- **Quantenmechanischer Erwartungswert einer Observablen Q im Zustand $|\psi\rangle$.**

Wir haben

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

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

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

also

$$\underline{\langle Q\rangle = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle} \qquad \textbf{(5.24)}$$

Das ist die darstellungsunabhängige Verallgemeinerung des uns aus der Schrödinger´schen Wellenmechanik bekannten Ausdrucks $\langle Q\rangle = \int d^3r\; \psi^*(\underline{r})\;\hat{Q}\;\psi(\underline{r})$ **(5.24')**

- **Projektionsoperator**

Wir definieren den Projektionsoperator/Projektor

Def.: $\underline{\hat{P}_{|\psi_n\rangle} = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|}$ **(5.25)**

Dann ist die Wahrscheinlichkeit, mit der für Q im Zustand $|\psi\rangle$ der Wert q_n gemessen wird

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

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

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

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

Das ist die darstellungsunabhängige Formulierung der Normierungsbedingung, die wir in der Schrödinger´schen Wellenmechanik bereits in der Form $\int d^3r \ \psi^*(\underline{r})\, \psi(\underline{r}) = 1$ kennen gelernt haben (→ statistische Interpretation der Wellenfunktion).

6. Darstellungen der Quantenmechanik

Erinnere: Linearer Vektorraum Φ.

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

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

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 aus den c_i

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

• Hilbert-Raum H : Entwicklungssatz/Vollständigkeitsrelation in Dirac-Notation

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

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

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

6.1 Ortsdarstellung der Quantenmechanik. Schrödinger´sche Wellenmechanik

Als Basis in H verwenden wir das VONS aus den Eigenfunktionen $|\underline{r}'\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$ definiert durch

$$\hat{\underline{r}}\,|\underline{r}'\rangle = \underline{r}'\,|\underline{r}'\rangle \qquad \textbf{(6.1)}$$

$|\underline{r}'\rangle$ beschreibt den Zustand, in dem das Teilchen den definierten Ort $\underline{r} = \underline{r}'$ besitzt. In (6.1) ist $\underline{r}'$ eine reelle Zahl, also eine überabzählbar unendliche "kontinuierliche" Größe. Bei einer Ortsmessung ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Teilchen im Zustand $|\psi\rangle = \int d^3r'\,\langle \underline{r}'|\psi\rangle\,|\underline{r}'\rangle$ am Ort $\underline{r}'$ zu finden gleich (4. Postulat)

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

Also ist die **Ortsdarstellung des Kets** $|\psi\rangle$ **die Wellenfunktion**

$$\langle \underline{r}'|\psi\rangle = \psi(\underline{r}') \;. \qquad \textbf{(6.2)}$$

$\psi(\underline{r}') = \langle \underline{r}'|\psi\rangle$ ist der <u>kontinuierliche</u> Spaltenvektor aus den Entwicklungskoeffizienten des Zustands $|\psi\rangle$ nach den Eigenfunktionen des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$. Die <u>Vollständigkeit</u> des VONS $\{|\underline{r}\rangle\}$ schreibt sich also in der Form

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

und es gilt $\langle \underline{r}'|\psi\rangle = \int d^3r\;\psi(\underline{r})\,\langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle \overset{(6.2)}{=} \psi(\underline{r}') = \int d^3r\;\psi(\underline{r})\;\delta(\underline{r} - \underline{r}')$, d.h.

$$\langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle = \delta(\underline{r} - \underline{r}') \;. \qquad \textbf{(6.3)}$$

Schlussfolgerung: Die Basisvektoren der Ortsdarstellung $|\underline{r}'\rangle$ zu unterschiedlichen Ortswerten $\underline{r}' \neq \underline{r}$ sind zwar orthogonal, aber nicht im üblichen Sinne normiert, weil für $\underline{r}' = \underline{r}$ streng genommen divergent. Lassen wir jedoch verallgemeinerten Orthogonalitätsbedingungen der Form (6.3) zu, dann bilden die Eigenfunktionen des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$ ein VONS

Beachte:

(i) $\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n|$ bzw. $\hat{1} = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$ oder $\hat{1} = \int dp\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|$ **(6.4)**

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

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

$$\hat{Q} = \sum_{n=1}^{\infty} q_n |n\rangle\langle n| \quad \text{bzw.} \quad \hat{\underline{r}} = \int d^3r\, \underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| \quad \text{oder} \quad \hat{\underline{p}} = \int d^3p\, \underline{p}\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}| \qquad \textbf{(6.5)}$$

$\hat{Q}$ angewendet auf $|m\rangle$, ergibt (im diskreten Fall)

$\hat{Q}\,|m\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} q_n |n\rangle\langle n|m\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} q_n |n\rangle \delta_{nm} = q_m |m\rangle$, also die Eigenwertgleichung für $\hat{Q}$.

- **Ortsdarstellung des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$**

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

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

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

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

also $\underline{\langle\underline{r}|\hat{\underline{r}}\psi\rangle = \underline{r}\,\psi(\underline{r})}$ **(6.6)**

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.

Beachte: Eigenfunktion 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 anderen Zahl multipliziert: $\psi(\underline{r}_0)$ mit $\underline{r}_0$, $\psi(\underline{r}')$ mit $\underline{r}'$ usw. Also gilt

$$\underline{\hat{\underline{r}}\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0) = \underline{r}_0\ \delta(\underline{r}-\underline{r}_0)}\ . \qquad \textbf{(6.7)}$$

Vollständigkeit von $\{|\underline{r}\rangle\}$ bedeutet für beliebige $|\psi\rangle$ aus H $|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(r)\ |\underline{r}\rangle$, also

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

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

Das Matrixelement $\langle\underline{r}'|\hat{\underline{r}}|\underline{r}''\rangle$ des Operators $\hat{\underline{r}}$ ist in Ortsdarstellung (also zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$) mit Hilfe von $\hat{\underline{r}} = \int d^3r\ \underline{r}|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$, (6.5), leicht zu bestimmen

$$\langle\underline{r}'|\hat{\underline{r}}|\underline{r}''\rangle = \int d^3r\ \underline{r}\underbrace{\langle\underline{r}'|\underline{r}\rangle}_{\delta(\underline{r}'-\underline{r})}\underbrace{\langle\underline{r}|\underline{r}''\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}'')} \overset{\underline{r}=\underline{r}'}{\underset{\underline{r}=\underline{r}''}{=}} \underline{r}'\ \delta(\underline{r}'-\underline{r}'') = \underline{r}''\ \delta(\underline{r}'-\underline{r}'') \qquad \textbf{(6.8)}$$

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

Außerdem gilt ($\hat{1} = \int d^3r\ |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$ einschieben)

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

- **Ortsdarstellung des Impulsoperators**

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

$$\langle \underline{r}|\underline{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}} \quad . \qquad \textbf{(6.9)}$$

Auch diese Eigenfunktionen können streng genommen nicht Zustandsvektoren im H sein, denn

$$\underline{\langle \underline{p}'|\underline{p}\rangle} = \langle \underline{p}'|\underbrace{\int d^3r|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}_{\hat{1}}|\underline{p}\rangle = \int d^3r\langle\underline{p}'|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle \overset{(6.7)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3r\, e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{r}} = \underline{\delta(\underline{p}-\underline{p}')}\,.$$

Im letzten Schritt haben wir die Darstellung der δ-Funktion $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}$ verwendet.
Die Ortsdarstellung des Impulsoperators gewinnen wir aus der Projektion von $\hat{\underline{p}}|\psi\rangle = |\hat{\underline{p}}\psi\rangle$ auf $|\underline{r}\rangle$, wobei wir jetzt 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 der Ortsdarstellung

$$\hat{\underline{p}} = -i\hbar\underline{\nabla} \quad . \qquad \textbf{(6.10)}$$

Analog finden wir

$$\langle\underline{r}|f(\hat{\underline{p}})|\psi\rangle = f(-i\hbar\underline{\nabla})\langle\underline{r}|\psi\rangle, \qquad \textbf{(6.11)}$$

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 $\langle\underline{r}'|f(\hat{\underline{p}})|\underline{r}''\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\hat{f}(\underline{r}-\underline{r}')$. **(6.12)**

Dabei ist $\widehat{f}(\underline{r}) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \, f(\underline{p}) \, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ die inverse Fourier-Transformierte der Funktion $f(\underline{p})$, und wir setzen voraus, 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 Schrödinger-Gleichung

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ (5. Postulat) auf $|\underline{r}\rangle$ folgt mit (6.6) und (6.11)

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

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

Das ist die uns bekannte Grundgleichung der Schrödinger´schen "Wellenmechanik".

Fazit: Das Bohr´sche Korrespondenzprinzip der Schrödinger´schen Wellenmechanik

„ Man ersetze die klassische Phasenraumvariable $Q(\underline{p},\underline{r},t)$ durch den Operator $\hat{Q}$

entsprechend $\underline{Q(\underline{p},\underline{r},t) \longrightarrow \hat{Q} = Q(-i\hbar\underline{\nabla},\underline{r},t)}$ “

ergibt sich zwangsläufig (d.h., ohne zusätzliche Postulate/Prinzipien) aus der axiomatischen Formulierung der Quantenmechanik im Hilbert-Raum, wenn das VONS $\{|\underline{r}\rangle\}$ des Ortsoperators $\hat{\underline{r}}$ als Basis in H verwendet wird.

Die Darstellung $\langle \underline{r}|\psi(t)\rangle =: \psi(\underline{r},t)$ von $|\psi\rangle$ zur Basis $\{|\underline{r}\rangle\}$ genügt der Schrödinger-Gleichung der Wellenmechanik.

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

Wir verwenden nun als Basis in H das VONS $\{|\underline{p}\rangle\}$ der Eigenfunktionen des Impulsoperators $\hat{\underline{p}}$ und gehen genauso vor, wie in Kapitel 6.1 ausführlich gezeigt.

Eine Impulsmessung im Zustand $|\psi\rangle$ ergibt mit der Wahrscheinlichkeit

$\mathrm{Prob}(\underline{p}=\underline{p}') = \left|\langle\underline{p}'|\psi\rangle\right|^2$ den Wert $\underline{p}'$ wobei

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

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

Wegen der Vollständigkeit des VONS $\{|\underline{p}\rangle\}$ lässt sich jedes $|\psi\rangle \in$ H in der Form $|\psi\rangle = \int d^3p\ \phi(\underline{p})\ |\underline{p}\rangle$ darstellen. Daraus folgt

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

Somit sind die Funktionen des VONS $\{|\underline{p}\rangle\}$ im verallgemeinerten Sinne orthonormiert.

Unter Berücksichtigung von $\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$, (6.9), haben wir

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

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

Bem.: Die Fourier-Transformation ist die Entwicklung der Funktion $\phi(\underline{p})$ nach dem VONS des Impulsoperators. Multiplikation mit $e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$, Integration über d^3p führt unter Ausnutzung von $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}$ auf $\psi(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p\, \phi(\underline{p})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$.

- **Impulsoperator in p-Darstellung**

Wir benötigen

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

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

$$\left\langle \underline{p}\middle|\hat{\underline{p}}\psi\right\rangle = \underline{p}\left\langle\underline{p}\middle|\psi\right\rangle, \qquad \hat{\underline{p}} = \underline{p}\ . \tag{6.10'}$$

→ in der Impulsdarstellung bewirkt der Impulsoperator eine Multiplikation mit $\underline{p}$

- **Ortsoperator in p-Darstellung**

Dagegen ist der Ortsoperator in p-Darstellung ein Differentialoperator im p-Raum, denn (Spektraldarstellung von $\hat{\underline{p}}$ und (6.9) verwenden)

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

$$\left\langle \underline{p}\middle|\hat{\underline{r}}\psi\right\rangle = i\hbar\underline{\nabla}_p\left\langle\underline{p}\middle|\psi\right\rangle, \qquad \hat{\underline{r}}\,\phi(\underline{p}) = i\hbar\underline{\nabla}_p\,\phi(\underline{p}) \qquad \text{also } \hat{\underline{r}} = i\hbar\underline{\nabla}_p \tag{6.4'}$$

Einschub: Man findet (nachprüfen)

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

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

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

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

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

6.3 Darstellungswechsel. Unitäre Transformationen

Ausgangspunkt: Die experimentell überprüfbaren Vorhersagen der Quantenmechanik beziehen sich alle auf Skalarprodukte im H (vgl. Postulate, Kap. 5), nämlich auf

$\rightarrow$ Eigenwerte hermitescher Operatoren $\hat{Q}\,|n\rangle = q_n\,|n\rangle \;\rightarrow\; q_n = \langle n|\hat{Q}|n\rangle = \langle n|\hat{Q}\,n\rangle$,

$\rightarrow$ Messwahrscheinlichkeiten $\mathrm{Prob}(q = q_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2$,

$\rightarrow$ Erwartungswerte $\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle$ der Observablen Q bei Messung im Zustand $|\psi\rangle$,

Dagegen ändern sich die Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ und die Operatoren $\hat{Q}$ im Hilbert-Raum in Abhängigkeit von der Darstellung, wie wir im letzten Kapitel am Beispiel der Orts- und Impulsdarstellung gesehen haben.

Frage: Welche Transformationen $\hat{U}$ der Kets $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathsf{H}$ lassen das Skalarprodukt $\langle\phi|\psi\rangle$ invariant?

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

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

$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{1}$, d.h. $\underline{\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}}$ oder $\hat{U}\,\hat{U}^+ = \hat{1}$, also $\hat{U}$ $\rightarrow$ unitärer Operator. **(6.15)**

Schlussfolgerung: Die Transformation der Kets $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathsf{H}$ (also der Übergang zwischen zwei VONS oder der Darstellungswechsel), die Skalarprodukte $\langle\phi|\psi\rangle$ invariant lässt, wird durch einen unitären Operator $\hat{U}$ vermittelt.

- Matrixschreibweise: 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, denn

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

- **Unitäre Transformation eines Operators**

Der hermitesche Operator $\hat{Q}$ besitze die Eigenfunktionen $\{|n\rangle\}$ mit dazugehörigen Eigenwerten q_n. In der Basis seiner Eigenfunktionen wird $\hat{Q}$ durch eine diagonale Matrix mit den Elementen dargestellt $(\langle n'|\hat{Q}|n\rangle) = (q_n\, \delta_{n'n})$.

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

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

<u>Fazit</u>: Die Matrix zum Operator $\hat{Q}$ kann durch eine unitäre Transformation $\underline{\underline{U}}$ diagonalisiert werden.

Aus $\hat{Q} = \hat{U}^+ \tilde{\hat{Q}}\, \hat{U}$ folgt mit (6.15) $\tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^+$. **(6.16)**

Insgesamt gilt bei einem Basiswechsel in H :

(i) Ket $|\psi\rangle \to |\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$,

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

(iii) Operator $\hat{Q} \to \tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^+$ und

(iv) $\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle = (\hat{U}|\phi\rangle)^+ \hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$.

Zustandsvektoren und Operatoren ändern sich, aber die Skalarprodukte bleiben invariant.

Beachte: Für die Transformation des Kommutators $[\hat{A},\hat{B}]$ gilt

$$\underline{[\tilde{\hat{A}},\tilde{\hat{B}}]} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{B}\hat{U}^{+} - \hat{U}\hat{B}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+} = \hat{U}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{U}^{+} = \underline{\widetilde{[\hat{A},\hat{B}]}} \qquad \textbf{(6.17)}$$

Ob zwei Operatoren vertauschbar sind oder nicht, ist unabhängig von ihrer Darstellung.

Weitere Eigenschaften unitärer Operatoren (→ Übung)

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

(ii) $\left(\tilde{\hat{Q}}\right)^{+} = \left(\tilde{\hat{Q}}^{+}\right)$ → der adjungierte des transformierten Operators und der transformierte des adjungierten Operators stimmen überein. Mit anderen Worten: Die unitäre Transformation und die Adjungation eines Operators sind vertauschbar.

(iii) 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.

6.4 Dynamik von Quantensystemen. Heisenberg-Bild. Integrale der Bewegung

Bisher ist die Zeitentwicklung des Zustands eines quantenmechanischen System durch die Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ (abgesehen von Zustandsreduktion infolge einer Messung) gemäß

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

gegeben.

Nun definieren wir den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t,t_0)$

Def.: $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1}$. $\quad \rightarrow$ Zeitentwicklungsoperator **(6.18)**

Dieser Operator muss unitär sein, damit die Normierung erhalten bleibt:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad \text{wenn} \quad \hat{U}^+(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0).$$

Der Zeitentwicklungsoperator ist Lösung der Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\,\hat{U}(t,t_0), \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1}. \tag{6.19}$$

- **Heisenberg-Bild**

Def.: $|\psi_H\rangle := \hat{U}^+(t,t_0)|\psi(t)\rangle$. **(6.20)**

$|\psi_H\rangle$ ist ein konstanter, zeitunabhängiger Zustandsvektor, denn

$$|\psi_H\rangle = \hat{U}^+(t,t_0)|\psi(t)\rangle = \hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$$

Rücktransformation: $|\psi(t)\rangle := \hat{U}(t,t_0)|\psi_H\rangle$.

Die Transformation der Operatoren in das Heisenberg-Bild erfolgt nach den Regeln für unitäre Transformationen, also

$$\hat{Q}_H(t) = \hat{U}^+(t,t_0)\;\hat{Q}(t)\;\hat{U}(t,t_0) \qquad \text{bzw.} \qquad \hat{Q}(t) = \hat{U}(t,t_0)\;\hat{Q}_H(t)\;\hat{U}^+(t,t_0). \tag{6.21}$$

- **Konservative Systeme**

In diesem Fall ist $\hat{H}$ zeitunabhängig und die Lösung von (6.19) lautet $\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$.

$\hat{H}$ und $\hat{U}$ sind also miteinander vertauschbar.

Die Operatoren anderer Observabler sind aber im allgemeinen zeitabhängig

$$\hat{Q}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\,\hat{Q}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

bis auf diejenigen, die mit $\hat{H}$ kommutieren. Für die vollständige Ableitung nach der Zeit folgt aus (6.21)

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t}\hat{Q}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{Q}\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}$$

und unter Verwendung von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U} = \hat{H}\,\hat{U}$ bzw. $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{H}$ aus (6.19)

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \left(\frac{1}{-i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\right)\hat{Q}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{Q}\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\hat{U}\right) = \frac{1}{i\hbar}\underbrace{\hat{U}^+(\hat{Q}\,\hat{H} - \hat{H}\hat{Q})\,\hat{U}}_{[\hat{Q},\hat{H}]_H = [\hat{Q}_H,\hat{H}_H]} + \underbrace{\hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U}}_{\text{Def.:}\frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t}},$$

also insgesamt die Bewegungsgleichung der Operatoren im Heisenberg-Bild

$$\underline{i\hbar\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \left[\hat{Q}_H,\hat{H}_H\right] + i\hbar\frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t}} \qquad \textbf{(6.22)}$$

Fazit: Im Heisenberg-Bild sind die Zustandvektoren zeitunabhängig. Die Operatoren sind dagegen zeitabhängig, auch wenn der entsprechende Operator im Schrödinger-Bild nicht explizit von der Zeit abhängt. Die zeitliche Entwicklung des quantenmechanischen Systems ist im Heisenberg-Bild vollständig in den Bewegungsgleichungen der Operatoren enthalten.

- Integrale der Bewegung

<u>Def.</u>: Die Observable Q heißt Integral der Bewegung, wenn Q nicht explizit von der Zeit abhängt und $\hat{Q}$ mit dem Hamilton-Operator des betrachteten quantenmechanischen Systems vertauschbar ist.

Für ein Bewegungsintegral Q ist der quantenmechanische Erwartungswert für beliebige Zustände $|\psi(t)\rangle$ zeitunabhängig, d. h., $\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = 0$.

Man kann zeigen, dass für ein Integral der Bewegung (Eigenwertgleichung $\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$) mit zeitunabhängigen Eigenwerten und Eigenfunktionen) sogar die Messwahrscheinlichkeiten Prob($q = q_n$) $= |\langle\psi_n|\psi(t)\rangle|^2 = |c_n(t)|^2$ zeitunabhängig sind.
In der Quantenmechanik hat eine Erhaltungsgröße/Integral der Bewegung i.a. keinen scharfen Wert. Eine Messung liefert ein q_n mit der zeitunabhängigen Wahrscheinlichkeit $|c_n(t)|^2$.

Beachte die Korrespondenz $\{Q,H\} \leftrightarrow \frac{i}{\hbar}[\hat{Q},\hat{H}]$ zwischen den Poisson-Klammern aus Q und H in der Hamilton´schen Mechanik

$$\frac{d}{dt}Q(\underline{p},\underline{q},t) = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial Q}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial Q}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}\right) + \frac{\partial Q}{\partial t} = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial Q}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial Q}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial Q}{\partial t} = \{Q,H\} + \frac{\partial Q}{\partial t},$$

und den Kommutatoren der zugeordneten Operatoren $\hat{Q}$ und $\hat{H}$ im Heisenberg-Bild der Quantenmechanik entsprechend (6.22).

Einschub: Zusammenfassung Hilbert-Raum H

Zustandsvektor $|\psi\rangle$

Basis $\{|n\rangle\}$, diskret oder kontinuierlich, z.B. VONS der Eigenfunktionen des Operators $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ zur klassischen Observablen Q

Orthonormierung
$$\langle n|n'\rangle = \begin{cases} \delta_{nn'} & \to \text{ diskrete Basis} \\ \delta(n-n') & \to \text{ kontinuierliche Basis} \end{cases}$$

Vollständigkeit/Superposition
$$|\psi\rangle = \begin{cases} \sum\limits_{n=1}^{\infty} c_n\,|n\rangle = \sum\limits_{n=1}^{\infty} \langle n|\psi\rangle\,|n\rangle, \text{ also } c_n := \langle n|\psi\rangle, \text{ diskrete Basis} \\ \int dn\,\langle n|\psi\rangle\,|n\rangle, \text{ kontinuierliche Basis} \end{cases}$$

nützlich
$$\begin{cases} \sum\limits_{n} |n\rangle\langle n| = \hat{1}\,,\ \hat{Q} = \sum\limits_{n=1}^{\infty} q_n\,|n\rangle\langle n|\,, \text{ diskrete Basis} \\ \int dn\,|n\rangle\langle n| = \hat{1}\,,\ \hat{Q} = \int dq\, q\,|n\rangle\langle n|\,, \text{ kontinuierliche Basis} \end{cases}$$

Darstellung zur Basis $\{|n\rangle\}$
$$|\psi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^+ \leftrightarrow (c_1^*, c_2^*, \ldots c_n^*, \cdots) = (\langle\psi|1\rangle, \langle\psi|2\rangle, \ldots \langle\psi|n\rangle, \cdots)$$

Skalarprodukt
$$\langle\phi|\cdot|\psi\rangle := \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$$

linearer Operator
$$|\psi'\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle = |\hat{Q}\psi\rangle\ ,\quad \langle\hat{Q}\psi| = |\hat{Q}\psi\rangle^+ = \langle\psi|\hat{Q}^+$$

hermitescher Operator $\hat{Q} = \hat{Q}^+$

Matrixdarstellung, Basis $\{|n\rangle\}$
$$\hat{Q} \leftrightarrow \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1j} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix},\quad Q_{ij} := \langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle$$

Basiswechsel:
$$|\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle,\ \langle\tilde{\psi}| = \langle\psi|\hat{U}^+,\ \tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^+,\ \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1},$$
Skalarprodukte invariant