

$$|\gamma\rangle = \int d^3p \boxed{|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\gamma\rangle} = \int d^3r \boxed{|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\gamma\rangle}$$

Dual : $\langle\gamma| = \int d^3p \langle\gamma|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \int d^3r \langle\gamma|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|$
 (Einschieben einer 1)

$$\begin{aligned} \langle\gamma|\mathbf{r}\rangle &= \int d^3p \langle\gamma|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle \\ &= \int d^3p \gamma(\mathbf{p})^* (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \langle\mathbf{r}|\gamma\rangle^* \\ &= \gamma(\mathbf{r})^* \end{aligned}$$

Skalarprodukt :

$$\begin{aligned} \langle\gamma_1|\gamma_2\rangle &= \int d^3r \langle\gamma_1|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\gamma_2\rangle \\ &= \int d^3r \gamma_1(\mathbf{r})^* \gamma_2(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3p \tilde{\gamma}_1(\mathbf{p})^* \tilde{\gamma}_2(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

Norm :

$$\begin{aligned} \|\gamma\| &= [\langle\gamma|\gamma\rangle]^{1/2} = \left[\int d^3r \langle\gamma|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\gamma\rangle \right]^{1/2} \\ &= \left[\int d^3r |\gamma(\mathbf{r})|^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}^3} d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 < \infty \right\}$$

Raum d. quadratintegrablen Fkten.

NB : Linearität des Vektorraums gewährleistet
Superpositionsprinzip für Wellenfkt.!

2.2 Operatoren im Hilbert-Raum

Übergang zur Quantentheorie in d. Ortsdarstellung
(Wellenmeh. nach Schrödinger):

$$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Eigenwertgleichung in \mathcal{L} -Darstellung des Eigenzustands $|\rho\rangle$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathcal{L} | \rho \rangle = p \langle \mathcal{L} | \rho \rangle$$

$$\langle \mathcal{L} | \rho \rangle = \frac{1}{(\pi \hbar)^{3/2}} e^{i \frac{p \cdot \mathcal{L}}{\hbar}}$$

Multipl. $|\mathcal{L}\rangle$ und Int.:

$$\underbrace{\int d^3 r |\mathcal{L}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \mathcal{L} | \rho \rangle}_{= \hat{p}} = p \underbrace{\int d^3 r |\mathcal{L}\rangle \langle \mathcal{L} | \rho \rangle}_1$$

also: $\boxed{\hat{p} |\rho\rangle = p |\rho\rangle}$ (darstellungsfrei)

mit dem abstrakten Impulsoperator

$$\boxed{\hat{p} := \int d^3 r |\mathcal{L}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \mathcal{L} |}$$

Verallgemeinerung:

Sei $F(\mathcal{L}, p)$ eine klassische Observable (z.B. Impuls, Energie, Drehimpuls):

$$F(\mathcal{L}, p) \longrightarrow \hat{F}(\mathcal{L}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \quad \begin{array}{l} \text{Operator} \\ \text{in } \mathcal{L}\text{-Dar-} \\ \text{stellung} \end{array}$$

Abstrakter Operator:

$$\boxed{\hat{F} = \int d^3 r |\mathcal{L}\rangle \hat{F}(\mathcal{L}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \langle \mathcal{L} |}$$

Umkehrung: \hat{F} geg., $|\Phi\rangle := \hat{F} |\Psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle \underline{r} | \Phi \rangle &= \langle \underline{r} | \hat{F} | \Psi \rangle \\ &= \int d^3 r' \langle \underline{r} | \hat{F} | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r}' | \Psi \rangle \\ &\quad (\hat{1} \text{ einschreiben})\end{aligned}$$

$$\boxed{\Phi(\underline{r}) = \int d^3 r' \langle \underline{r} | \hat{F} | \underline{r}' \rangle \Psi(\underline{r}')}$$

Im allgemeinen werden Operatoren in speziellen Darstellungen zu linearen Integraloperatoren (nicht lokal!)

Für die Ortsdarstellung für ein Teilchen im Pot. gilt speziell:

$$\langle \underline{r} | \hat{F} | \underline{r}' \rangle = \delta(\underline{r} - \underline{r}') \hat{F}(\underline{r}, i \nabla)$$

(lokaler Differentialoperator)

Ortsoperator : $\hat{r} \Psi(\underline{r}) = \underline{r} \Psi(\underline{r})$ (wirkt multipl.)

$$\begin{array}{ccc} \text{Op.} \nearrow & \hat{r} \langle \underline{r} | \Psi \rangle & = \underline{r} \langle \underline{r} | \Psi \rangle \\ & \nearrow \text{Eigens.} & \end{array}$$

also $\langle \underline{r} | \hat{r} | \Psi \rangle = \int d^3 r' \langle \underline{r} | \hat{r} | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r}' | \Psi \rangle \stackrel{!}{=} \underline{r} \langle \underline{r} | \Psi \rangle$

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

Impulsdarstellung : $|\Phi\rangle = \hat{p} |\Psi\rangle$

$$\Phi(\underline{p}) \equiv \langle \underline{p} | \Phi \rangle = \langle \underline{p} | \hat{p} | \Psi \rangle$$

$$\begin{aligned}
\Phi(p) &= \int d^3r \underbrace{\langle p | r \rangle}_{(2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar} p r}} \underbrace{\langle r | \hat{r} | \psi \rangle}_{r \langle r | \psi \rangle} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \underbrace{r e^{-\frac{i}{\hbar} p r}}_{-\frac{\hbar}{i} \nabla_r \left(e^{-\frac{i}{\hbar} p r} \right)} \langle r | \psi \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{i} \nabla_r \left[\int d^3r \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p r}}_{\langle p | r \rangle} \langle r | \psi \rangle \right] \\
&= -\frac{\hbar}{i} \nabla_r \langle p | \psi \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{i} \nabla_r \tilde{\psi}(p)
\end{aligned}$$

$\nabla_r = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$

also: $\boxed{\hat{r} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_r}$ in d. Impulsdarstellung

Energiedarstellung

Sei in d. Ortsdarstellung $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ (1d)

mit Eigenfunktionen $\hat{H} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad n=0,1,\dots$

$$\hat{H} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \langle x | n \rangle = E_n \langle x | n \rangle$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \underbrace{\hat{H} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \langle x | n \rangle}_{\hat{H}}$$

\hat{H} Hamilton-Op. in Ortsdarst.

$$\boxed{\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle} \quad (\text{darstellungsfrei})$$

Orthonormierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle m|x \rangle \langle x|n \rangle$$
$$= \langle m|n \rangle = \delta_{mn}$$

analog zu den kontinuierlichen Darstellungen

$$\langle r'|r \rangle = \delta(r-r')$$

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

Häufig (aber nicht immer!) ist Energiedarstellung vollständig (z.B. 1d harmon. Osz.):

$$\langle x|\psi \rangle = \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\psi \rangle \langle x|n \rangle$$

$$\Rightarrow \left[\sum_{n=0}^{\infty} |n \rangle \langle n| = 1 \right]$$

Dann gilt die Spektraldarstellung des Hamiltonoperators

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

Projektions-Operator
auf n-ten Eigenzustand

Allgemein:

Quantenmech. Observablen \longrightarrow lineare Operatoren
im Hilbertraum:

$$\hat{F}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle)$$

$$= \lambda_1 \hat{F} |\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{F} |\psi_2\rangle \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

$$\hat{F}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

Def: Der zu \hat{F} adjungierte Operator \hat{F}^\dagger ist definiert durch

$$\hat{F} |\psi\rangle = |\Phi\rangle \Leftrightarrow \langle \psi | \hat{F}^\dagger = \langle \Phi |$$

Def: Ein linearer Operator \hat{F} heißt selbstadjungiert (hermitesch), falls

$$\boxed{\hat{F} = \hat{F}^\dagger}$$

Die lin. Operatoren bilden eine Algebra, wobei die Multiplikation definiert ist durch:

$$(\hat{F} \cdot \hat{G}) |\psi\rangle := \hat{F} (\hat{G} |\psi\rangle)$$

Einheitsoperator $\mathbb{1}$: $\mathbb{1} \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot \mathbb{1} = \hat{F}$

Nulloperator $\mathbb{0}$: $\mathbb{0} \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot \mathbb{0} = \mathbb{0}$

Kommutator

$$\boxed{[\hat{F}, \hat{G}] := \hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F}}$$

Es gilt: (i) $(\hat{F} \hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger$

(ii) $\hat{F}^{\dagger\dagger} = \hat{F}$

(iii) $\mathcal{L}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \mathcal{L} |\psi_1\rangle + \lambda_2 \mathcal{L} |\psi_2\rangle$

$$\hat{F} |\psi\rangle = \lambda_1 \hat{F} |\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{F} |\psi_2\rangle$$

$$\langle \psi | \hat{F}^\dagger = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \hat{F}^\dagger + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \hat{F}^\dagger$$

Matrixelemente

$\langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle$ heißt Matrixelement von \hat{F} mit dem bra $\langle \psi_1 |$ und dem ket $| \psi_2 \rangle$

Mit $|\Phi\rangle := \hat{F} | \psi_2 \rangle$ und $\langle \Phi | = \langle \psi_2 | \hat{F}^\dagger$

$$\text{folgt } \langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{F} | \psi_1 \rangle^* \\ = \langle \psi_2 | \hat{F}^\dagger | \psi_1 \rangle^*$$

Aus $\boxed{\langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{F}^\dagger | \psi_1 \rangle^*}$ (1)

Für hermit Operatoren:

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

Erwartungswerte

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3r \psi^*(\underline{r}) \left[\hat{F}(\underline{r}, \underline{p}, \nabla) \psi(\underline{r}) \right] \\ = \int d^3r \underbrace{\langle \psi | \underline{r} \rangle}_{\text{mm}} \underbrace{\hat{F}(\underline{r}, \underline{p}, \nabla)}_{\text{mmmmmmmm}} \underbrace{\langle \underline{r} | \psi \rangle}_{\text{mm}} \text{ in Ortsdarst.} \\ = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$$

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind reell: $\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \stackrel{(2)}{=} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^*$

(Umkehrung gilt hier auch)

⇒ Physikal. Observablen durch hermitesche Operatoren darstellen ☺