$$\psi(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | \hat{1} \psi \rangle = \langle \underline{r} | \int d\underline{p} \, |\underline{p}\rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle$$

$$\tilde{\psi}(\underline{p}) = \langle \underline{p} | \psi \rangle \qquad = \int d\underline{p} \, \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \underbrace{\langle \underline{p} | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(\underline{p})}$$

$$\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

„$\underline{r}$", „$\underline{p}$" bilden eine Basis: (Vollständigkeitsrelation)

$$\boxed{\int d\underline{r} \, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}| = \hat{1} \qquad \int d\underline{p} \, |\underline{p}\rangle\langle \underline{p}| = \hat{1}}$$

Auswertung eines beliebigen Skalarprodukts:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{1} \psi_2 \rangle = \int d\underline{r} \, \langle \psi_1 | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r} \, \psi_1^*(\underline{r}) \, \psi_2(\underline{r})$$

$$= \int d\underline{p} \, \tilde{\psi}_1^*(\underline{p}) \, \tilde{\psi}_2(\underline{p})$$

Norm:

$$\|\psi\| = \sqrt{\underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\text{reell}, \geq 0}} = \sqrt{\int d\underline{r} \, |\psi(\underline{r})|^2} = \sqrt{\int d\underline{p} \, |\tilde{\psi}(\underline{p})|^2}$$

Skalarprodukt zw. den Basisvektoren der $\underline{r}$- bzw. $\underline{p}$-Basis

$$\langle \underline{r}' | \underline{r} \rangle = \langle \underline{r}' | \hat{1} \underline{r} \rangle$$ Impulsbasis

$$= \int d\underline{p} \; \langle \underline{r}' | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle$$

$$= \int d\underline{p} \; \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot (\underline{r}' - \underline{r})}$$

$$\boxed{\frac{\underline{p}}{\hbar} = \underline{k}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{k} \; e^{i \underline{k} \cdot (\underline{r}' - \underline{r})}$$

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

die $\underline{r}$- ~~Vek~~ Basisvektoren $(|\underline{r}\rangle)$
bilden eine kontinuierliche Basis mit „orthogonale" Einheitsvektoren !

analog:

$$\langle \underline{p}' | \underline{p} \rangle = \ldots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{r} \; e^{\frac{i}{\hbar} \underline{r} \cdot (\underline{p} - \underline{p}')}$$

$$\boxed{\underline{p} = \hbar \underline{k}}$$

$$= \frac{1}{\hbar^3} \delta(\underline{k}' - \underline{k}) = \delta(\underline{p}' - \underline{p})$$

(ii) Besondere Eigenschaften von $\mathcal{H}$

(insbesondere wichtig für ∞-dimensionale Probleme !)

- $\mathcal{H}$ ist ein vollständiger Vektorraum

Der Grenzwert jeder Cauchyfolge $|\psi_n\rangle$ liegt in $\mathcal{H}$
(d.h. konvergiert gegen ein Element $|\psi\rangle$ im $\mathcal{H}$)

Bemerkung:
Eine Folge heißt Cauchyfolge, falls ~~zu~~ zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $n_0 \in \mathbb{N}$ existiert, so dass

$$\| \psi_m - \psi_n \| < \varepsilon \quad , \quad \forall n, m > n_0$$

- $\mathcal{H}$ ist separabel

Es gibt in $\mathcal{H}$ (mindestens) eine dichte Folge von Vektoren $|\psi_n\rangle$

Diese Folgen kommen auch jedem Zustandsvektor des vollständigen Orthonormalsystems von $\mathcal{H}$ beliebig nah

Da die Glieder einer Folge abzählbar sind, folgt:

$\Rightarrow$ Dimension von $\mathcal{H}$ ist höchstens abzählbar unendlich!

- „Dirac-Vektoren": Uneigentliche Vektoren im Hilbertraum

z.B. $|x\rangle$, $|p\rangle$ Basisvektoren in der Orts- bzw. Impulsdarstellung

Diese Vektoren sind kontinuierlich (nicht abzählbar!)

Eigenschaften:

- Dirac-Vektoren $|d_k\rangle$ bezeichnet man als „normiert", falls

$$\langle d_k | d_{k'} \rangle = \delta(k - k')$$

Kontinuierlicher Index

(Unterschied zu gewöhnl. Vektoren in $\mathcal{H}$:
Normierung, falls $\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{\|\psi\|}=1$)

aber: Es existiert das Skalarprodukt mit gewöhnl. Zuständen::

z.B. $\langle \underline{r}|\psi\rangle = \psi(\underline{r})$
Wellenfunktion

- Erweiterter Hilbert-Raum

$\hat{=}$ Menge der eigentlichen und uneigentlichen Zustandsvektoren

- Dualer Raum

$|\psi\rangle$
„ket"-Vektor in $\mathcal{H}$

$\boxed{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}$ „bra-c-ket"

$\langle\psi|$
„bra"-Vektor : Vektor in einem zu $\mathcal{H}$ dualen Raum ($\mathcal{H}^*$)

III.3. Operatoren im Hilbertraum

zum Begriff des Operators:

sei $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (Ket-Vektor im Hilbertraum)

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = |\phi\rangle \in \mathcal{H}$$

Analogie: lin. Algebra
$\underset{\text{Matrix}}{\underline{\underline{A}}}\,\underline{y} = \underline{x}$

Abbildung eines Zustandsvektors $|\psi\rangle$ auf einen anderen Zustand $|\phi\rangle$ im Hilbertraum

Allgemein:

Quantenmechanische „Observablen", z.B. Impuls, Ort, Energie, Drehimpuls werden dargestellt durch lineare (hermitesche) Operatoren

↳ noch zu klären!

Beispiele:

$\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{r}}$: Impuls- bzw. Ortsoperator

$\hat{H}$: Hamiltonoperator

zeitunabh. SG: $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$

$\Rightarrow \hat{H}$ entspricht der Energie

$\hat{1}$ (oder $\underline{\underline{\hat{1}}}$) Einheitsoperator: $\hat{1}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$

Erinnerung:

Ortsdarstellung
$\hat{\underline{r}} \rightarrow \underline{r}$
$\hat{\underline{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla$

Impulsdarstellung
$\hat{\underline{r}} \rightarrow -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}$
$\hat{\underline{p}} \rightarrow \underline{p}$

Alternative Darstellung des Impulsoperators:

Ausgangspunkt: $\hat{p}\,\underbrace{\langle \underline{r}|p\rangle}_{\substack{\text{ebene Welle}\\ \text{ortsabhängige Funktion!}\\ \text{bzw.: „Impuls-Zustand"}\\ \text{in der Ortsdarstellung}}} = \frac{\hbar}{i}\nabla \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar\, p\cdot \underline{r}}$

$$= p\, \underbrace{\frac{e^{i/\hbar\, p\cdot\underline{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}_{\langle \underline{r}|p\rangle}$$

$$\Rightarrow \underline{\hat{p}\,\langle \underline{r}|p\rangle = p\,\langle \underline{r}|p\rangle}$$

bzw. $\underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \hat{p} \langle \underline{r}|p\rangle}_{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i}\nabla \langle \underline{r}|p\rangle} = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\, p\, \langle \underline{r}|p\rangle$

$$= p\, \underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}|}_{1}\, p\rangle$$

$$= \underbrace{p}_{\substack{\text{kein Operator, sondern}\\ \text{einfach Impuls-Vektor!}}}\, |p\rangle$$

Zwei Schlussfolgerungen:

① $\hat{p} = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \frac{\hbar}{i}\nabla \langle \underline{r}|$ „Darstellungsfreier" Impulsoperator

② $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$

Eigenwertgleichung!

Die Vektoren $|\underline{p}\rangle$ sind die Eigenzustände des Impulsoperators. Die zugehörige Ortsdarstellung $\langle \underline{r}|\underline{p}\rangle$ sind ebene Wellen !!

analog für Ortsoperator

$$\hat{\underline{r}} = \int d\underline{p}\, |\underline{p}\rangle \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{p}}\right)\langle \underline{p}|$$

und $\hat{\underline{r}}|\underline{r}\rangle = \underline{r}|\underline{r}\rangle$

Folgerungen:

$$\langle \underline{p}'|\hat{\underline{p}}|\underline{p}\rangle \overset{②}{=} \underline{p}\,\langle \underline{p}'|\underline{p}\rangle = \underline{p}\;\delta(\underline{p}'-\underline{p})$$

$$\langle \underline{r}'|\hat{\underline{r}}|\underline{r}\rangle = \underline{r}\;\delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

betrachte nun den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{\underline{r}},\hat{\underline{p}})$$

Zeitunabh. Problem

Spektraldarstellung

Ausgangspunkt: Zeitunabh. SG

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

Vorstellung: diskretes Problem

Ortsdarstellung:

$$\hat{H}\,\varphi_n(\underline{r}) = E_n\varphi_n(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad \varphi_n(\underline{r}) = \langle \underline{r}|\varphi_n\rangle$$

und $\hat{H} = \hat{H}(\underline{r}, \underbrace{\frac{\hbar}{i}\nabla_{\underline{r}}}_{\hat{p}})$

analog zur Vorgehensweise beim $\hat{p}$-Operator lässt sich zeigen:

$$\underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\, \hat{H}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla)\, \langle \underline{r}|}_{\text{darstellungsfreie Form für } \hat{H}}$$

Das ist noch nicht die Spektraldarstellung!

Nehme nun an, dass die $|\varphi_n\rangle$ (Energie-Eigenzustände) eine (vollständige) Basis bilden.

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \hat{1} \quad (*)$$

mit $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{m,n}$

diskrete Basis

$\Rightarrow$ Spektraldarstellung:

$$\hat{H} = \hat{H}\hat{1} = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} E_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

Zeitunabhängige SG
$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

Energiezustände

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{E_n}_{\text{Energie-Eigenwert}} \underbrace{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}_{\text{Projektionsoperator auf den n-ten Eigenzustand}}}$$

denn $|\varphi_n\rangle \underbrace{\langle\varphi_n|\psi\rangle}$
$= \text{Zahl}\ |\varphi_n\rangle$

III.4. Rechenregeln für Operatoren

typischerweise betrachtet man lineare Operatoren

$$\hat{A}\,(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle)$$
$$= \lambda_1 \hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{A}|\psi_2\rangle$$

$$(\hat{A}+\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$$

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$$ erst $\hat{B}$ anwenden, dann $\hat{A}$

Beachte: im allgemeinen ist $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$

Kommutator $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Adjungierter Operator

sei $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi_2\rangle$

Skalarprodukt mit einem anderen Zustand

$$\underbrace{\langle\psi_1|\phi\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle}$$

$\hat{A}$ wirkt hier nach „rechts" !

„Matrixelement" des Operators $\hat{A}$ mit dem Ket $|\psi_2\rangle$ und dem bra $\langle\psi_1|$

Der zu $\hat{A}$ adjungierte Operator ist definiert durch die Relation:

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle \overset{!}{=} \langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle \quad (*)$$

adjungierter Operator

in Worten:
Zieht man im Matrixelement den Operator „nach vorne", so geht dieser in seinen adjungierten Operator über!

Ortsdarstellung von $(*)$

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\underbrace{\hat{1}}_{\int d\underline{r}\,|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}\hat{A}|\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r}\ \underbrace{\langle\psi_1|\underline{r}\rangle}_{\langle\underline{r}|\psi_1\rangle^*}\ \underbrace{\langle\underline{r}|\hat{A}|\psi_2\rangle}_{\hat{A}\langle\underline{r}|\psi_2\rangle}$$

$$= \int d\underline{r}\ \psi_1^*(\underline{r})\ \hat{A}\ \psi_2(\underline{r})$$

$$(*)\ \overset{!}{=} \langle A^+\psi_1|\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r} \left(\hat{A}^+ \psi_1(\underline{r}) \right)^* \psi_2(\underline{r})$$

Alternativ (zu ⊛) kann man den adjungierte Operator definieren wie folgt:

$$\hat{A} |\psi_2\rangle = |\phi\rangle \iff \langle \hat{A}^+ \psi_2 | = \langle \psi_2 | \hat{A}^+$$
$$= \langle \phi |$$

Es gilt:

- $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$

denn:
$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle$$
$$= \left(\langle \psi_2 | \hat{A}^+ \psi_1 \rangle \right)^*$$

$\boxed{\text{benutzt: } \langle \phi | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \phi \rangle^*}$

$$= \left(\langle (\hat{A}^+)^+ \psi_2 | \psi_1 \rangle \right)^*$$

nochmaliges Drehen des Skalarprodukts
$$= \left(\left(\langle \psi_1 | (\hat{A}^+)^+ \psi_2 \rangle \right)^* \right)^*$$
$$= \langle \psi_1 | (\hat{A}^+)^+ | \psi_2 \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A} = (\hat{A}^+)^+$$

- $(\lambda\hat{A})^+ = \lambda^* \hat{A}^+ \quad \lambda \in \mathbb{C}$

- $(\hat{A}+\hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$

- $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

denn: $\langle \psi_1 | \hat{A}\hat{B} | \psi_2 \rangle = \langle (\hat{A}\hat{B})^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle$

$$= \langle \psi_2 | (\hat{A}\hat{B})^+ \psi_1 \rangle^* \quad (1)$$

und $\langle \psi_1 | \hat{A}\hat{B} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle$

$$= \langle \hat{B}^+ \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$= \langle \psi_2 | \hat{B}^+ \hat{A}^+ | \psi_1 \rangle^* \quad (2)$$

Vergleiche (2) und (1) $\Rightarrow (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$

Spezialfall

extrem wichtig für Operatoren, die physikalische Observablen beschreiben

Ein selbstadjungierter (hermitescher) Operator ist dadurch definiert, dass

$\hat{A}^{+} = \hat{A}$

$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$