Kontinuierliches Spektrum; uneigentliche Eigenwerte

Impulsoperator:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}u_k(x) = p\,u_k(x), \quad u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ipx/\hbar}$$

Ortsoperator:

$$\hat{x}\,\psi_\xi(x) = \xi\,\psi_\xi(x), \quad \psi_\xi(x) = \delta(x-\xi)$$

$p \equiv \hbar k,\ \xi:$ uneigentliche Eigenwerte

Orthogonalität und Vollständigkeit:

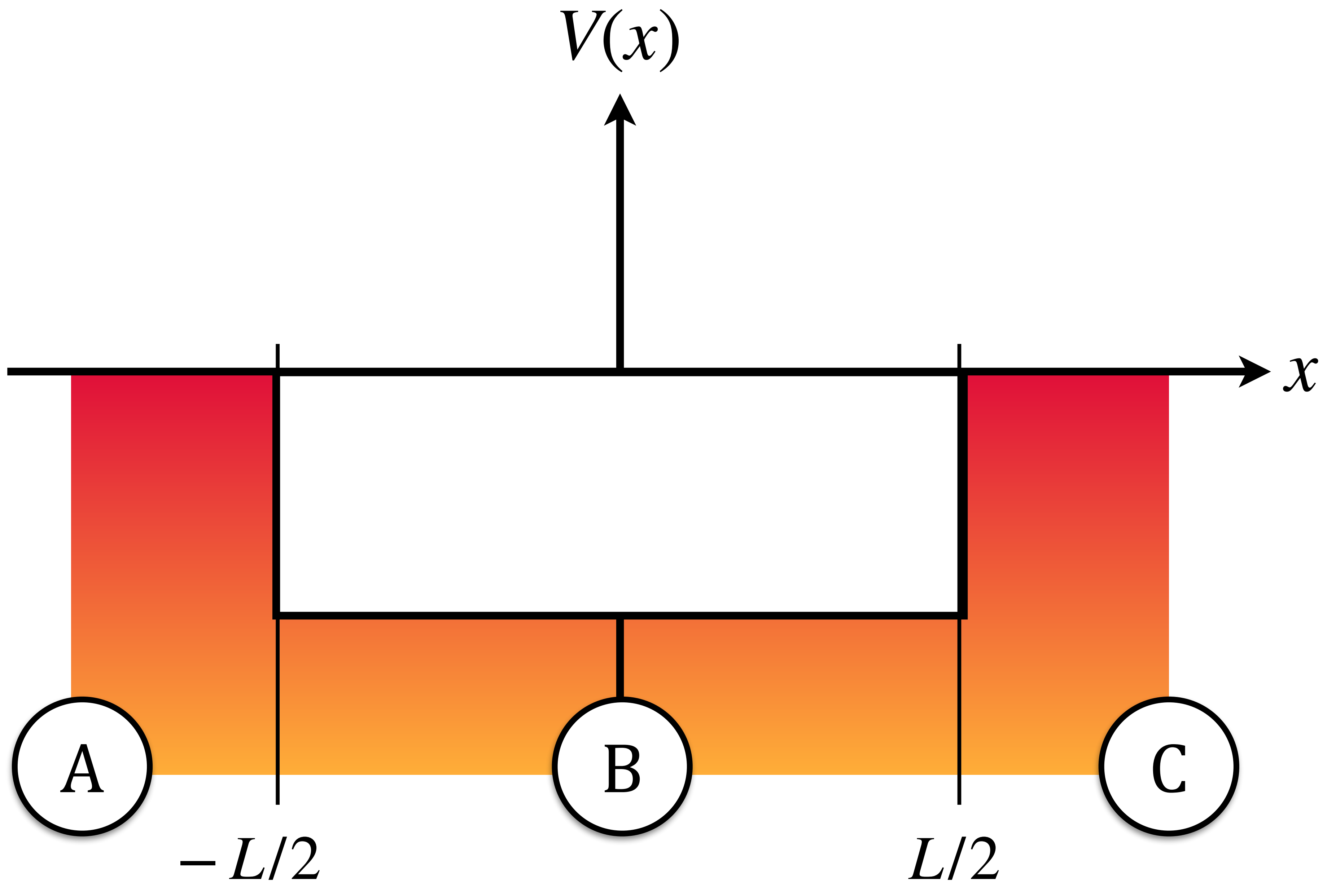
$$(u_k, u_l) = \delta(k-l) = \langle k\,|\,l\rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\,u_k(x)\,u_k^*(y) = \delta(y-x) \quad \Leftrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} dk\,|\,k\rangle\langle k\,| = \mathbb{1}$$

$$(\psi_\xi, \psi_{\xi'}) = \delta(\xi-\xi') = \langle \xi\,|\,\xi'\rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\,\psi_\xi(x)\,\psi_\xi^*(y) = \delta(y-x) \quad \Leftrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\,|\,\xi\rangle\langle \xi\,| = \mathbb{1}$$

Endlicher Potentialtopf



Gebundene Zustände: $E < 0$ $\rightarrow$ diskretes Spektrum

$$E_0 < E_1 < \ldots < E_N \qquad |0\rangle, |1\rangle, \ldots, |N\rangle \in \mathcal{H}$$

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

(endlich viele Zustände — grafische Lösung — Abschnitt 2.2.1)

Streuzustände: $E > 0$ $\rightarrow$ kontinuierliches Spektrum

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_A(x) = \mathrm{e}^{ikx} + \alpha_-\,\mathrm{e}^{-ikx} \\ \psi_C(x) = \gamma_+\,\mathrm{e}^{ikx} \end{cases}$$

$E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (zweifach entartet, d.h. zu jedem gegebenen E gibt es zwei Lösungen für k)

$$\psi_k(x) = |k\rangle, \quad |k\rangle \notin \mathcal{H}, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

$$\langle k' | k \rangle = \delta(k' - k), \quad \langle n | k \rangle = 0, \quad \langle n | m \rangle = \delta_{nm}, \quad n, m \in \{0, \ldots, N\}, \quad k, k' \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

→ System von eigentlichen, $\{\,|n\rangle\}$, und uneigentlichen, $\{\,|k\rangle\}$, Eigenvektoren.

Jede Funktion $f(x) \in \mathscr{H}$ lässt sich entwickeln gemäß

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n \psi_n(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dk\, c(k)\, \psi_k(x) \equiv \sumint_{\omega} c_\omega \psi_\omega(x), \quad \omega \in \{0, \ldots, N,\ k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}\}$$

Vollständigkeitsrelation hat einen diskreten und einen kontinuierlichen Anteil:

$$\sum_{n=0}^{N} \psi_n(x)\psi_n^*(y) + \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \psi_k(x)\psi_k^*(y) = \delta(x-y)$$

$$\sum_{n=0}^{N} |n\rangle\langle n| + \int_{-\infty}^{\infty} dk\, |k\rangle\langle k| \equiv \sumint_{\omega} |\omega\rangle\langle\omega| = \mathbb{1}$$ (Bracket-Notation)

- Entwicklung eines beliebigen Vektors aus $\mathscr{H}$ nach Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators schließt die uneigentlichen Eigenvektoren mit ein

- Streuzustände lassen sich idealisiert mit Hilfe umeigentlicher Eigenvektoren bestimmen (benutze Wellenpakete für rigorose Beschreibung)

Spektralsatz (Hilbert, von Neumann):

Sei A ein selbstadjungierter Operator und $|\alpha\rangle$ ein (eigentlicher oder uneigentlicher) Eigenvektor zum Eigenwert α. Dann gilt:

1. Das Spektrum von A ist reell.

2. Orthogonalität: eigentliche und/oder uneigentliche Eigenvektoren stehen senkrecht aufeinander:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0, \qquad \alpha \neq \beta$$

3. Vollständigkeit: eigentliche und uneigentliche Eigenvektoren spannen den ganzen Hilbertraum auf:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int da\, |a\rangle\langle a| \equiv \sum\!\!\!\!\!\!\int_\omega |\omega\rangle\langle\omega| = \mathbb{1}$$

(ohne Beweis)

Spektraldarstellung von Operatoren

Linearer Operator A mit diskretem Spektrum:

$$A|n\rangle = \lambda_n |n\rangle \ , \qquad \mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

Definiere: $P_n^{(A)} := |n\rangle\langle n|$

Projektions Operator auf Eigenvektor $|n\rangle$

$$\left(P_n^{(A)}\right)^2 = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle\langle n| = P_n^{(A)}$$

$$P_n^{(A)} P_m^{(A)} = |n\rangle\langle n|m\rangle\langle n| = \delta_{nm} P_n^{(A)} \qquad \text{(idempotent)}$$

$$A = A\mathbb{1} = A\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n| = \sum_n \lambda_n P_n^{(A)}$$

$A = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n|$ heißt Spektraldarstellung von A.

Benutze Spektraldarstellung um Operatorfunktionen zu definieren:

$$f(A) := \sum_n f(\lambda_n)\,|n\rangle\langle n|$$

Allgemeines Spektrum:

$$A = \mathop{\not{\int}\!\!\!\!\sum}_\alpha \lambda_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad ; \quad f(A) = \mathop{\not{\int}\!\!\!\!\sum}_\alpha f(\lambda_\alpha)\,|\alpha\rangle\langle\alpha|$$

3.7 Mehr über Darstellungstheorie

Entwicklung von beliebigen Zuständen $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ nach uneigentlichen Eigenfunktionen

Ortsoperator:

$$\hat{x}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle\,, \quad \langle\xi|\xi'\rangle = \delta(\xi-\xi')\,, \quad \int d\xi\,|\xi\rangle\langle\xi| = \mathbb{1}$$

Daher:

$$|\alpha\rangle = \int d\xi\,|\xi\rangle\langle\xi|\alpha\rangle$$ wobei

$$\langle\xi|\alpha\rangle = \int dx\,\psi_\xi^*(x)\,\psi_\alpha(x) = \int dx\,\delta(x-\xi)\,\psi_\alpha(x) = \psi_\alpha(\xi)$$

EF von $\hat{x}$

Sei $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ ein Zustand, charakterisiert durch Quantenzahl α

$$|\alpha\rangle = \int dx \; |x\rangle\langle x|\alpha\rangle \quad , \qquad \langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x)$$

Die Wellenfunktion $\psi_\alpha(x)$ ist die Komponente des Zustands $|\alpha\rangle$ bzgl. der uneigentlichen Basis $\{|x\rangle \,|\, x \in \mathbb{R}\}$ des Ortsoperators.

Impulsoperator:

$$\hat{p}\,|k\rangle = \hbar k\,|k\rangle, \quad \langle k|k'\rangle = \delta(k-k'),$$

$$\int dk \; |k\rangle\langle k| = \mathbb{1}$$

$$|\alpha\rangle = \int dk \; |k\rangle\langle k|\alpha\rangle$$

$$\langle k|\alpha\rangle = \int dx \; u_k^*(x)\,\psi_\alpha(x) = \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \psi_\alpha(x)$$

$$\underset{F.T.}{=} \tilde{\psi}_\alpha(k)$$

$\psi_\alpha(x)$	$\longleftrightarrow$	$\tilde{\psi}_\alpha(k)$	Komponenten
$\{|x\rangle\}$		$\{|k\rangle\}$	Basis

Ortsdarstellung: $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$; dann ist seine Ortsdarstellung

$$\langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x)$$

Sei $\{|n\rangle\}$ eine Basis von EF eines selbstadjungierten Operators, mit diskretem Spektrum: $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$

$$|n\rangle \doteq \varphi_n(x)$$

"$\doteq$": "wird dargestellt durch"

Zeige nun dass $\langle x|n\rangle = \varphi_n(x)$ in Ortsdarstellung.

$$\psi_\alpha(x) = \sum_n c_n^{(\alpha)} \varphi_n(x) \iff |\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow c_n^{(\alpha)} = \langle n|\alpha\rangle$$

$$\underset{\psi_\alpha(x)}{\overset{\shortparallel}{\langle x|\alpha\rangle}} = \sum_n \langle x|n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} \langle x|n\rangle$$

$$\Rightarrow \langle x|n\rangle = \varphi_n(x)$$

d.h. $\varphi_n(x)$ ist EF der Observablen A in der Ortsdarstellung.

Betrachte nun: $\langle\beta|A|\alpha\rangle$

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \int dx \int dy\, \langle\beta|x\rangle\langle x|A|y\rangle\langle y|\alpha\rangle$$

$$= \int dx \int dy\, \psi_\beta^*(x) \langle x|A|y\rangle \psi_\alpha(y)$$

$\langle x|A|y\rangle$: Matrixdarstellung von A im Ortsraum.

Sei $A = \hat{x}$, dann ist

$$\langle x | A | y \rangle = y \langle x | y \rangle = y \, \delta(x-y)$$

und somit

$$\langle \beta | \hat{x} | \alpha \rangle = \int dx \; \psi_\beta^*(x) \, x \, \psi_\alpha(x)$$

Mit der Spektraldarstellung zeigt man außerdem

$$\langle \beta | f(\hat{x}) | \alpha \rangle = \int dx \; \psi_\beta^*(x) \, f(x) \, \psi_\alpha(x)$$

Impulsdarstellung:

$$|p\rangle \doteq u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\langle p' | p \rangle = \hbar \, \delta(p'-p)$$

(denn: $\langle p' | p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dx \; e^{-ip'x/\hbar} \, e^{ipx/\hbar}$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dx \; e^{-i(p'-p)x/\hbar} \underset{y=\frac{x}{\hbar}}{=} \frac{\hbar}{2\pi} \int dy \; e^{-i(p'-p)y} = \hbar \, \delta(p'-p) \Big)$$

$$\langle p | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-ipx/\hbar} \psi_\alpha(x) = \tilde{\psi}_\alpha(p) \quad \left(\equiv \tilde{\psi}_\alpha(k) \right)$$

Impulsdarstellung des Ortsoperators (Abschnitt 1.5)

$$\hat{x} = -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}$$

Optional:

Wenn man möchte, kann man dies mit unserem Formalismus überprüfen:

Matrixdarstellung von $\hat{x}$ im Impulsraum:

$$\langle p|\hat{x}|q\rangle = \int dx \int dy \, \langle p|x\rangle\langle x|\hat{x}|y\rangle\langle y|q\rangle$$

$$= \int dx \int dy \; u_p^*(x)\, x \langle x|y\rangle \, u_q(y)$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int dx \; e^{-i(p-q)x/\hbar} \; x \;=\; -\frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{2\pi}\,\frac{\partial}{\partial p}\int dx\, e^{-i(p-q)x/\hbar}$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\hbar\,\delta(p-q)$$

Damit ist

$$\langle \beta|\hat{x}|\alpha\rangle = \int\frac{dp}{\hbar}\int\frac{dq}{\hbar}\,\langle\beta|p\rangle\langle p|\hat{x}|q\rangle\langle q|\alpha\rangle$$

$$= -\frac{\hbar^2}{i}\int\frac{dp}{\hbar}\int\frac{dq}{\hbar}\,\tilde{\varphi}_\beta^*(p)\left[\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-q)\right]\tilde{\varphi}_\alpha(q)$$

$$\underset{\text{P.I.}}{=} \frac{\hbar^2}{i}\int\frac{dp}{\hbar}\int\frac{dq}{\hbar}\left[\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\varphi}_\beta^*(p)\right]\delta(p-q)\,\tilde{\varphi}_\alpha(q)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int\frac{dp}{\hbar}\left[\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\varphi}_\beta^*(p)\right]\tilde{\varphi}_\alpha(p)$$

$$\underset{\text{P.I.}}{=} \int\frac{dp}{\hbar}\,\tilde{\varphi}_\beta^*(p)\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right)\tilde{\varphi}_\alpha(p)$$

$\perp$

Energiedarstellung

$\{|n\rangle\}$: vollständige Orthonormale Basis des Hamilton-Op.

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle \quad , \quad \langle n|\psi\rangle = \psi_n$$

n ← Quantenzahl

ψ_n: Komponenten von $|\psi\rangle$ in Energiebasis

Matrixdarstellung von H in der Basis der Energieeigen-zustände:

$$\langle m|H|n\rangle = E_n \delta_{mn}$$

$$\{H\} = \begin{pmatrix} E_0 & & 0 \\ & E_1 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ H ist diagonal in der Basis seiner Eigenvektoren

"Lösen der Schrödinger-Gl." $\Leftrightarrow$ "Diagonalisieren"

Basiswechsel:

Für vollständige Orthonormalsysteme in unendlich-dim. Vektorräumen gelten ähnliche Beziehungen wie aus der linearen Algebra bekannt:

Beispiel: Wechsel von Orts- und Energiebasis

$$|n\rangle = \int dx \; |x\rangle\langle x|n\rangle \quad , \quad \langle x|n\rangle = \varphi_n(x)$$

Komponenten der Energieeigenzustände in der Ortsbasis

Definiere Matrix $\underline{S}$ über ihre Elemente:

$$S_{xn} := (\underline{S})_{xn} = \langle x|n\rangle = \varphi_n(x)$$

Dann ist

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle = \sum_n \langle x|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n S_{xn}\,\psi_n$$

(ψ_n)

$\curvearrowright$ $\underline{S}$ bildet die Komponenten von $|\psi\rangle$ in der Energiedarst. (ψ_n) auf diejenigen $(\psi(x))$ in der Ortsdarst. ab.

Analog zeigt man: $\underline{S}^+$ führt von Orts- in Energiedarstellung:

$$(\underline{S}^+)_{nx} = S^*_{xn} = \varphi_n^*(x) = \langle n|x\rangle$$

Also ist

$$(\underline{S}\,\underline{S}^+)(x,y) = \sum_n S_{xn}\,S^*_{yn} = \sum_n \varphi_n(x)\,\varphi_n^*(y) = \delta(x,y)$$

(Vollständigkeit)

$\Rightarrow$ $\underline{S}\,\underline{S}^+ = \mathbb{1}$ (Ort $\rightarrow$ Ort) ($\mathbb{1}$ im Ortsraum)

$$(\underline{S}^+\underline{S})_{nm} = \int dx\, S^*_{xn}\,S_{xm} = \int dx\,\varphi_n^*(x)\,\varphi_m(x) = \delta_{nm}$$

(Orthogonalität)

$\Rightarrow$ $\underline{S}^+\underline{S} = \mathbb{1}$ (Energie $\rightarrow$ Energie) ($\mathbb{1}$ im Energiedarst.)

$\underline{S}\,\underline{S}^+ = \mathbb{1}$, $\underline{S}^+\underline{S} = \mathbb{1}$ **Basiswechsel werden durch <u>unitäre</u> Abbildungen vermittelt!**

Definition $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$: Hilberträume

Ein linearer Operator U der Vektoren $f \in \mathcal{H}_1$ auf $\mathcal{H}_2$ abbildet und dabei die Norm erhält, heißt **unitär**:

$$\| Uf \|_{\mathcal{H}_2} = \| f \|_{\mathcal{H}_1}$$

(Dabei muss Bildraum von U der gesamte Raum $\mathcal{H}_2$ sein)

Für jeden unitären Operatoren U existiert der Inverse Operator U^{-1} und der adjungierte Operator U^+, die beide unitär sind, und für die

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

$$U^+ U = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_1}, \qquad U U^+ = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_2}$$

Falls $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$: $\quad U U^+ = U^+ U = \mathbb{1}$

$$\sum_i U_{im}^* U_{in} = \delta_{mn}$$