

English Summary:

1. Formalization of quantum mechanics

state vector in Hilbert space: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

observables are operators $\hat{F}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

eigenvalues of momentum op. $\hat{p}|\underline{p}\rangle = \underline{p}|\underline{p}\rangle$

position representation:

$$\psi(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \psi \rangle = \int d^3\underline{p} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\underline{p} \tilde{\psi}(\underline{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

momentum representation:

$$\tilde{\psi}(\underline{p}) = \langle \underline{p} | \psi \rangle = \int d^3\underline{r} \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\underline{r} \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

completeness relation:

$$\int d^3\underline{p} |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| = \mathbb{1}$$
$$\int d^3\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = \mathbb{1}$$

1.2 Operatoren im Hilbertraum

Eigenwertgl. in \underline{r} -Darstellung des Impulsop. \hat{p}

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \underline{p} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle$$

Mult. mit $|\underline{r}\rangle$ u. Integr.

$$\int d^3\underline{r} |\underline{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \underline{p} \int d^3\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle$$

\hat{p} 1

$$\hat{p} |\underline{p}\rangle = \underline{p} |\underline{p}\rangle$$

mit dem abstrakten Impuls-Op.

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

Sei $F(r, p)$ eine klass. Obs.

$$F(r, p) \rightarrow \hat{F}(r, \frac{\hbar}{i} \nabla)$$

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

Umkehrung: \hat{F} geg., $|\phi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \langle r|\phi\rangle = \langle r|\hat{F}|\psi\rangle = \int d^3r' \underbrace{\langle r|\hat{F}|r'\rangle}_{\uparrow 1} \underbrace{\langle r'|\psi\rangle}$$

$$\phi(r) = \int d^3r' \langle r|\hat{F}|r'\rangle \psi(r')$$

i.a. werden Op. in einer Darstellung zu linearen Integralop.

Für die Ortsdarstellung für 1 Teilchen im (lokalen) Pot.: (nichtlokal!)

$$\langle r|\hat{F}|r'\rangle = \delta(r-r') \hat{F}(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) \quad *$$

(lokales Differential op.)

Ortop. $\hat{F}\psi(r) = r\psi(r)$ (multiplikativ)

$$\hat{F}\langle r|\psi\rangle = r\langle r|\psi\rangle$$

Eigenwert

$$\langle r|\hat{F}|\psi\rangle = \int d^3r' \langle r|\hat{F}|r'\rangle \langle r'|\psi\rangle = r\langle r|\psi\rangle$$

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

Impulsdarst.: $|\phi\rangle := \hat{F}|\psi\rangle$

$$\phi(p) \equiv \langle p|\phi\rangle = \langle p|\hat{F}|\psi\rangle$$

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

$$\phi(p) = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p [\langle p|\psi\rangle]$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \nabla_p \tilde{\psi}(p)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle$$

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

Also $\hat{p} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_p$ in der Impulsdarstellung.

Energiedarstellung

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

mit Eigenfunktionen $\hat{H} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad n=0,1,2,$

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

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

Orthonormieren:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\langle m | x \rangle}_{\text{green}} \underbrace{\langle x | n \rangle}_{\text{green}} = \langle m | n \rangle$$

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

Häufig (!) ist die Energiedarst. vollständig
(z.B. 1-dim. harmon. Osz.)

$$\begin{aligned} \langle x | \psi \rangle &= \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{c_n} \langle x | n \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle x | n \rangle \langle n | \psi \rangle \end{aligned}$$

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

Hamilton-Op.:

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

Proj. Op. auf den n -ten
Energie-Eigenzustand

$$\sum_n |n\rangle \langle n| \psi\rangle \rightarrow \psi$$

Allg.

Qm. Obs. \rightarrow lineare Op. im Hilbertraum $\hat{F}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
 $\hat{F}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \hat{F} |\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{F} |\psi_2\rangle$

Def.: zu \hat{F} adjungierte Op. \hat{F}^\dagger ist def. durch

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

$$(\psi, \hat{F} \psi_2) = (\hat{F}^\dagger \psi_1, \psi_2)$$

Def.: Ein lin. Op. \hat{F} heißt selbstadjungiert
(hermitesch), falls $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$

$$(\psi_1, \hat{F} \psi_2) = (\hat{F} \psi_1, \psi_2)$$

Die lin. Op. bilden eine Algebra, wobei die Multiplikation def. ist durch

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

Einheitop. 1 : $1 \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot 1 = \hat{F}$

Nullo. 0 : $0 \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot 0 = 0$

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

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

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

Matrixelement $\langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle$

hermitesche Op. $\langle \psi_1 | \hat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{F} | \psi_1 \rangle^*$

$$F_{ij} = F_{ji}^*$$

Erwartungswerte

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$$

Erwartungswerte hermitescher Op. sind reell.

$$\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^*$$

→ Phys. Obs. durch hermitesche Op. darstellen!

1.3. Eigenwerte u. Eigenzustände von hermiteschen Op.

Annahme: Eine phys. Obs. F habe im Zustand $|\psi\rangle$ einen scharfen Wert

$$\text{qm. Unschärfe } \langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle = \langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{F}^2 \rangle - \langle \hat{F} \rangle^2 \\ \stackrel{!}{=} 0$$

⇒ $\hat{F}|\psi\rangle = \langle \hat{F} \rangle |\psi\rangle$ d.h. $|\psi\rangle$ Eigenzustand

Theorem 1: Eigenwerte hermitescher Op. sind reell.

Theorem 2: Eigenzustände hermitescher Op. zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

bei Entartung: Eigenraum mit $\text{Dim } d > 1$ zu einem Eigenwert

→ Eigenzustände können orthonormiert gewählt werden (Schmidt'sche Orthogonalisierung)

$$\langle n, \beta' | m, \beta \rangle = \delta_{mn} \delta_{\beta'\beta}$$

Theorem 3: Zwei hermitesche Op. \hat{F}, \hat{G} kommutieren genau dann, wenn sie ein gemeinsames System von Eigenzuständen besitzen.

Def.: Ein lin. Op. $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt unitär, falls $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$

$$\Leftrightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

Skalarprodukt ist bei unitäre Trafo invariant

\Rightarrow Unitäre Op. transformieren von einer Basis (vollst. ONS) in eine andere

Trafo in die Eigenbasis eines Op. \hat{F}

$$\langle \phi' | \hat{F}' | \psi' \rangle = \langle \phi | \underbrace{U^\dagger \hat{F}' U}_{\hat{F}} | \psi \rangle = F_\psi \delta_{\phi\psi}$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= U^\dagger |\psi'\rangle \\ \hat{F} &= U^\dagger \hat{F}' U \end{aligned}$$