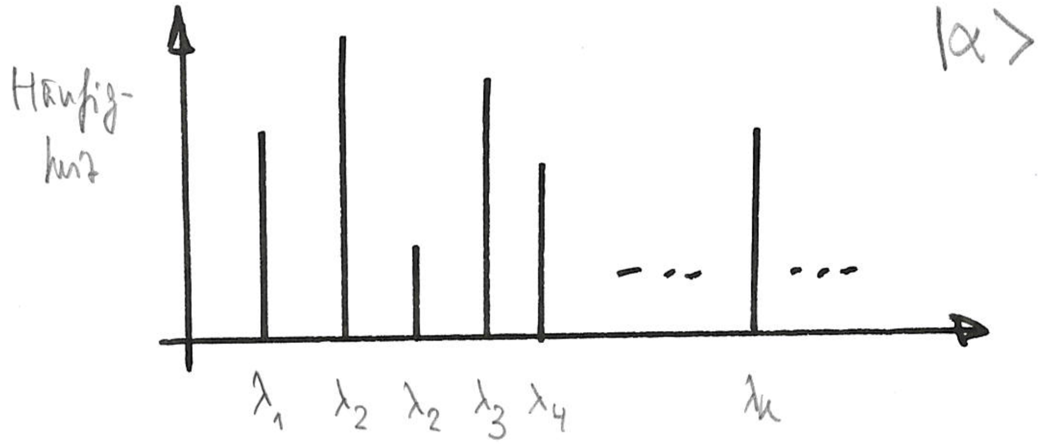
⚠ Der Erwartungswert $\langle A \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle$ ist nicht der Wert von $\langle A \rangle$ wenn sich das System im Zustand $|\alpha\rangle$ befindet!

Als **reinen Zustand** bezeichnet man ein Ensemble identischer physikalischer Systeme, die durch denselben Vektor $|\alpha\rangle$ charakterisiert sind.

Sei $\{|n\rangle\}$ eine vollständige orthonormierte Basis von Eigenvektoren der Observablen A, d.h.

$$A|n\rangle = \lambda_n |n\rangle$$

Die Messung von A ergibt einen der Eigenwerte. Wiederholte Messungen an einem reinen Zustand ergeben eine statistische Verteilung der Eigenwerte.



Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert λ_n zu messen, ist

$$|c_n|^2 = |\langle n|\alpha\rangle|^2 \quad , \quad \text{denn}$$

$$\langle A\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle = \sum_m \sum_n \langle\alpha|m\rangle\underbrace{\langle m|A|n\rangle}_{=\lambda_n\delta_{mn}}\langle n|\alpha\rangle$$

$$= \sum_n \lambda_n |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \sum_n \lambda_n |c_n|^2$$

Außerdem:

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\mathbb{1}|\alpha\rangle = \sum_n \langle\alpha|n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \sum_n |c_n|^2$$

Also

$$\langle A\rangle = \frac{\sum_n \lambda_n |c_n|^2}{1} = \frac{\sum_n \lambda_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2}$$

und demnach ist $|c_n|^2 \equiv |\langle n|\alpha\rangle|^2$ das statistische Gewicht des Eigenwerts λ_n. Dies ist gleich der Wahrscheinlichkeit den Messwert λ_n zu erhalten.

Dirac: Eine Messung an einem (reinen) Zustand bewirkt, daß das System in einen Eigenzustand der Messgröße springt.

Beispiel: harmonischer Oszillator

Eine einzelne Messung ergibt einen der Eigenwerte
$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $n \in \mathbb{N}_0$.

Der Erwartungswert $\langle H \rangle$ kann jeden reellen Wert $\geq \hbar\omega\frac{1}{2}$ annehmen, je nachdem welcher Vektor $|\alpha\rangle$ den Zustand beschreibt.

Spezialfall: $|\alpha\rangle = |n\rangle$, d.h. das System befindet sich in einem Eigenzustand der Messgröße.
Dann ist

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \langle n | A | n \rangle = \lambda_n$$

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$= \langle n | A A | n \rangle - (\lambda_n)^2 = \lambda_n^2 - (\lambda_n)^2 = 0$$

3.6 Verträgliche Observable; Unschärferelation

Zwei Observable, A und B, heißen **verträglich** (**kommensurabel**; **kompatibel**) wenn alle Eigenzustände $\{|a\rangle\}$ von A auch Eigenzustände von B sind:

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad , \quad B|a\rangle = b|a\rangle$$

A und B können gleichzeitig scharf gemessen werden

$$\boxed{A, B \text{ verträglich} \iff [A, B] = 0}$$

(offensichtlich sind $\hat{x}$ und $\hat{p}$ nicht verträglich).

Beweis: Annahme: A habe ein rein diskretes und nicht-entartetes Spektrum. Dann gilt

$$AB|a\rangle = A\,b|a\rangle = bA|a\rangle = ba|a\rangle$$

$$BA|a\rangle = B\,a|a\rangle = aB|a\rangle = ab|a\rangle$$

$\Rightarrow (AB - BA)|a\rangle = 0 \quad \forall$ Eigenkets $|a\rangle$

$\{|a\rangle\}$ spannen den gesamten Hilbertraum auf

$\Rightarrow [A, B] = 0$ (Koeff. einer Linearkomb. die $= 0$ ist, müssen verschwinden)

<u>Satz:</u> A und B seien verträglich, $[A,B]=0$. $\{|a\rangle\}$ sei eine Basis von Eigenkets von A (nicht entartet)
Dann ist die Matrixdarstellung von B in der Basis $\{|a\rangle\}$ diagonal.

<u>Beweis.</u> $|a'\rangle, |a''\rangle \in \{|a\rangle\}$, $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$
$A|a''\rangle = a''|a''\rangle$
$a' \neq a''$

$$0 = \langle a''|[A,B]|a'\rangle$$

$$= \langle a''|AB|a'\rangle - \langle a''|BA|a'\rangle$$

$$= (a''-a')\langle a''|B|a'\rangle$$

Da n. V. $a'' \neq a'$ muss $\langle a''|B|a'\rangle = 0$

Also: $\langle a''|B|a'\rangle = 0$ außer wenn $a''=a'$

$\curvearrowright$ $\langle a''|B|a'\rangle$ ist diagonal, d.h.

$$\langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle$$

Korollar: Kann Operator B darstellen als

$$B = \mathbb{1}B\mathbb{1} = \sum_{a'',a'} |a''\rangle\underbrace{\langle a''|B|a'\rangle}_{=\delta_{a'a''}\langle a''|B|a''\rangle}\langle a'|$$

$$= \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''|B|a''\rangle\langle a''|$$

B wirke nun auf Eigenzustand $|a'\rangle$ von A:

$$B|a'\rangle = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|B|a''\rangle \underbrace{\langle a''|a'\rangle}_{\delta_{a''a'}}$$

$$= \underbrace{\langle a'|B|a'\rangle}_{\text{reell}} |a'\rangle$$

↪ Dies ist eine Eigenwertgleichung für B mit Eigenvektor $|a'\rangle$ und Eigenwert b':

$$B|a'\rangle = b'|a'\rangle \quad , \quad b' \equiv \langle a'|B|a'\rangle$$

Bemerkung: Satz + Beweis gelten auch im Fall einer n-fachen Entartung:

$$A|a\rangle^{(i)} = a\,|a\rangle^{(i)} \quad , \quad i = 1, \dots, n$$

Orthonormale Eigenvektoren zum selben Eigenwert a

↪ Finde eine maximale Menge von kommutierenden Observablen, die die $|a\rangle^{(i)}$ unterscheiden können:

$$|a,b\rangle^{(i)} : \quad A|a,b\rangle^{(i)} = a\,|a,b\rangle^{(i)} \;, \quad i = 1, \dots, n$$

$$B\,|a,b\rangle^{(i)} = b_i\,|a,b\rangle^{(i)}$$

Beispiel: Bahndrehimpuls (siehe später)

$A = \vec{L}^2$: Eigenwerte $l(l+1)\hbar^2$, $l = 0, 1, 2, \ldots$

$B = L_z$: " $m\hbar = (-l, -l+1, \ldots, l-1, l)\hbar$

$\curvearrowright$ Eigenkets von $\vec{L}^2$ sind $(2l+1)$-fach entartet.

$$[\vec{L}^2, L_z] = 0$$

Man muss sowohl l als auch m angeben, um den Zustand d. Bahndrehimpuls vollständig zu charakterisieren.

$\perp\!\!\perp$

Zusammenfassung:

Die folgenden Aussagen sind äquivalent:

(1) A und B sind verträgliche Observable

(2) $[A, B] = 0$

(3) A und B können gleichzeitig scharf gemessen werden

(4) Eigenzustände von A sind auch solche von B

(5) A und B können gleichzeitig diagonalisiert werden, d.h. es existiert eine Basis von Eigenzuständen $\{|a\rangle\}$ so dass

$$\langle a''|A|a'\rangle = \delta_{a''a'} \langle a'|A|a'\rangle, \quad \langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a''a'} \langle a'|B|a'\rangle$$