$$|\psi\rangle = \int d^3p\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|\psi\rangle = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\psi\rangle$$

<u>Dual</u> : $\langle\psi| = \int d^3p\, \langle\psi|\underline{p}\rangle\langle\underline{p}| = \int d^3r\, \langle\psi|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$

(Einschieben einer $\mathbb{1}$)

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

<u>Skalarprodukt</u> :

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\psi_2\rangle &= \int d^3r\, \langle\psi_1|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\psi_2\rangle \\ &= \int d^3r\, \psi_1(\underline{r})^*\psi_2(\underline{r}) \\ &= \int d^3p\, \tilde{\psi}_1(\underline{p})^*\tilde{\psi}_2(\underline{p})\end{aligned}$$

<u>Norm</u> :

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

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{x : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |\psi(\underline{r})|^2 < \infty\right\}$$

Raum d. quadratintegrablen Fkt.en.

<u>NB</u> : Linearität des Vektorraums gewährleistet <u>Superpositionsprinzip</u> für Wellenfkt.!

2.2 Operatoren im Hilbert-Raum

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

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

Eigenwertgleichung in $\underline{r}$-Darstellung des Eigenzustands $|\underline{p}\rangle$

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

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

Multipl. $|\underline{r}\rangle$ und Int.:

$$\underbrace{\int d^3r\, |\underline{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)}_{=\hat{\underline{p}}} \langle \underline{r}|\underline{p}\rangle = \underline{p}\underbrace{\int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}|}_{1}\underline{p}\rangle$$

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

mit dem abstrakten Impulsoperator

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

Verallgemeinerung:

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

$$F(\underline{r},\underline{p}) \longrightarrow \hat{F}\left(\underline{r},\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)$$ Operator in $\underline{r}$-Darstellung

Abstrakter Operator:

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

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

$$\langle \underline{r} | \Phi \rangle = \langle \underline{r} | \hat{F} | \psi \rangle$$
$$= \int d^3r' \, \langle \underline{r} | \hat{F} | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r}' | \psi \rangle$$
($\mathbb{1}$ einschieben)

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

Im allgemeinen werden Operatoren in speziellen Darstellungen zu <u>linearen Integraloperatoren</u> (nichtlokal!)

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

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

(<u>lokaler</u> Differentialoperator)

<u>Ortsoperator</u>: $\hat{\underline{r}} \, \psi(\underline{r}) = \underline{r} \, \psi(\underline{r})$ (wirkt multipl.)

$$\underbrace{\hat{\underline{r}}}_{\text{Op.}} \langle \underline{r} | \psi \rangle = \underbrace{\underline{r}}_{\text{Eigenw.}} \langle \underline{r} | \psi \rangle$$

also $\langle \underline{r} | \hat{\underline{r}} | \psi \rangle = \int d^3r' \, \langle \underline{r} | \hat{\underline{r}} | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r}' | \psi \rangle \overset{!}{=} \underline{r} \, \langle \underline{r} | \psi \rangle$

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

<u>Impulsdarstellung</u>: $|\Phi\rangle := \hat{\underline{r}} \, |\psi\rangle$

$$\Phi(p) = \langle \underline{p} | \Phi \rangle = \langle \underline{p} | \hat{\underline{r}} | \psi \rangle$$

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

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

$$\underline{\nabla}_{(p)} = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z}\right)$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_{(p)}\left[\int d^3r \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{r}}}_{\langle \underline{p}|\underline{r}\rangle} \langle \underline{r}|\psi\rangle\right]$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_{(p)} \langle \underline{p}|\psi\rangle$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_{(p)} \tilde{\psi}(\underline{p})$$

Also: $\boxed{\hat{\underline{r}} \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_{(p)}}$ in d. Impuls-darstellung

Energiedarstellung

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

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

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

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

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

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

Orthonormierung

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

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

analog zu den kontinuierlichen Darstellungen

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

Häufig (aber nicht immer!) ist Energiedarstellung <u>vollständig</u> (z.B 1d harmon. Oszi.):

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

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

Dann gilt die <u>Spektraldarstellung</u> des Hamiltonoperators

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

Projektions-Operator auf n-ten Eigenzustand

<u>Allgemein</u>:

Quantenmech. Observablen $\longrightarrow$ lineare Operatoren im Hilbertraum:

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

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

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

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\Phi\rangle \iff \langle\psi|\hat{F}^+ = \langle\Phi|$$

wirkt

Def: Ein linearer Operator $\hat{F}$ heißt selbstadjungiert (hermitesch), falls $\boxed{\hat{F} = \hat{F}^+}$

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

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

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

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

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

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

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

(iii) Aus $|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle$

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

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

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 $\langle\Phi| = \langle\psi_2|\hat{F}^+$

folgt $\langle \psi_1 | \Phi \rangle = \langle \Phi | \psi_1 \rangle^*$

$$= \langle \psi_2 | \hat{F}^+ | \psi_1 \rangle^*$$

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

Für hermit Operatoren:

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

Erwartungswerte

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3r \, \psi^*(\underline{r}) \left[\hat{F}\left(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right) \psi(\underline{r}) \right]$$

$$= \int d^3r \, \langle \psi | \underline{r} \rangle \, \hat{F}\left(\underline{r}, \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right) \langle \underline{r} | \psi \rangle$$ in Ortsdarst.

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

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

(Umkehrung gilt hier auch)

$\Rightarrow$ Physikal. Obervablen durch hermitesche Operatoren darstellen!