III 3. Hermitesche Differentialoperatoren

wichtig in der Quantenmechanik (QM)

Betrachte VR V über Körper $K = \mathbb{C}$ mit Skalarprodukt,

z.B. $g, h : [a,b] \to \mathbb{C}$ 2x diffbar, $\langle g | h \rangle = \int_a^b dx\, g^*(x)\, h(x)$

Ein Operator L ist hermitesch, $L: V \to V$, wenn gilt

$\forall\, \underline{u}, \underline{v} \in V \quad \langle L\underline{u} | \underline{v} \rangle = \langle \underline{u} | L \underline{v} \rangle$ (S. 112)

(Bem $\langle \langle H f | g \rangle \rangle^*$)

- wir beschränken uns auf folgende Differentialoperatoren 2. und 1. Ordnung (mit $p(x) = p_0(x)$, $p_0'(x) = p_1(x)$)

(2) $L = \frac{d}{dx}\left[p(x) \frac{d}{dx}\right] + q(x)$ und (1) $L = p_1(x) \frac{d}{dx} + p_2(x)$

- um die jeweilige Hermitezität zu zeigen betrachte den

Def: hermitesch konjugierten Operator L^+, zu obigem Skalarprodukt:

$$\langle g | L^+ f \rangle \equiv \langle L g | f \rangle = \langle f | L g \rangle^*$$

$$= \int_a^b dx\, (f^* L g)^* = \int_a^b dx\, f(x)\, L^*\, g^*(x) \quad \text{, brauche } = \langle g | L f \rangle$$

Operator (2):

$$= \int_a^b dx\, f\left\{\frac{d}{dx} p^* \frac{d}{dx} g^* + q^* g^*\right\} \qquad \text{partielle Integration}$$

$$= f p^* g^{*\prime}\Big|_a^b + \int_a^b dx \left\{-f' p^* g^{*\prime} + f q^* g^*\right\}$$

$$= \underbrace{(f g'^* - f' g^*) p^*\Big|_a^b}_{} + \int_a^b dx\, g^* \underbrace{\left\{\frac{d}{dx} p^* \frac{d}{dx} + q^*\right\}}_{\hat{=}\, L^+ \,\overset{!}{=}\, L} f$$

Randbedingung, muss wieder erfüllt sein

d.h. L ist hermitesch $\Leftrightarrow$ $\boxed{\begin{array}{l} p(x) = p^*(x) \\ \text{und } q(x) = q^*(x) \end{array}}$

Operator (1): $\mathcal{L} = p_1 \frac{d}{dx} + p_2$, $\mathcal{L}^+ = ?$

und $\langle g|\mathcal{L}^+ f\rangle = \langle f|\mathcal{L} g\rangle^* = \int_a^b dx\, f\{p_1^* \frac{d}{dx} + p_2^*\} g^*$

$= f p_1^* g^* \Big|_a^b + \int_a^b dx \{-\frac{d}{dx}(p_1^* f) g^* + p_2^* g^*\}$

$= \underbrace{f p_1^* g^* \Big|_a^b}_{\text{Randbedingung,}} + \int_a^b dx\, g^* \{ \underbrace{-p_1^* \frac{d}{dx} + (p_2^* - p_1^{*\prime})}_{= \mathcal{L}^+ \overset{!}{=} \mathcal{L}} \} f$

d.h. hier muß Dirichlet gelten $f(b) = f(a) = 0$

d.h. $\mathcal{L}$ hermitesch $\Leftrightarrow$ $\boxed{\begin{array}{l} p_1^*(x) = -p_1(x) \in i\mathbb{R} \\ \text{und } p_2^*(x) - p_1^{*\prime}(x) = p_2(x) \end{array}}$

* Im Gegensatz zu $\mathbb{R}$-VR gibt es für $\mathbb{C}$-VR hermitesche Differentialoperatoren 1. Ordnung! z.B. $p_1(x) = i$ const, $p_2(x) \in \mathbb{R}$

2 extrem wichtige Beispiele aus der Quantenmechanik:

(1) Ordnung $\mathcal{L}_1 = i\hbar \frac{d}{dt}$ $\quad (p_1 = i\hbar = i\frac{h}{2\pi},\ p_2 = 0)$

(2). Ordnung $\mathcal{L}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ $\quad p = -\frac{\hbar^2}{2m},\ q = 0$

in der QM gilt $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\omega t} \Rightarrow \mathcal{L}_1 \Psi(x,t) = \hbar\omega \Psi(x,t)$

Fouriertrafo $\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} \tilde{\Psi}(k,t)$

$\Rightarrow \mathcal{L}_2 \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ikx} \tilde{\Psi}(k,t)$

d.h. $\mathcal{L}_1 \Psi = \mathcal{L}_2 \Leftrightarrow \underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)}$ Schrödinger-gl. für freies Quantenteilchen in 1. Dim

führt nach Fouriertrafo zu

$\frac{p^2}{2m} \tilde{\Psi}(k,t) = E\, \tilde{\Psi}(k,t)$ mit $p = \hbar k$, $E = \hbar\omega$

nicht-relativistische Energie-Impuls beziehung in QM oft $a \to +\infty$, $b \to -\infty$ stationäre (zeitunabh.) Teil

erfüllt Randbed. $\psi(\infty) = \psi(-\infty) = 0$

und $|\psi(x,t)|^2$ entspricht der Aufenthaltswahrscheinlichkeit vom Quantenteilchen am Ort x.

Eigenschaften hermitescher Operatoren

- Zerlegung von bel. Operator A in hermiteschen u. anti-hermiteschen Anteil

Def von L^+: $\langle g | L^+ f \rangle = \langle L g | f \rangle$

und L hermitesch wenn $\forall f, g \in V$ $\langle L g | f \rangle = \langle g | L f \rangle$, d.h. $L^+ = L$

für bel A gilt
$$A = \frac{1}{2}(A + A^+) + \frac{1}{2}(A - A^+)$$
$$= \underbrace{\frac{1}{2}(A + A^+)}_{\text{hermitescher Anteil}} + \underbrace{i \frac{1}{2}(-iA + iA^+)}_{\substack{\text{anti-hermitescher Anteil} \\ = i \cdot \text{hermitescher Op}}}$$

denn: vergleiche

$$\langle g | (A + A^+) f \rangle = \langle g | A f \rangle + \langle A g | f \rangle$$

mit $\langle (A + A^+) g | f \rangle = \langle f | (A + A^+) g \rangle^* = \langle f | A g \rangle^* + \langle f | A^+ g \rangle^*$

$$= \langle A g | f \rangle + \langle A f | g \rangle^* = \langle A g | f \rangle + \langle g | A f \rangle \checkmark$$

$\Rightarrow$ $A + A^+$ ist hermitesch, analog $i(A - A^+)$, d.h. B hermitesch $\Rightarrow$ iB ist anti-hermitesch

- $\langle g | (AB)^+ f \rangle = \langle AB g | f \rangle = \langle B g | A^+ f \rangle = \langle g | B^+ A^+ f \rangle$

d.h. für bel. Operatoren gilt $\boxed{(AB)^+ = B^+ A^+}$

- $\langle g | (A^+)^+ f \rangle = \langle A^+ g | f \rangle = \langle f | A^+ g \rangle^* = \langle A f | g \rangle^* = \langle g | A f \rangle$

d.h. † ist eine Involution $(A^\dagger)^\dagger = A$ f. bel. Op (wie für Matrizen)

- Seien A, B hermitesch und betrachte den Kommutator $[A,B] = AB - BA$

$\Rightarrow$ $i[A,B]$ ist hermitesch: (d.h. $[A,B]$ ist antiv)

$$\langle i(AB-BA)g | f\rangle = -i\langle (AB-BA)g | f\rangle = -i\langle (A^\dagger B^\dagger - B^\dagger A^\dagger) g | f\rangle$$

$$= -i\langle g | ((BA)^\dagger - (AB)^\dagger) f\rangle = -i\langle g | (BA - AB) f\rangle = \langle g | i(AB-BA) f\rangle \checkmark$$

Bemerkung: analog können dieselben Eigenschaften f. symmetrische Op gezeigt werden: auf einem $\mathbb{R}$-VR gilt für bel. A, B:

- $A = \underbrace{\tfrac{1}{2}(A + A^T)} + \underbrace{\tfrac{1}{2}(A - A^T)}$

  symmetrischer u. antiv Anteil von A

- $(AB)^T = B^T A^T$
- $(A^T)^T = A$
- für A, B symmetrisch gilt $[A,B]$ ist antisymmetrisch

- wie auf S. 117 betrachten wir nun ein allgemeines Skalarprodukt auf V ($\mathbb{C}$-VR): $\langle g | f\rangle = \int_a^b dx\, w(x)\, g^*(x)\, f(x)$, mit $w(x) > 0$ auf (a,b) reellwertig

Eigenwertproblem f. hermitischen Diff.-op L:

gesucht in $\underline{L u(x) + \lambda w(x) u(x) = 0}$ Lsg $u(x) \in V$, $\lambda \in K = \mathbb{C}$
(Eigenvektor, "fkt") (Eigenwert)

mit $\hat{L} = -\frac{1}{w(x)} L$ als hermitischen Diff.-op.

• Es gilt, daß die Eigenwerte von $\hat{L} = -\frac{1}{w}L$ reell sind:

Denn: $Lu + \lambda w u = 0 \iff L^* u^* + \lambda^* w u^* = 0$ Differenz $\cdot\, u, u^*$, $u \neq 0$

$$\Rightarrow 0 = \int_a^b dx \left\{ u^* L u + \lambda u^* w u - u L^* u^* - \lambda^* w u u^* \right\}$$

$$= -\langle u|\hat{L}u\rangle + \underbrace{\langle u|\hat{L}u\rangle^*}_{\langle u\hat{L}|u\rangle^*} + (\lambda - \lambda^*)\underbrace{\langle u|u\rangle}_{\neq 0} \Rightarrow \lambda = \lambda^* .$$

Beispiel Schrödingergleichung in 1 Dim:

$$\underbrace{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{} + V(x) \quad \text{ist hermitesch, für } V(x) \in \mathbb{R}$$

$\uparrow$ potential

kinetischer Term

$\frac{p^2}{2m}$ wird durch Diff. op ersetzt

und es gilt $H\Psi(x) = E\Psi(x)$ mit E reell = Energieeigenwert

$\Psi(x)$ Energieeigenfunktion

• Die Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten eines hermiteschen Op $\hat{L} = -\frac{1}{w}L$ sind orthogonal: $\quad Lu + \lambda w u = 0, \quad L v^* + \mu w v^* = 0$

$$\Rightarrow 0 = \int_a^b dx \left\{ v^* L u + \lambda v^* w u - u L^* v^* - \mu w v^* u \right\}$$

$$= -\langle v|\hat{L}u\rangle + \underbrace{\langle u|\hat{L}v\rangle^*}_{\langle \hat{L}u|v\rangle^*} + \underbrace{(\lambda - \mu)}_{\neq 0}\langle v|u\rangle \Rightarrow \langle v|u\rangle = 0 \; ✓$$

• Falls es zu einem Eigenwert mehrere Eigenfunktionen gibt (Entartung) so kann durch Gram-Schmidt eine Orthonormalbasis in diesem Unterraum konstruiert werden.