6. Orts-, Impuls- und andere Darstellungen der QM

- **Wiederholung**

(i) Linearer Vektorraum $\mathcal{F}$: Jeder $\underline{x} \in \mathcal{F}$ ist als Linearkombination

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{N} c_i \, \underline{e}_i \;, \quad c_i = \underline{x} \cdot \underline{e}_i \,, \quad \underline{e}_i \cdot \underline{e}_k = \delta_{ik} \,, \ i = 1, \ldots, N \rightarrow \text{endlich} \tag{5.4}$$

der Basisvektoren darstellbar, wobei die Entwicklungskoeffizienten c_i die Skalarprodukte aus $\underline{x}$ und $\underline{e}_i$ sind. Die Darstellung des Vektors x zur Basis $\{\underline{e}_i\}$ ist der Spaltenvektor aus den Entwicklungskoeffizienten

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

(ii) Hilbert-Raum $\mathcal{H}$: Entwicklungsatz/Vollständigkeitsrelation in Dirac-Notation

(5.4") $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle$ mit $c_n = \langle n|\psi\rangle$, denn $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$ wenn $\{|n\rangle\}$ ein VONS.

Darstellung von $|\psi\rangle$ zur Basis $\{|n\rangle\}$ ist

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

6.1 Ortsdarstellung der QM. Schrödinger´sche Wellenmechanik

Das ist die Darstellung zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$ unter Verwendung des VONS aus den EF $|\underline{r}'\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$ definiert durch

$$\underline{\hat{\underline{r}}\,|\underline{r}'\rangle = \underline{r}'\,|\underline{r}'\rangle} \tag{6.1}$$

$|\underline{r}'\rangle$ beschreibt den Zustand, in dem das qmS/qmT den definierten Ort $\underline{r} = \underline{r}'$ hat. Demzufolge ist $\underline{r}'$ in (6.1) eine kontinuierliche Variable, also überabzählbar unendlich.

Ortsmessung:

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

Wir halten fest

$$\underline{\langle \underline{r}'|\psi\rangle = \psi(\underline{r}')} \tag{6.2}$$

$\to$ $\psi(\underline{r}')$ - (kontinuierliche) Spaltenvektor der Entwicklungskoeffizienten des Zustands $|\psi\rangle$ nach den EF des Ortsoperators, d.h.

Vollständigkeit: $|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\,|\underline{r}\rangle$ (kontinuierlicher "Index" $\underline{r}$ also $\sum_n \to \int d^3r$)

Dann gilt Orthogonalität/Normierung:

$$\langle \underline{r}'|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\,\langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle \overset{(6.2)}{=} \psi(\underline{r}') = \int d^3r\ \psi(\underline{r})\ \delta(\underline{r}-\underline{r}')\ \text{, d.h. } \underline{\langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle = \delta(\underline{r}-\underline{r}')}\ . \tag{6.3}$$

Schlussfolgerung: Lassen wir die verallgemeinerten Orthogonalitätsbedingungen (6.3) zu, dann bilden die EF von $\hat{\underline{r}}$ ein VONS.

Beachte: Im Fall der kontinuierlichen Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$ aus den uneigentlichen Dirac-Vektoren $|\underline{r}\rangle$ haben wir z.B.

$$\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \quad \rightarrow \quad \hat{1} = \int dx\ |x\rangle\langle x| \quad \text{oder} \quad \hat{1} = \int dp\ |p\rangle\langle p| \ \text{usw.}$$

- **Ortsdarstellung des Ortsoperators**

Ortsdarstellung von $|\psi\rangle$ ist $\langle \underline{r}|\psi\rangle = \psi(\underline{r})$. Wie lautet die Ortsdarstellung von $\hat{\underline{r}}|\psi\rangle = |\hat{\underline{r}}\ \psi\rangle$?

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

$$\rightarrow \ \underline{\hat{\underline{r}}\ \psi(\underline{r}) = \underline{r}\ \psi(\underline{r})} \tag{6.4}$$

In Ortsdarstellung ist $\hat{\underline{r}}$ einfach der Produktoperator: Die Wirkung von $\hat{\underline{r}}$ auf $|\psi\rangle$ ist in Ortsdarstellung gleich der Multiplikation mit dem $\underline{r}$ – Wert, der das Argument in $\psi(\underline{r})$ ist.
Man erkennt 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> EF von $\hat{\underline{r}}$ zu EW $\underline{r}_0$ sind nur die Funktionen, die für $\underline{r} \neq \underline{r}_0$ gleich Null sind. Also

$$\underline{\hat{\underline{r}}\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0) = \underline{r}_0\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0)} \tag{6.5}$$

Die Vollständigkeitsrelation

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

ist demnach nichts anderes als die Entwicklung einer beliebigen WF $\psi(\underline{r})$ nach den Eigenfunktionen des Ortsoperators, also den δ-Funktionen.

Das Matrixelement von $\hat{\underline{r}}$ in Ortsdarstellung (also zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$) ist wegen der Spektraldarstellung des Operators $\hat{\underline{r}} = \int d^3r\, \underline{r}|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$

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

bzw. (6.6)

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

- **Impulsoperator in Ortsdarstellung**

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

$$\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\,. \tag{6.7}$$

Auch diese EF sind nicht quadratisch integrabel (können also strenggenommen nicht Zustandsvektoren im $\mathcal{H}$ sein), denn

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

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

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

$$\langle\underline{r}|\hat{\underline{p}}\psi\rangle = \langle\underline{r}|\hat{\underline{p}}|\psi\rangle = \langle\underline{r}|\underbrace{\int d^3p\; \underline{p}\; |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|}_{\substack{\text{Spektraldarstellung}\\ \text{von } \hat{\underline{p}} \text{ zur Basis } \{|\underline{p}\rangle\}}}|\psi\rangle = \int d^3p\; \underline{p}\; \underbrace{\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle}\; \langle\underline{p}|\psi\rangle = \int d^3p\; \underline{p}\; \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\; \langle\underline{p}|\psi\rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_{\underline{r}}\int d^3p\; \langle\underline{r}|\underline{p}\rangle\; \langle\underline{p}|\psi\rangle = -i\hbar\underline{\nabla}\langle\underline{r}|\psi\rangle$$

also $\underline{\hat{p}} = -i\hbar\underline{\nabla}$ in Ortsdarstellung (6.8)

Analog findet man

$$\langle \underline{r} | f(\underline{\hat{p}}) | \psi \rangle = f(-i\hbar\underline{\nabla}) \langle \underline{r} | \psi \rangle , \tag{6.9}$$

die Matrixelemente des Impulsoperators zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$

$$\langle \underline{r}' | \underline{\hat{p}} | \underline{r}'' \rangle = -i\hbar\underline{\nabla}_{\underline{r}'}\delta(\underline{r}' - \underline{r}'') \tag{6.10}$$

sowie allgemeiner

$$\langle \underline{r}' | f(\underline{\hat{p}}) | \underline{r}'' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \hat{f}(\underline{r} - \underline{r}') \text{ , wobei } \hat{f}(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} f(\underline{p}) \tag{6.11}$$

die inverse Fourier-Transformation der Funktion $f(\underline{p})$ ist und wir wieder 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 Korrespondenzprinzip/2. Postulat wird $H(\underline{p},\underline{r},t)$ der lineare hermitesche Operator $\hat{H} = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m} + U(\underline{\hat{r}},t)$ 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

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

also unter Berücksichtigung von (6.9) die uns bereits 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 $\{|\underline{p}\rangle\}$)

Impulsmessung im Zustand $|\psi\rangle$: Prob ($\underline{p} = \underline{p}'$) $= \left|\langle \underline{p}'|\psi\rangle\right|^2$, wobei $\langle \underline{p}|\psi\rangle := \phi(\underline{p})$ (6.12)

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

Vollständigkeit von $\{|\underline{p}\rangle\}$: $|\psi\rangle = p\,\phi(\underline{p})\;|\underline{p}\rangle$ (6.2')

Orthogonalität/Normierung:

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

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

$$\phi(\underline{p}) = \langle \underline{p}|\psi\rangle = \langle \underline{p}|\underbrace{\int d^3r\;|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}_{\hat{1}\text{ (kont. Basis)}}|\psi\rangle = \int d^3r\;\langle \underline{p}|\underline{r}\rangle\underbrace{\langle \underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3r\;\psi(\underline{r})\,e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\,. \qquad (6.13)$$

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

- **Impulsoperator in p-Darstellung**

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

$\rightarrow$ Anwendung von $\hat{\underline{p}}$ auf WF $\phi(\underline{p})$ bedeutet Multiplikation mit $\underline{p}$: $\underline{\hat{\underline{p}}\,\phi(\underline{p}) = \underline{p}\,\phi(\underline{p})}$. (6.14)

- **Ortsoperator in p-Darstellung**

Dagegen ist der Ortsoperator in p-Darstellung wegen

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

ein Differentialoperator im p-Raum

$$\hat{\underline{r}}\,\phi(\underline{p}) = i\hbar\nabla_{\underline{p}}\,\phi(\underline{p}) \tag{6.15}$$

Einschub: Man findet leicht

(i) $\langle\underline{p}|\ F(\hat{\underline{r}})\psi\rangle = F(i\hbar\underline{\nabla}_{\underline{p}})\langle\underline{p}|\psi\rangle = F(i\hbar\underline{\nabla}_{\underline{p}})\,\phi(\underline{p})$ (6.16)

oder

(ii) $\langle\underline{p}'|\hat{Q}\,\underline{p}\rangle = \int d^3r\int d^3r'\ \langle\underline{p}'|\underline{r}'\rangle\langle\underline{r}'|\hat{Q}|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\underline{p}'\rangle = \int\frac{d^3r\,d^3r'}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\cdot\underline{r}-\underline{p}'\cdot\underline{r}')}\langle\underline{r}'|\hat{Q}|\underline{r}\rangle$ (6.17)

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

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\underline{p},t)}{\partial t} = \frac{\underline{p}^2}{2m}\phi(\underline{p},t) + \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\ \widehat{U}(\underline{p}-\underline{p}')\,\phi(\underline{p},t)\,. \tag{6.18}$$

Hier bezeichnet $\widehat{U}$ die FT der potenziellen Energie. In Form einer Integralgleichung ergeben sich mitunter Vorteile bei der numerischen Lösung.

6.3 Darstellungswechsel. Unitäre Transformationen (UT)/Operatoren

Die experimentell überprüfbaren Vorhersagen der QM beziehen sich auf (vgl. Postulate, Kap. 5.5)

→ qm EWW der Observablen Q $\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle$ bei Messung im Zustand $|\psi\rangle$

→ Messwahrscheinlichkeiten Prob(q =q_n)$=|\langle n|\psi\rangle|^2$ und andere Skalarprodukte

→ EW von hermiteschen Operatoren $\hat{Q}\,|n\rangle = q_n\,|n\rangle \;\rightarrow\; q_n = \langle n|\hat{Q}|n\rangle$, auch EW ist in Form des Matrixelements als Skalarprodukt darstellbar. Beachte: Nur diagonale Matrixelemente sind invariant.

→ Spur eines Operators (als "Summe von EW" letztendlich auch ein Skalarprodukt)

usw.

Die Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ selbst sind weniger zentral.

<u>Frage:</u> Unter welchen Transformationen (T) bleiben die obengenannten Größen invariant? Da sie alle mit Skalarprodukten zusammenhängen lautet diese Frage: Welche Transformationen $\hat{U}$ der Kets $|\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ lassen das Skalarprodukt $\langle\phi|\psi\rangle$ invariant?

Betrachte $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ und $|\tilde{\phi}\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$. Dann gilt

$$\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle = (\hat{U}|\phi\rangle)^{+}\,\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{U}^{+}\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \quad \text{für alle} \quad |\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H}\text{, wenn}$$

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{1} \;\rightarrow\; \text{unitärer Operator. Offensichtlich ist } \hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1} \text{ und auch } \hat{U}\,\hat{U}^{+} = \hat{1}. \tag{6.19}$$

Die Transformation der Kets $|\phi\rangle,|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (der Übergang zwischen zwei VONS → Darstellungswechsel), die Skalarprodukte $\langle\phi|\psi\rangle$ invariant lässt, wird durch einen unitären Operator/unitäre Matrix $\hat{U}$ vermittelt.

- **Matrizenschreibweise:**

Betrachte die VONS $\{|n\rangle\}$ und $\{|k\rangle\}$. Entwickle $|n\rangle$ nach $\{|k\rangle\}$

$$|n\rangle = \sum_k \langle k|n\rangle\, |k\rangle = \sum_k U_{kn}\, |k\rangle \quad \text{mit} \quad U_{kn} := \langle k|n\rangle .$$

Die so definierte Matrix $\underline{\underline{U}}$ ist unitär. Beweis:

$$\delta_{n'n} = \langle n'|n\rangle = \sum_{k,k'} U^*_{k'n'} \langle k'||k\rangle U_{kn} = \sum_k U^*_{kn'}\, U_{kn} = \sum_k U^+_{n'k}\, U_{kn} \quad \text{also} \quad \underline{\underline{1}} = \underline{\underline{U}}^+ \underline{\underline{U}} .$$

$\rightarrow$ die Transformation zwischen zwei VONS wird durch eine unitäre Matrix vermittelt. Diese sind die Verallgemeinerung der orthogonalen Drehmatrizen im $\mathcal{F}^3$, vgl. mathematische Methoden der ThPh.

- **Transformation eines Operators:**

Der hermitesche Operator $\hat{Q}$ besitze die EF $\{|n\rangle\}$ und die EW $\{q_n\}$. In der Basis seiner EF wird $\hat{Q}$ durch eine diagonale Matrix dargestellt

$$\hat{Q} \leftrightarrow \left(\langle n'|\hat{Q}|n\rangle\right) = (q_n\, \delta_{n'n}) \quad \rightarrow \text{Eigendarstellung} .$$

In einer anderen Basis, $\{|k\rangle\}$ ist die Matrixdarstellung i.a. nicht diagonal:

$$\hat{Q} \leftrightarrow \left(\langle n'|\hat{Q}|n\rangle\right) = \left(\sum_{kk'} U^*_{k'n'} \langle k'|\hat{Q}|k\rangle U_{kn}\right) = \left(\sum_{kk'} U^*_{k'n'}\, \tilde{Q}_{k'k}\, U_{kn}\right) = \left(\sum_{kk'} U^+_{n'k'}\, \tilde{Q}_{k'k}\, U_{kn}\right) \leftrightarrow \underline{\underline{U}}^+\, \underline{\underline{\tilde{Q}}}\, \underline{\underline{U}}$$

Fazit: Die (hermitesche) Matrix zum (hermiteschen) Operator $\hat{Q}$ kann durch eine unitäre Transformation $\underline{\underline{U}}$ diagonalisiert werden.

Aus $\underline{\hat{Q} = \hat{U}^{+}\tilde{\hat{Q}}\,\hat{U}}$ folgt $\underline{\tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\,\hat{Q}\hat{U}^{+}}$. (6.20)

Fazit: Bei Basiswechsel in $\mathcal{H}$ Ket $|\psi\rangle \;\to\; |\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$,

Bra $\langle\psi| \;\to\; \langle\tilde{\psi}| = \langle\psi|\hat{U}^{+}$,

Operator $\hat{Q} \;\to\; \tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\,\hat{Q}\hat{U}^{+}$,

aber die Skalarprodukte $\langle\phi|\psi\rangle$ bleiben invariant.

Beachte: Für die Transformation des Kommutators $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$ gilt $\tilde{C} = \left[\tilde{\hat{A}}, \tilde{\hat{B}}\right]$ denn

$\left[\tilde{\hat{A}}, \tilde{\hat{B}}\right] = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{B}\hat{U}^{+} - \hat{U}\hat{B}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+} = \hat{U}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{U}^{+}$

<u>Weitere Eigenschaften unitärer Operatoren</u> ($\to$ Übung)

(i) EW unitärer Operatoren können nur komplexe Zahlen vom Betrag Eins sein.

(ii) $\left(\tilde{\hat{Q}}\right)^{+} = \left(\tilde{\hat{Q}^{+}}\right)$ $\to$ der adjungierte des transformierten Operators und der transformierte des adjungiereten Operators stimmen überein; d.h., die unitäre Transformation und die Adjungation eines Operators sind vertauschbar

(iii) $\tilde{f}(\hat{Q}) = f(\tilde{\hat{Q}})$ für Funktionen f, die als Potenzreihe darstellbar

(iv) Ist $\hat{Q} = \hat{Q}^{+}$ hermitesch, dann ist $\hat{U} = e^{i\lambda\hat{Q}}$ unitär, vorausgesetzt $\lambda = \lambda^{*}$ ist reell,

denn $\hat{U}^{+} = e^{-i\lambda^{*}\hat{Q}} = e^{-i\lambda\hat{Q}}$ also $\hat{U}^{+}\,\hat{U} = \hat{1}$.

■ z.B. der Zeittranslationsoperator $\hat{T}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,t\right)$, bei dem die Zeit die Rolle des Parameters λ übernimmt.

Einschub: Zusammenfassung Hilbert-Raum

Zustandsvektor	$\lvert\psi\rangle$
Basis	$\{\lvert n\rangle\}$, diskret oder kontinuierlich (z.B. EF von $\hat{Q}=\hat{Q}^{+}$)
Orthonormierung	$\langle n\lvert n'\rangle=\begin{cases}\delta_{n\,n'} & \to \text{ diskrete Basis}\\ \delta(n-n') & \to \text{ kontinuierliche Basis}\end{cases}$
Vollständigkeit	$\begin{cases}\sum_n \lvert n\rangle\langle n\rvert=\hat{1}\\ \int dn\ \lvert n\rangle\langle n\rvert=\hat{1}\end{cases}$
Entwicklungssatz/Superposition	$\lvert\psi\rangle=\begin{cases}\sum_{n=1}^{\infty} c_n\ \lvert n\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\langle n\lvert\psi\rangle\ \lvert n\rangle,\ c_n:=\langle n\lvert\psi\rangle\\ \int dn\ \langle n\lvert\psi\rangle\ \lvert n\rangle\end{cases}$
Darstellung zur Basis $\{\lvert n\rangle\}$	$\lvert\psi\rangle\leftrightarrow\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_n\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\langle 1\lvert\psi\rangle\\ \langle 2\lvert\psi\rangle\\ \vdots\\ \langle n\lvert\psi\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}$ (Spaltenvektor)
	$\langle\psi\rvert=\lvert\psi\rangle^{+}\leftrightarrow(c_1^*,c_2^*,\ldots c_n^*,\cdots)=(\langle\psi\lvert 1\rangle,\langle\psi\lvert 2\rangle,\ldots\langle\psi\lvert n\rangle,\cdots)$
Skalarprodukt	$\langle\phi\rvert\cdot\lvert\psi\rangle:=\langle\phi\lvert\psi\rangle=\langle\psi\lvert\phi\rangle^{*}$
linearer Operator	$\lvert\psi'\rangle=\hat{Q}\lvert\psi\rangle=\lvert\hat{Q}\,\psi\rangle$, $\quad\langle\hat{Q}\,\psi\rvert=\lvert\hat{Q}\,\psi\rangle^{+}=\langle\psi\rvert\hat{Q}^{+}$
hermitescher Operator	$\hat{Q}=\hat{Q}^{+}$
Matrixdarstellung zur Basis $\{\lvert n\rangle\}$	$\hat{Q}\leftrightarrow\begin{pmatrix}Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1j} & \cdots\\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2j} & \cdots\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \cdots\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}$, $\ Q_{ij}:=\langle n_i\lvert\hat{Q}\rvert n_j\rangle$
Basiswechsel:	$\lvert\tilde{\psi}\rangle=\hat{U}\lvert\psi\rangle,\ \langle\tilde{\psi}\rvert=\langle\psi\rvert\hat{U}^{+},\ \tilde{\hat{Q}}=\hat{U}\hat{Q}\hat{U}^{+},\ \hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}$