5.5 Fünf Postulate

1. Postulat: Zustand eines quantenmechanischen Systems (qmS)

Alle physikalischen Eigenschaften eines qmS zur Zeit t sind im Zustandsvektor (ZV) $|\psi(t)\rangle$ codiert. Die möglichen Zustände eines qmS bilden einen linearen Raum, den Zustandsraum H (Hilbert-Raum)

2. Postulat: Physikalische Größen

Jede Observable[1)] Q wird durch einen im Zustandsraum H wirkenden linearen hermiteschen (selbstadjungierten) Operator $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ beschrieben.

Folgen: (i) EF von $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ bilden VONS, also eine Basis in H

(ii) EW und quantenmechanischen Erwartungswerte von $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ sind reell

(iii) $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$ bei diskretem Spektrum Dimension von H abzählbar unendlich, bei kontinuierlichem Spektrum Dimension überabzählbar unendlich.

3. Postulat: Messung physikalischer Größen. Messwerte. Zustandsreduktion

Wird eine Observable Q im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, so kann das Messergebnis nur einer der Eigenwerte q_n des zugeordneten Operators $\hat{Q}$ sein.

Unmittelbar nach der Messung im Zustand $|\psi\rangle$ befindet sich das qmS in dem zum EW q_n gehörenden Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ (entsprechend Eigenwertgleichung $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$).

Bemerkung: Dass die EW von $\hat{Q}$ die möglichen Messwerte von Q sind, ist einer der Gründe, den Observablen hermitesche Operatoren zuzuordnen. Bei diskretem Spektrum von $\hat{Q}$ sind die möglichen Messergebnisse "quantisiert". Die hermiteschen Operatoren spielen also eine zentrale Rolle in der mathematischen Struktur der QM.

Beachte: Messung ändert den Zustand! $|\psi\rangle \underset{\text{mit Ergebnis } q_n}{\overset{\text{Messung von Q}}{\longrightarrow}} |\psi_n\rangle$ Zustandsreduktion:

Eine (unmittelbar) anschließende zweite Messung trifft das qmS in der Regel bereits in einem anderen Zustand an.

Welcher der Eigenwerte aus dem Spektrum von $\hat{Q}$ wird nun aber tatsächlich gemessen?

Die Antwort auf diese Frage ist statistischer Natur und abhängig vom Systemzustand $|\psi\rangle$:

4. Postulat: Messwahrscheinlichkeiten

Wird die Observable Q eines qmS im (normierten) Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis den (nichtentarteten) EW des dazugehörigen (hermiteschen) Operators $\hat{Q}$ liefert gleich

$$\mathrm{Prob}(q = q_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2, \quad \hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle \tag{5.20}$$

Der Zustand $|\psi\rangle$, in dem die Observable Q gemessen werden soll (er sei bekannt) ist als Superposition der EF $|\psi_n\rangle$ von $\hat{Q}$ darstellbar (da $\hat{Q} = \hat{Q}^+$, bildet $\{|\psi_n\rangle\}$ eine Basis in H)

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle, \quad c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle.$$

Die Wahrscheinlichkeit, mit der in $|\psi\rangle$ der Wert q_n gemessen wird, ist durch das Betragsquadrat der Entwicklungskoeffizienten $c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$ gegeben.

Ist der Eigenwert q_n entartet, gehören zu ihm mehrere orthonormierte Eigenfunktionen $|\psi_n^i\rangle$ entsprechend $\hat{Q}|\psi_n^i\rangle = q_n|\psi_n^i\rangle, \; i = 1,\ldots,g_n$. g_n ist der Grad der Entartung des EW q_n. In diesem Fall gilt

$$\mathrm{Prob}(q = q_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle\psi_n^i|\psi\rangle\right|^2. \tag{5.21}$$

$\{|\psi_n^i\rangle\}$ ist das System orthonormierter Vektoren, die im Eigenraum H_n zum EW q_n von $\hat{Q}$ eine Basis bilden. $|\psi\rangle$ kann nach den $|\psi_n^i\rangle$ entwickelt werden.

Beachte: Für die bedingte Wahrscheinlichkeit Prob($q = q_m$| $q = q_n$) gilt

$$\mathrm{Prob}(q = q_m \mid q = q_n) = \left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2 = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \tag{5.22}$$

$\rightarrow$ Eine "zeitnahe" erneute Messung von Q (mit derselben Messapparatur) ergibt mit Sicherheit wieder q_n. Offensichtlich sichert die Zustandsreduktion die Reproduzierbarkeit der Messung: Für eine Theorie, die Anspruch auf die Beschreibung von Experimenten erhebt, ist die Reproduzierbarkeit einer Messung unverzichtbar.

Zwischenfazit:

Sicher ist ($\rightarrow$ 3. Postulat), dass eine Messung von Q im Zustand $|\psi\rangle$ ($\rightarrow$ 1. Postulat) einen Eigenwert q_n aus dem Spektrum des repräsentierenden Operators $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ ($\rightarrow$ 2. Postulat) ergibt. Welcher der Eigenwerte tatsächlich gemessen wird, kann nur mit einer Wahrscheinlichkeit $|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$ vorhergesagt werden ($\rightarrow$ 4. Postulat).

5. Postulat: Zeitliche Entwicklung des Zustandes

Die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ wird durch

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad \rightarrow \text{ Schrödinger-Gleichung} \qquad (5.23)$$

mit dem (hermiteschen) **Hamilton-Operator** $\hat{H}$ des qmS beschrieben.

Bem.: Gemeint ist die zeitliche Entwicklung des Zustand zwischen zwei Messungen; ansonsten Zustandsreduktion.
(5.23) ist die darstellungsunabhängige Schreibweise der SG

• Quantenmechanischer Erwartungswert (qmEWW) einer Observablen Q im Zustand $|\psi\rangle$.

Wir haben

$$\langle Q\rangle = \sum_n q_n = \text{Prob}(q = q_n) =$$

$$= \sum_n q_n \left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2 = \sum_n q_n \langle\psi_n|\psi\rangle^* \langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n q_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|q_n\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle \underset{\text{EWG}}{=}$$

$$= \sum_n \langle\psi|\hat{Q}\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|\hat{Q}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{Q}\underbrace{\left(\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)}_{\hat{1}}|\psi\rangle = \underline{\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle\hat{Q}\rangle_{|\psi\rangle}}$$

also

$$\underline{\langle Q\rangle = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle} \tag{5.23}$$

Das ist die (darstellungsunabhängige) Verallgemeinerung des uns aus der Schrödinger´schen Wellenmechanik bekannten Ausdrucks

$$\langle\hat{Q}\rangle = \int d^3r\ \psi^*(\underline{r})\ \hat{Q}\ \psi(\underline{r}) \tag{5.23'}$$

• **Projektionsoperator und Messung**

Wir definieren den Projektionsoperator/Projektor

Def.: $\underline{\hat{P}_{|\psi_n\rangle} = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|}$ (5.24)

Dann ist die Wahrscheinlichkeit, mit der q_n gemessen wird

$$\text{Prob}(q = q_n) = \left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2 = \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_{|\psi_n\rangle}|\psi\rangle,$$

also gleich dem qm Erwartungswert des Projektors im Zustand $|\psi\rangle$.

Da mit Sicherheit einer der EW von $\hat{Q}$ gemessen wird, muss gelten

$$1 = \sum_n \text{Prob}(q = q_n) = \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Das ist die darstellungsunabhängige Formulierung der Normierungsbedingung, die wir in der Schrödinger´schen Wellenmechanik in der Form

$$\int d^3r\ \psi^*(\underline{r})\,\psi(\underline{r}) = 1$$

bereits kennen gelernt haben (→ statistische Interpretation der Wellenfunktion).

Außerdem lässt sich der qm Erwartungswert einer Observablen Q im Zustand $|\psi\rangle$ in der Form

$$\langle\hat{Q}\rangle = \sum_n q_n \left|\langle\psi_n|\psi\rangle\right|^2 = \sum_n q_n \langle\psi_n|\psi\rangle\langle\psi|\psi_n\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\underbrace{\psi\rangle\langle\psi}_{\hat{P}_{|\psi\rangle}}|\hat{Q}\,\psi_n\rangle$$

darstellen, also

$$\langle\hat{Q}\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\hat{P}_{|\psi\rangle}\cdot\hat{Q}|\psi_n\rangle = \mathrm{Spur}\,\{\hat{P}_{|\psi\rangle}\cdot\hat{Q}\}\,.$$

• Nachtrag: Hermitesche Konjugation in Dirac-Schreibweise

(!): Ausdruck aus Konstanten, Kets, Bras, Operatoren
(?): hermitesch konjugierter Ausdruck

1) Man nehme folgende Ersetzungen vor: Konstante $\lambda \to \lambda^*$
Ket $|\psi\rangle \to \langle\psi|$
Bra $\langle\psi| \to |\psi\rangle$
Operatoren → adjungierte Operatoren

2) Man kehre nach diesen Ersetzungen die Reihenfolge der Faktoren um, die Anordnung der Konstanten ist dabei beliebig.

Beweis: Matrizenmultiplikation

■ Beispiele in der Übung

6. Darstellungen der Quantenmechanik

Wiederholung: Linearer Vektorraum Φ.

- Jeder Vektor $\underline{x} \in \Phi$ ist als Linearkombination

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{N} c_i \underline{e}_i \ , \quad c_i = \underline{x} \cdot \underline{e}_i \, , \quad \text{denn } \underline{e}_i \cdot \underline{e}_k = \delta_{ik} \text{ orthonormiert, } i = 1, \ldots, N \rightarrow \text{endlich} \tag{6.1}$$

der Basisvektoren $\{\underline{e}_i\}$ darstellbar, wobei die Entwicklungskoeffizienten c_i die Skalarprodukte aus $\underline{x}$ und $\underline{e}_i$ sind.

Darstellung des Vektors $\underline{x}$ zur Basis $\{\underline{e}_i\}$ heißt der Spaltenvektor

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\underline{x}, \underline{e}_1) \\ (\underline{x}, \underline{e}_2) \\ \vdots \\ (\underline{x}, \underline{e}_N) \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

aus den Entwicklungskoeffizienten c_i .

- Hilbert-Raum: Entwicklungsatz/Vollständigkeitsrelation in Dirac-Notation

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle \text{ mit } c_n = \langle n|\psi\rangle, \text{ denn } \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \text{ orthonormiert, wenn } \{|n\rangle\} \text{ ein VONS} \tag{6.1'}$$

Darstellung von $|\psi\rangle$ zur Basis $\{|n\rangle\}$ heißt der Spaltenvektor

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} . \tag{6.2'}$$

6.1 **Ortsdarstellung der QM.** (Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$) **Schrödinger´sche Wellenmechanik**

Wir verwenden als Basis das VONS aus den EF $|\underline{r}'\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$ definiert durch

$$\hat{\underline{r}}\,|\underline{r}'\rangle = \underline{r}'\,|\underline{r}'\rangle \tag{6.3}$$

$|\underline{r}'\rangle$ beschreibt den Zustand, in dem das qmT den definierten Ort $\underline{r} = \underline{r}'$ hat. Demzufolge ist $\underline{r}'$ in (6.3) eine kontinuierliche Variable, also überabzählbar unendlich.
Bei Ortsmessung ist die Wahrscheinlichkeit, das qmT am Ort $\underline{r}'$ zu finden gleich (4. Postulat)

$$\mathrm{Prob}(\underline{r} = \underline{r}') = \left|\langle\underline{r}'|\psi\rangle\right|^2 = |\psi(\underline{r}')|^2$$

in Übereinstimmung mit der Born´schen Deutung/statistischen Interpretation der Wellenfunktion. Wir halten also fest. Die Ortsdarstellung der WF lautet

$$\langle\underline{r}'|\psi\rangle = \psi(\underline{r}') \ . \tag{6.4}$$

Dabei ist $\psi(\underline{r}')$ der <u>kontinuierliche</u> Spaltenvektor der Entwicklungskoeffizienten des Zustands $|\psi\rangle$ nach den EF des Ortsoperators. Die <u>Vollständigkeit</u> des VONS $\{|\underline{r}\rangle\}$ schreibt sich als

$|\psi\rangle = \int d^3r\, \psi(\underline{r})\,|\underline{r}\rangle$ mit dem <u>kontinuierlichem</u> "Index" $\underline{r}$ und $\sum_n$ ersetzt durch $\int d^3r$

Dann gilt

$$\langle\underline{r}'|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\,\langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle \overset{(2)}{=} \psi(\underline{r}') = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\,\delta(\underline{r}-\underline{r}')\ , \text{ d.h. } \langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\ . \tag{6.5}$$

Schlussfolgerung: Die Basisvektoren der Ortsdarstellung $|\underline{r}'\rangle$ zu unterschiedlichen Ortswerten $\underline{r}' \neq \underline{r}$ sind orthogonal, aber nicht im üblichen Sinne normiert, weil für $\underline{r}' = \underline{r}$ streng genommen divergent. Lassen wir jedoch verallgemeinerten Orthogonalitätsbedingungen der Form (6.5) zu (das bedeutet, wir lassen auch die Dirac-Vektoren als Elemente des Hilbert-Raums zu) auf, dann bilden die EF von $\hat{\underline{r}}$ ein VONS.

Beachte:

(i) $\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \quad \rightarrow \quad \hat{1} = \int d^3r \, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| \quad \text{oder} \quad \hat{1} = \int dp \, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|$ (6.6)

sind Darstellungen des $\hat{1}$ - Operators bei Wahl der VONS $\{|n\rangle\}$ (diskret) und $\{|\underline{r}\rangle\}$ oder $\{|\underline{p}\rangle\}$, kontinuierlich.

(ii) Wir verwenden im Folgenden die sogenannte Spektraldarstellung eines Operators $\hat{Q}$

$$\hat{Q} = \sum_{n=1}^{\infty} q_n |n\rangle\langle n| \text{ oder } \hat{\underline{r}} = \int d^3r \, \underline{r} |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|, \quad \hat{\underline{p}} = \int d^3r \, \underline{p} |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}| \quad \text{usw.} \tag{6.7}$$

$\hat{Q}$ angewendet auf $|m\rangle$ ergibt mit (6.7) $\hat{Q}|m\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} q_n |n\rangle\langle n|m\rangle = q_m |m\rangle$, also die Eigenwertgleichung für $\hat{Q}$, usw.

- **Ortsdarstellung des Ortsoperators**

Die Ortsdarstellung von $|\psi\rangle$ ist $\langle\underline{r}|\psi\rangle = \psi(\underline{r})$. Auch die Operatoren $\hat{Q}$ haben von der jeweils verwendeten Basis abhängige, unterschiedliche Darstellungen im Hilbert-Raum.

Wie lautet die Ortsdarstellung des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$? Da $\hat{\underline{r}}|\psi\rangle = |\hat{\underline{r}}\,\psi\rangle$, rechnen wir zur Beantwortung dieser Frage die Ortsdarstellung des Zustandsvektors $|\hat{\underline{r}}\,\psi\rangle$ aus. Wir finden

$$\langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}\psi\rangle = \langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}|\psi\rangle = \langle\underline{r}|\underbrace{\int d^3r' \, \underline{r}' \, |\underline{r}'\rangle\langle\underline{r}'|}_{\substack{\text{Spektraldarstellung} \\ \text{von } \hat{\underline{r}}' \text{ zur Basis } \{|\hat{\underline{r}}'\rangle\}}}|\psi\rangle = \int d^3r' \, \underline{r}' \underbrace{\langle\underline{r}|\underline{r}'\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')} \langle\underline{r}'|\psi\rangle = \int d^3r' \, \underline{r}' \delta(\underline{r}-\underline{r}') \overbrace{\langle\underline{r}'|\psi\rangle}^{\psi(\underline{r}')} = \underline{r}\langle\underline{r}|\psi\rangle = \underline{r}\,\psi(\underline{r})$$

oder alternativ

$$\langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}\psi\rangle = \langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}|\psi\rangle \overset{\hat{\underline{r}}=\hat{\underline{r}}^*}{=} \langle\hat{\underline{r}}\,\underline{r}|\psi\rangle = \underbrace{\underline{r}}_{\text{EW reell}} \langle\underline{r}|\psi\rangle = \underline{r}\,\psi(\underline{r})$$

also $\quad \hat{\underline{r}}\,\psi(\underline{r}) = \underline{r}\,\psi(\underline{r})$ (6.8)

In Ortsdarstellung ist $\hat{\underline{r}}$ einfach der Produktoperator. Die Wirkung von $\hat{\underline{r}}$ auf $|\psi\rangle$ ist in Ortsdarstellung äquivalent zur Multiplikation mit dem Ort des Teilchens, also mit demjenigen $\underline{r}$ -Wert, der das Argument in $\psi(\underline{r})$ ist.

Wir erkennen sofort, dass $f(\hat{\underline{r}})\ \psi(\underline{r}) = f(\underline{r})\ \psi(\underline{r})$, wenn f in eine Taylor-Reihe entwickelbar ist.

<u>Beachte:</u> Eigenfunktionen des Operators $\hat{\underline{r}}$ zum Eigenwert $\underline{r}_0$ sind nur die Funktionen, die für $\underline{r} \neq \underline{r}_0$ gleich Null sind (also nicht etwa beliebige $\psi(\underline{r})$, wie man wegen $\hat{\underline{r}}\ \psi(\underline{r}) = \underline{r}\ \psi(\underline{r})$ denken könnte), denn jedes Element des kontinuierlichen Spaltenvektors $\psi(\underline{r})$ wird mit einer <u>anderen</u> Zahl multipliziert: $\psi(\underline{r}_0)$ mit $\underline{r}_0$, $\psi(\underline{r}')$ mit $\underline{r}'$ usw. Also gilt

$$\underline{\hat{\underline{r}}\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0) = \underline{r}_0\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0)}\ . \tag{6.9}$$

Vollständigkeit von $\{|\underline{r}\rangle\}$ bedeutet

$$|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(r)\ |\underline{r}\rangle \quad \text{und gibt} \quad \langle\underline{r}'|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(r)\ \langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle \quad \text{bzw.} \quad \psi(\underline{r}') = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\ \delta(\underline{r}-\underline{r}')\ .$$

Der "geläufige" Ausdruck für $\psi(\underline{r}')$ auf der rechten Seite der letzten Zeile ist also nichts anderes, als die Entwicklung einer beliebigen Funktion $\psi(\underline{r}')$ nach den Eigenfunktionen des Ortsoperators, also den δ-Funktionen.

Das Matrixelement des Operators $\hat{\underline{r}}$ ist in Ortsdarstellung (also zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$) mit Hilfe von $\hat{\underline{r}} = \int d^3r\ \underline{r}|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$ (6.7) leicht zu bestimmen

$$\langle\underline{r}'|\hat{\underline{r}}|\underline{r}''\rangle = \int d^3r\ \underline{r}\underbrace{\langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle}_{\delta(\underline{r}'-\underline{r})}\underbrace{\langle\underline{r}|\underline{r}''\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}'')} \overset{\underline{r}=\underline{r}'}{\underset{\underline{r}=\underline{r}''}{=}} \underline{r}'\ \delta(\underline{r}'-\underline{r}'') = \underline{r}''\delta(\underline{r}'-\underline{r}'')$$

bzw.

$$\langle\underline{r}'|f(\hat{\underline{r}})|\underline{r}''\rangle = \int d^3r\ f(\underline{r})\langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\underline{r}''\rangle = f(\underline{r}')\ \delta(\underline{r}'-\underline{r}'') = f(\underline{r}'')\delta(\underline{r}'-\underline{r}'')\,. \tag{6.10}$$

- **Ortsdarstellung des Impulsoperators**

Zustände mit definiertem Impuls sind in der Ortsdarstellung ebene de Broglie-Wellen

$$\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \; . \tag{6.11}$$

Bem.: Das ist eine zusätzliche Annahme, gleichbedeutend mit dem Postulat der Schrödinger-Gleichung im Ortsraum oder der Vertauschungsrelation $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$.

Auch diese EF sind nicht quadratisch integrabel (können also strenggenommen nicht Zustandsvektoren im H sein), denn

$$\underline{\langle \underline{p}' | \underline{p} \rangle} = \langle \underline{p}' | \underbrace{\int d^3r | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} |}_{\text{Basiswechsel (FT)}} | \underline{p} \rangle = \int d^3r \langle \underline{p}' | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{r}} = \underline{\delta(\underline{p}-\underline{p}')} \; , \tag{6.5'}$$

wenn wir die Darstellung der δ-Funktion (vgl. 1. Übungsblatt) $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ikx}$ verwenden.

Die Ortsdarstellung des Impulsoperators gewinnen wir wieder aus der Projektion von $\hat{\underline{p}} | \psi \rangle = | \hat{\underline{p}} \psi \rangle$ auf $| \underline{r} \rangle$, wobei wir die Spektraldarstellung des Operators $\hat{\underline{p}}$ ausnutzen:

$$\langle \underline{r} | \hat{\underline{p}} \psi \rangle = \langle \underline{r} | \hat{\underline{p}} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | \underbrace{\int d^3p \, \underline{p} \, | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} |}_{\substack{\text{Spektraldarstellung} \\ \text{von } \hat{\underline{p}} \text{ zur Basis } \{| \underline{p} \rangle\}}} | \psi \rangle = \int d^3p \, \underline{p} \, \underbrace{\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle} \, \langle \underline{p} | \psi \rangle =$$

$$= \int d^3p \, \underline{p} \, \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \, \langle \underline{p} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}_{\underline{r}} \int d^3p \, \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | -i\hbar \underline{\nabla}_{\underline{r}} \psi \rangle .$$

Also gilt in Ortsdarstellung

$$\hat{\underline{p}} = -i\hbar \underline{\nabla} \tag{6.12}$$

Das "Korrespondenzprinzip" der Schrödinger´schen Wellenmechanik

Ersetze klassische Phasenraumvariable $Q(\underline{p}, \underline{r}, t)$ durch Operator $\hat{Q} = Q(\underline{p}, \underline{r}, t) = \underline{Q}(-i\hbar\underline{\nabla}, \underline{r}, t)$

ergibt sich also zwangsläufig aus der axiomatischen Formulierung der QM im Hilbert-Raum bei Verwendung der Basis $\{| \underline{r} \rangle\}$.

Analog findet wir

$$\langle \underline{r}|f(\hat{\underline{p}})|\psi\rangle = f(-i\hbar\underline{\nabla})\langle \underline{r}|\psi\rangle ,$$

und für die Matrixelemente des Impulsoperators zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$ $\langle \underline{r}'|\hat{\underline{p}}|\underline{r}''\rangle = -i\hbar\underline{\nabla}_{\underline{r}'}\delta(\underline{r}'-\underline{r}'')$ sowie allgemeiner

$$\langle \underline{r}'|f(\hat{\underline{p}})|\underline{r}''\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\widehat{f}(\underline{r}-\underline{r}') , \qquad (6.13)$$

wobei $\widehat{f}(\underline{r}) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} f(\underline{p})$ die inverse Fourier-Transformierte der Funktion $f(\underline{p})$ ist und wir voraussetzen, dass sich $f(\underline{p})$ in eine Taylor-Reihe entwickeln lässt.

- **Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung**

Bei der Bewegung eines Teilchens im Potenzial $U(\underline{r})$ lautet die Hamilton-Funktion $H(\underline{p},\underline{r},t) = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r},t)$. Nach dem 2. Postulat wird $H(\underline{p},\underline{r},t)$ der Operator $\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + U(\hat{\underline{r}},t)$ zugeordnet. Projezieren wir die darstellungsunabhängige Form der SG $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ auf $|\underline{r}\rangle$ folgt

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \underline{r}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m}\langle \underline{r}|\hat{\underline{p}}^2|\psi(t)\rangle + \langle \underline{r}|U(\hat{\underline{r}},t)|\psi(t)\rangle$$

also die uns bekannte Gleichung der Schrödinger´schen "Wellenmechanik"

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\underline{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2\,\psi(\underline{r},t) + U(\underline{r},t)\,\psi(\underline{r},t) .$$

6.2 **Impulsdarstellung der QM** (Darstellung zur Basis $\{|\underline{p}\rangle\}$)

Wir verwenden als Basis das VONS $\{|\underline{p}\rangle\}$ der Eigenfunktionen des Impulsoperators und gehen genauso vor, wie in Kapitel 6.1 gezeigt (wird ausführlich in der Übung besprochen).

Impulsmessung im Zustand $|\psi\rangle$: Prob ($\underline{p} = \underline{p}'$) $= \left|\langle \underline{p}'|\psi\rangle\right|^2$

wobei

$$\langle \underline{p}|\psi\rangle := \phi(\underline{p}) \tag{6.2'}$$

eine vollständig gleichwertige Darstellung von $|\psi\rangle$ durch den kontinuierlichen Spaltenvektor $\phi(\underline{p})$, die Wellenfunktion im Impulsraum, ist.

Vollständigkeit von $\{|\underline{p}\rangle\}$: $\quad |\psi\rangle = \int d^3p\, p\, \phi(\underline{p})\, |\underline{p}\rangle \qquad$ (6.2')

Orthogonalität/Normierung:

$$\langle \underline{p}'|\psi\rangle = \int d^3p\ \phi(\underline{p})\ \langle \underline{p}'|\underline{p}\rangle \overset{(2)}{=} \phi(\underline{p}') = \int d^3p\ \phi(\underline{p})\ \delta(\underline{p}-\underline{p}') \ \text{, d.h. } \ \underline{\langle \underline{p}'|\underline{p}\rangle = \delta(\underline{p}-\underline{p}')}\ . \tag{6.3'}$$

Unter Berücksichtigung von $\langle \underline{p}|\underline{r}\rangle = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ haben wir

$$\phi(\underline{p}) = \langle \underline{p}|\psi\rangle = \langle \underline{p}|\underbrace{\int d^3r\ |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}_{\hat{1}}|\psi\rangle = \int d^3r\ \langle\underline{p}|\underline{r}\rangle\underbrace{\langle\underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3r\ \psi(\underline{r})\ e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\ .$$

Schlussfolgerung: $\phi(\underline{p})$ ist die Fourier-Transformierte von $\psi(\underline{r})$ (und umgekehrt).

- **Impulsoperator in p-Darstellung**

$$\langle\underline{p}|\hat{\underline{p}}\psi\rangle = \langle\underline{p}|\hat{\underline{p}}|\psi\rangle = \langle\underline{p}|\underbrace{\int d^3p'\ \underline{p}'\ |\underline{p}'\rangle\langle\underline{p}'|}_{\substack{\text{Spektraldarstellung}\\ \text{von } \hat{\underline{p}} \text{ zur Basis } \{|\underline{p}\rangle\}}}|\psi\rangle = \int d^3p'\ \underline{p}'\underbrace{\langle\underline{p}|\underline{p}'\rangle}_{\delta(\underline{p}-\underline{p}')}\langle\underline{p}'|\psi\rangle = \underline{p}\ \langle\underline{p}|\psi\rangle$$

Anwendung von $\hat{\underline{p}}$ auf WF $\phi(\underline{p})$ bedeutet also Multiplikation mit $\underline{p}$:

$$\hat{\underline{p}} = \underline{p}\ . \tag{6.8'}$$

- **Ortsoperator in p-Darstellung**

Dagegen ist der Ortsoperator in p-Darstellung wegen

$$\langle \underline{p} | \hat{\underline{r}}\,\psi \rangle = \int d^3r\ \underline{r} \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi \rangle = \int d^3r\ \underline{r}\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \langle \underline{p} | \psi \rangle = -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{p}} \int d^3r\ \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi \rangle = i\hbar \underline{\nabla}_p \langle \underline{p} | \psi \rangle$$

ein Differentialoperator im p-Raum

$$\hat{\underline{r}}\,\phi(\underline{p}) = i\hbar \underline{\nabla}_p\, \phi(\underline{p})\,,\ \text{also}\ \hat{\underline{r}} = i\hbar \underline{\nabla}_p \tag{6.4'}$$

Einschub: Man findet leicht

(i) $\langle \underline{p} |\ F(\hat{\underline{r}})\psi \rangle = F(i\hbar\underline{\nabla}_p) \langle \underline{p} | \psi \rangle = F(i\hbar\underline{\nabla}_p)\,\phi(\underline{p})$ oder

(ii) $\langle \underline{p}' | \hat{Q}\,\underline{p} \rangle = \langle \underline{p}' | \hat{Q} | \underline{p} \rangle = \int d^3r \int d^3r'\ \langle \underline{p}' | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r}' | \hat{Q} | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \underline{p}' \rangle = \int \frac{d^3r\, d^3r'}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r} - \underline{p}'\cdot\underline{r}')} \langle \underline{r}' | \hat{Q} | \underline{r} \rangle$

für die Transformation der Matrixelemente eines Operators $\hat{Q}$ aus der Darstellung zur Basis $\{|\underline{p}\rangle\}$ in die Darstellung zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$ oder

(iii) die Schrödinger-Gleichung in p-Darstellung

$$i\hbar \frac{\partial\,\phi(\underline{p},t)}{\partial\,t} = \frac{\underline{p}^2}{2m}\,\phi(\underline{p},t) + \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\ \widehat{U}(\underline{p} - \underline{p}')\,\phi(\underline{p},t)\,. \tag{6.14}$$

Hier bezeichnet $\widehat{U}$ die FT der potenziellen Energie (vgl. 4. Übungsblatt).
In Form einer Integralgleichung ergeben sich mitunter Vorteile bei der numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung.