

$$\begin{aligned} \psi(\underline{r}) &= \langle \underline{r} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | \hat{T} \psi \rangle = \langle \underline{r} | \int d\underline{p} | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle \\ \tilde{\psi}(\underline{p}) &= \langle \underline{p} | \psi \rangle = \int d\underline{r} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \langle \underline{r} | \psi \rangle \\ &= \int d\underline{r} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \underbrace{\langle \underline{r} | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(\underline{r})} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle &= \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle^* \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar \underline{p} \cdot \underline{r}} \end{aligned}$$

$\underline{r}, \underline{p}$  bilden eine Basis:  
(Vollständige Orthonormalität)

$$\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = \hat{1}$$

$$\int d\underline{p} |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| = \hat{1}$$

Annahme eines beliebigen Skalarprodukts:

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

Norm:

$$\|\psi\| = \sqrt{\underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\text{reell, } \geq 0}} = \sqrt{\int d\underline{r} |\psi(\underline{r})|^2} = \sqrt{\int d\underline{p} |\tilde{\psi}(\underline{p})|^2}$$

Skalarprodukt zw. den Basisvektoren der  $\underline{r}$ - bzw.  $\underline{p}$ -Basis

$$\langle \underline{r}' | \underline{r} \rangle = \langle \underline{r}' | \hat{T} \underline{r} \rangle \quad \text{Impulsbasis}$$

$$\begin{aligned}
&= \int dp \langle \underline{r}' | p \rangle \langle p | \underline{r} \rangle \\
&= \int dp \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{p}{\hbar} \cdot (\underline{r}' - \underline{r})} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{k} e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r}' - \underline{r})} \\
&= \delta(\underline{r}' - \underline{r})
\end{aligned}$$

$\frac{p}{\hbar} = \underline{k}$

die  $\underline{r}$ -~~vekt~~ Basisvektoren  $(| \underline{r} \rangle)$   
 bilden eine Kontinuierliche Basis mit „orthogonale“ Eigenschaften!

analog:

$$\begin{aligned}
\langle p' | p \rangle &= \dots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{r} e^{i\frac{\underline{r}}{\hbar} \cdot (\underline{p} - \underline{p}')} \\
&= \frac{1}{\hbar^3} \delta(\underline{k}' - \underline{k}) = \delta(p' - p)
\end{aligned}$$

$\underline{p} = \hbar \underline{k}$

### (ii) Besondere Eigenschaften von $\mathcal{H}$

(insbesondere wichtig für  $\infty$ -dimensionale Probleme!)

- $\mathcal{H}$  ist ein vollständiger Vektorraum

Der Grenzwert jeder Cauchyfolge  $\{ \psi_n \}$  liegt in  $\mathcal{H}$   
 (d.h. Konvergenz gegen ein Element  $\{ \psi \}$   
 im  $\mathcal{H}$ )

Bemerkung:

Eine Folge heißt Cauchyfolge, falls zu jedem  $\varepsilon > 0$  ein  $n_0 \in \mathbb{N}$  existiert, so dass

$$\|\psi_m - \psi_n\| < \varepsilon, \quad \forall n, m > n_0$$

•  $\mathcal{H}$  ist separabel

Es gibt in  $\mathcal{H}$  (unendlichdimensional) eine dichte Folge von Vektoren  $\{\psi_n\}$

Diese Folgen kommen auch jedem Zustandsvektor des vollständigen Orthonormalsystems von  $\mathcal{H}$  beliebig nahe

Da die Glieder einer Folge abzählbar sind, folgt:

→ Dimension von  $\mathcal{H}$  ist höchstens abzählbar unendlich!

• "Dirac-Vektoren": Uneigenliche Vektoren im Hilbertraum

z.B.  $|k\rangle, |p\rangle$  Basisvektoren in der Orts- bzw. Impulsdarstellung

Diese Vektoren sind kontinuierlich (nicht abzählbar!)

Eigenschaften:

• Dirac-Vektoren bezeichnet man als "normiert", falls

$$\langle d_k | d_{k'} \rangle = \delta(k - k')$$

(Kontinuierlicher Index)

(Unterschied zu gewöhnl. Vektoren in  $\mathcal{H}$ :  
 Normierung, falls  $\frac{\langle \psi | \psi \rangle}{\|\psi\|^2} = 1$ )

aber: Es existiert das Skalarprodukt mit gewöhnl. Zuständen:

z.B.  $\langle \underline{N} | \psi \rangle = \psi(\underline{r})$   
Wellenfunktion

• Erweiterter Hilbert-Raum

$\hat{=}$  Menge der eigentlichen und uneigentlichen Zustandsvektoren

• Dualer Raum

$|\psi\rangle$   
 "ket"-Vektor in  $\mathcal{H}$

$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$   
 "bra-ket"

$\langle \psi |$   
 "bra"-Vektor : Vektor in emi zu  $\mathcal{H}$  dualer Raum  
 ( $\mathcal{H}^*$ )

III.3. Operatoren im Hilbertraum

zum Begriff des Operators:

Sei  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  (Ket-Vektor im Hilbertraum)

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle \in \mathcal{H}$$

Analogie:  
lin. Algebra  
 $\frac{A}{\text{Matrix}} x = x$

Abbildung eines Zustandsvektors  $|\psi\rangle$  auf einen anderen Zustand  $|\phi\rangle$  im Hilbertraum

Allgemein:

Quantenmechanische „Observablen“, z.B. Impuls, Ort, Energie, Drehimpuls  
werden dargestellt durch lineare (hermitesche) Operatoren  
↳ noch zu klären!

Beispiele:

$\hat{p}, \hat{x}$  : Impuls- bzw. Ortsoperator

$\hat{H}$  : Hamiltonoperator

zeit unabh. SG:  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\Rightarrow \hat{H}$  entspricht der Energie

$\hat{1}$  (oder  $\hat{1}$ ) Einheitsoperator

$$\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Erinnerung:

Ortsdarstellung

$$\hat{x} \rightarrow x$$

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

Impulsdarstellung

$$\hat{x} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_p$$

$$\hat{p} \rightarrow p$$

Alternative Darstellung des Impulsoperators:

Ausgangspunkt:  $\hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle \xrightarrow{\substack{\text{ebene Wellen-} \\ \text{ortsabhängige Funktion!}}} \frac{1}{i} \nabla \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \frac{p \cdot \underline{r}}{\hbar}}$

bzw.: „Impuls-Zustand“  
in der Ortsdarstellung

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

$$\Rightarrow \underline{\hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle = p \langle \underline{r} | p \rangle}$$

bzw.  $\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \hat{p} \langle \underline{r} | p \rangle = \int d\underline{r} |\underline{r}\rangle p \langle \underline{r} | p \rangle$

$$\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \frac{1}{i} \nabla \langle \underline{r} | p \rangle = p \int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r} | p \rangle$$

$$= p |p\rangle$$

Kein Operator, sondern  
einfach Impuls-Vektor!

Zwei Schlussfolgerungen:

$$\textcircled{1} \hat{p} = \int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \frac{1}{i} \nabla \langle \underline{r} |$$

„Darstellungsbasierter“  
Impulsoperator

$$\textcircled{2} \hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$$

Eigenwertgleichung!

Die Vektoren  $|p\rangle$  sind die Eigenzustände des Impulsoperators. Die zugehörige Ortsdarstellung  $\langle \underline{r} | p \rangle$  sind ebene Wellen !!

analog für Ortsoperatoren

$$\hat{r} = \int d\underline{p} |p\rangle \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_p\right) \langle p|$$

und  $\hat{r} |\underline{r}\rangle = \underline{r} |\underline{r}\rangle$

Folgerungen:

$$\langle p' | \hat{p} | p \rangle \stackrel{②}{=} p \langle p' | p \rangle = p \delta(p' - p)$$

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

betrachte nun den  
Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{r}, \hat{p})$$

↳ Zeitunabh. Problem

Spektraldarstellung

Ausgangspunkt: Zeitunabh. SG

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

Vorstellung: diskretes Problem

Ortsdarstellung:

$$\hat{H} \varphi_n(\underline{r}) = E_n \varphi_n(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad \varphi_n(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \varphi_n \rangle$$

$$\text{und } \hat{H} = \hat{H}(\underline{r}, \underbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla}_{\hat{p}})$$

analog zum Vorgehen wie beim  $\hat{p}$ -Operator lässt sich zeigen -

$$\langle \underline{r}' | \hat{H}(\underline{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) | \underline{r} \rangle$$

darstellungsfreie Form für  $\hat{H}$

Dan ist noch nicht die Spektraldarstellung!

Nehme nun an, dass die  $|\varphi_n\rangle$  (Energie-Eigenzustände) eine (vollständige) Basis bilden.

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \hat{1} \quad (\text{P})$$

mit  $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{m,n}$   
diskrete Basis

⇒ Spektraldarstellung:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H} \hat{1} = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \end{aligned}$$

zeitunabhängige SG

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$



$$A = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$$

Energiezustände  
 Energi-Eigenwerte  
 Projektionsoperator auf den n-ten Eigenzustand

denn  $|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \varphi\rangle = \text{Zahl } |\varphi_n\rangle$

### III.4. Rechenregeln für Operatoren

typischerweise betrachtet man lineare Operatoren

$$\hat{A} (\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle)$$

$$= \lambda_1 \hat{A} |\varphi_1\rangle + \lambda_2 \hat{A} |\varphi_2\rangle$$

$$(\hat{A} + \hat{B}) |\varphi\rangle = \hat{A} |\varphi\rangle + \hat{B} |\varphi\rangle$$

$$\hat{A} \hat{B} |\varphi\rangle = \hat{A} (\hat{B} |\varphi\rangle) \quad \text{erst } \hat{B} \text{ anwenden, dann } \hat{A}$$

Beachte: im allgemeinen ist  $\hat{A} \hat{B} |\varphi\rangle \neq \hat{B} \hat{A} |\varphi\rangle$

$$\text{Kommutator } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}$$

## Adjungierter Operator

$$\text{Sei } |\Phi\rangle = \hat{A} |\psi_2\rangle$$

Skalarprodukt mit einem anderen Zustand

$$\langle \psi_1 | \Phi \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle$$

$\hat{A}$  wird hier  
nach „rechts“!

„Matrixelement“ des Operators  $\hat{A}$  mit dem Ket  $|\psi_2\rangle$   
und dem bra  $\langle \psi_1 |$

Da zu  $\hat{A}$  adjungierter Operator ist definiert durch die Relation:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (*)$$

adjungierter Operator

in Worten:

Zieht man im Matrixelement den Operator „nach vorne“,  
so geht dieser in seinen adjungierten Operator über!

Alternativ von (\*)

$$\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|$$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle = \langle \psi_1 | \hat{1} \hat{A} |\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r} \underbrace{\langle \psi_1 | \underline{r} \rangle}_{\langle \underline{r} | \psi_1 \rangle^*} \underbrace{\langle \underline{r} | \hat{A} |\psi_2\rangle}_{\hat{A} \langle \underline{r} | \psi_2 \rangle}$$

$$= \int d\underline{r} \psi_1^*(\underline{r}) \hat{A} \psi_2(\underline{r})$$

$$(*) \stackrel{!}{=} \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$= \int dx \left( \hat{A}^\dagger \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x)$$

Alternativ <sup>zu ⊕</sup> kann man den adjungierte Operator definieren wie folgt.

$$\hat{A}|\psi_2\rangle = |\phi\rangle \iff \langle \hat{A}^\dagger \psi_2 | = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger = \langle \phi |$$

Es gilt.

$$\cdot (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

$$\begin{aligned} \text{denn: } \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger \psi_2 | \psi_2 \rangle \\ &= \left( \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger \psi_2 \rangle \right)^* \end{aligned}$$

$$\boxed{\text{benutzt: } \langle \phi | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \phi \rangle^*}$$

$$\begin{aligned} &= \left( \langle (\hat{A}^\dagger)^\dagger \psi_2 | \psi_2 \rangle \right)^* \\ &= \left( \langle \psi_2 | (\hat{A}^\dagger)^\dagger \psi_2 \rangle \right)^* \\ &= \langle \psi_2 | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

*nochmaliges Drehen  
des Skalarprodukts*

$$\Rightarrow \hat{A} = (\hat{A}^\dagger)^\dagger$$

$$\bullet (\lambda \hat{A})^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

$$\bullet (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$$

$$\bullet (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$$

$$\begin{aligned} \text{denn. } \langle \psi_1 | \hat{A}\hat{B} | \psi_2 \rangle &= \langle (\hat{A}\hat{B})^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_2 | (\hat{A}\hat{B})^\dagger \psi_1 \rangle^* \quad \textcircled{1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{und } \langle \psi_1 | \hat{A}\hat{B} | \psi_2 \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle \\ &= \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_2 | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle^* \quad \textcircled{2} \end{aligned}$$

$$\text{Vergleiche } \textcircled{2} \text{ und } \textcircled{1} \Rightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$$

### Spezialfall

extrem wichtig für Operatoren, die physikalische Observablen beschreiben

Ein selbstadjungierter (hermitescher) Operator ist dadurch definiert, dass

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

