

Kontinuierliches Spektrum; uneigentliche Eigenwerte

Impulsoperator:

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

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:

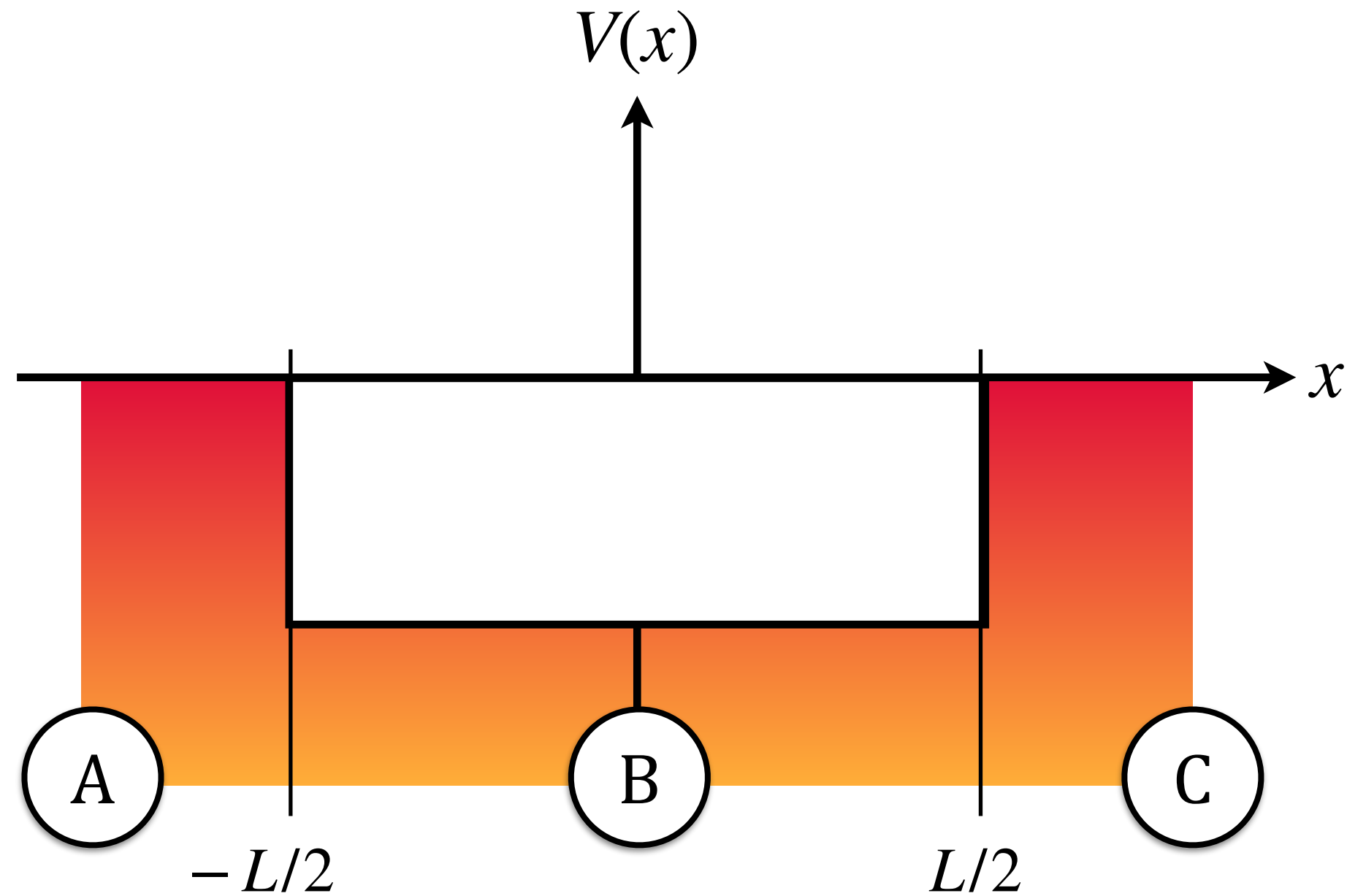
$$(u_k, u_l) = \delta(k - l) = \langle k | l \rangle$$

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

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

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

Endlicher Potentialtopf



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

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

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

(endlich viele Zustände — grafische Lösung — Abschnitt 2.2.1)

Streuzustände: $E > 0 \rightarrow$ kontinuierliches Spektrum

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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{zweifach entartet, d.h. zu jedem gegebenen } E \text{ gibt es zwei Lösungen f\u00fcr } k)$$

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

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

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

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

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

Vollständigkeitsrelation hat einen **diskreten** und einen **kontinuierlichen** Anteil:

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

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

- Entwicklung eines beliebigen Vektors aus \mathcal{H} nach Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators schließt die uneigentlichen Eigenvektoren mit ein
- Streuzustände lassen sich idealisiert mit Hilfe uneigentlicher 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:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0, \quad \alpha \neq \beta$$
3. **Vollständigkeit:** eigentliche und uneigentliche Eigenvektoren spannen den ganzen Hilbertraum auf:

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

(ohne Beweis)



Spektraldarstellung von Operatoren

Linearer Operator A mit diskontinuierlichem Spektrum:

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

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

Projektionsoperator auf Eigenvektor $|n\rangle$

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

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

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

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

Benutze Spektraldarstellung um Operatorfunktion zu definieren:

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

Allgemeines Spektrum:

$$A = \int \lambda_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| ; f(A) = \int f(\lambda_\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

3.7 Mehr über Darstellungstheorie

Entwicklung von beliebigen Zuständen $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ nach unendlich vielen 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:

$$|\alpha\rangle = \int d\xi |\xi\rangle \langle \xi|\alpha\rangle \quad \text{wobei}$$

$$\langle \xi|\alpha\rangle = \int dx \underbrace{\psi_\xi^*(x)}_{\substack{\uparrow \\ \text{EF von } \hat{x}}} \psi_\alpha(x) = \int dx \delta(x-\xi) \psi_\alpha(x) = \psi_\alpha(\xi)$$

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

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

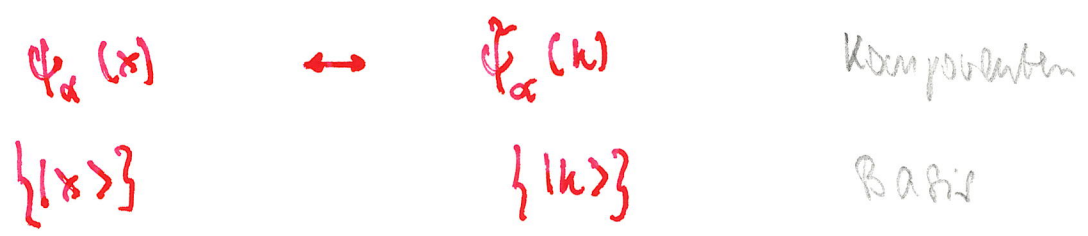
↪ Die Wellenfunktion $\psi_\alpha(x)$ ist die Komponente des Zustands $|\alpha\rangle$ bzgl. der unendlichen Basis $\{|x\rangle | x \in \mathbb{R}\}$ des Ortsoperators.

Impulsoperator:

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle, \quad \langle k|k'\rangle = \delta(k-k'),$$
$$\int dk |k\rangle \langle k| = \mathbb{1}$$

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

$$\langle k|\alpha\rangle = \int dx u_k^*(x) \psi_\alpha(x) = \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \psi_\alpha(x)$$
$$= \underset{\text{F.T.}}{\tilde{\psi}_\alpha(k)}$$



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

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

Sei $\{|n\rangle\}$ eine Basis von EF einer selbstadjungierten Operator, mit diskontinuierlichem 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.

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

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

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

$$\stackrel{!}{=} \psi_\alpha(x)$$

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

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:

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

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

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

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

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

Fourierdarstellung des Ortsoperators (Abschnitt 1.5)

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

Optional:

3.46

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

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

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

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

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

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

Energie darstellung

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

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle n|\psi\rangle = \psi_n \leftarrow \text{Quantenzahl}$$

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

Matrixdarstellung von H in der Basis der Energie eigen-
zustände: $H_{mn} =$

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

$$\{H\} = \begin{pmatrix} E_0 & & 0 \\ & E_1 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad H \text{ ist diagonal in der Basis seiner Eigenvektoren}$$

"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

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

Komponenten der Energie-eigenzustände in der Ortsbasis

Definiere Matrix \underline{S} über ihre Elemente:

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

Dann ist

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

$\Rightarrow \underline{S}$ bildet die Komponenten von $|\psi\rangle$ in der Energiedarst. h auf diejenigen $(\psi(x))$ in der Ortdarst. 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)

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

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

(Orthogonalität)

$$\Rightarrow \underline{S}^+ \underline{S} = \mathbb{1} \quad (\text{Energie} \rightarrow \text{Energie}) \quad (\mathbb{1} \text{ im Energieraum})$$

$$\underline{S} \underline{S}^+ = \mathbb{1}, \quad \underline{S}^+ \underline{S} = \mathbb{1}$$

Basiswechsel werden durch unitäre 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 f 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 Operator U existiert der Inverse Operator U^{-1} und der adjungierte Operator U^+ , die beide unitär sind, und für die

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

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

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

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