2 Der mathematische Rahmen der Quantenmechanik

2.1 Der Raum der Wellenfunktionen

- Die Menge der quadratintegrablen Funktionen $\psi(\vec{x})$ auf $\mathbb{R}^n$ wird als $L^2(\mathbb{R}^n)$ (bzw. L^2) bezeichnet

$$L^2(\mathbb{R}^n) = \{\psi(\vec{x}) : \int \mathrm{d}^n x \, |\psi(\vec{x})|^2 < \infty\}$$

- $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein **Vektorraum**, d.h. insbesondere falls $\psi, \phi \in L^2$ und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ dann ist auch

$$\lambda\psi + \mu\phi \in L^2 \tag{1}$$

- In L^2 lässt sich ein **Skalarprodukt** definieren. Jedem Paar $\psi, \phi \in L^2$ ordnen wir eine komplexe Zahl $(\psi, \phi) \in \mathbb{C}$ zu

$$(\psi, \phi) = \int \mathrm{d}^n x \, \psi^*(\vec{x})\phi(\vec{x})$$

- **Eigenschaften des Skalarproduktes**:
  - $(\psi, \phi)^* = (\phi, \psi)$
  - $(\psi, \lambda\phi + \mu\chi) = \lambda(\psi, \phi) + \mu(\psi, \chi)$
  - $(\lambda\psi + \mu\phi, \chi) = \lambda^*(\psi, \chi) + \mu^*(\phi, \chi)$
  - Wenn $(\psi, \phi) = 0$ dann heißen ψ und ϕ **orthogonal**.
    Es gilt
    $$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}^n x \, |\psi(\vec{x})|^2 \geq 0$$
    und
    $$(\psi, \psi) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \psi = 0$$
  - Für das Skalarprodukt gilt die Cauchy - Schwartz - Ungleichung, womit sich Gleichung (1) beweisen lässt
    $$|(\psi, \phi)| \leq \sqrt{(\psi, \psi)}\sqrt{(\phi, \phi)}$$
- Mit dem Skalarprodukt lässt sich eine **Norm** definieren
  $$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) \geq 0$$

- Ein Vektorraum mit einem Skalarprodukt und einer dadurch induzierten Norm ist ein **(Prä-)Hilbertraum** $\mathcal{H}$.

  Beispiele für Hilberträume, die in der Quantenmechanik wichtig sind:

  - $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$, der Raum der quadratintegrablen Funktionen mit dem Skalarprodukt
  $$(\psi, \phi) = \int \mathrm{d}^n x \, \psi^*(\vec{x})\phi(\vec{x})$$
  und der Norm
  $$||\psi||^2 = (\psi, \psi) = \int \mathrm{d}^n x \, |\psi(\vec{x})|^2$$

  - $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, der Raum der n-komponentigen, komplexen Vektoren mit dem Skalarprodukt
  $$(\psi, \phi) = \sum_{k=1}^{n} c_k^* d_k$$
  für $\psi = (c_1, c_2, \ldots, c_n)$ und $\phi = (d_1, d_2, \ldots, d_n)$ und der Norm
  $$||\psi||^2 = (\psi, \psi) = \sum_{k=1}^{n} |c_k|^2$$

  Bemerkung: Ein **Hilbertraum** ist ein vollständiger Prähilbertraum, d.h. jede konvergent Folge von Elementen $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$ konvergiert gegen ein Element $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

- Ein **linearer Operator** A ist eine Abbildung die jedem Element $\psi \in \mathcal{H}$ ein anderes Element zuordnet

$$A\psi = \widetilde{\psi}$$

wobei gilt

$$A(\lambda\psi + \mu\phi) = \lambda A\psi + \mu A\phi$$

Beispiele:

- **Ortsoperator** $\hat{x}_k$ mit $k = 1, 2, 3$

$$\hat{x}_k \psi(\vec{y}) = x_k \psi(\vec{y})$$

- **Impulsoperator** $\hat{p}_k$ mit $k = 1, 2, 3$

$$\hat{p}_k \psi(\vec{x}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{x})$$

- **Operator der kinetischen Energie**

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

- **Hamiltonoperator**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

- **Drehimpulsoperator**

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \qquad \text{d.h.} \quad \hat{L}_k = \sum_{l,m=1}^{3} \varepsilon_{klm} \hat{x}_l \hat{p}_m$$

- Das Produkt AB von linearen Operatoren A und B ist definiert durch

$$AB\psi(\vec{x}) = A[B\psi(\vec{x})]$$

Zuerst wird B angewendet, dann A. Im Allgemeinen gilt $AB \neq BA$.

- Die Differenz $AB - BA$ heißt **Kommutator** von A und B und wird bezeichnet als

$$[A, B] = AB - BA$$

Eigenschaften des Kommutators:

- $[A, B] = -[B, A]$
- $[\lambda A, B] = [A, \lambda B] = \lambda [A, B]$ für $\lambda \in \mathbb{C}$
- $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ und $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$ (Linearität)
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ und $[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$ (Kettenregel)

- Wichtige Kommutatoren in der Quantenmechanik:

  - Für Ortsoperator $\hat{x}$ und Impulsoperator $\hat{p}$ in 1D gilt die **kanonische Kommutatorrelation**

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Beweis: Für beliebige $\psi(x)$ gilt

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x) = \hat{x}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)[x\psi(x)] = i\hbar\psi(x)$$

  - Für Ortsoperator $\hat{\vec{x}}$ und Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ in 3D gilt

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl} \qquad [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0 \qquad (k, l = 1, 2, 3)$$

Beweis: Analog wie in 1D.

  - Für die Komponenten des Drehimpulsoperators $\hat{\vec{L}}$ gilt

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{L}_m$$

Beweis: Definition des Drehimpulsoperators, Kettenregel und kanonischer Kommutator für Ort und Impuls.

- Der zu A **adjungierte Operator** $A^\dagger$ erfüllt

$$(\psi, A\phi) = (A^\dagger \psi, \phi)$$

Beispiel: Sei A der Differentialoperator in einer Dimension $A = \frac{\partial}{\partial x}$

$$\begin{aligned}
(\psi, A\phi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi^*(x) A\phi(x) \\
&= \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \\
&= \psi^*(x)\phi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \mathrm{d}x \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) \right) \phi(x) \\
&\overset{!}{=} (A^\dagger \psi, \phi) \qquad \text{also} \qquad A^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}
\end{aligned}$$

Allgemeiner gelten die **Eigenschaften des Adjungierens**:

- $\left(A^\dagger\right)^\dagger = A$
- $(A\psi, \phi) = (\psi, A^\dagger \phi)$
- $(\lambda A + \mu B)^\dagger = \lambda^* A^\dagger + \mu^* B^\dagger$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

- Ein **selbstadjungierter (oder hermitescher) Operator** erfüllt

$$A = A^\dagger$$

Beispiel: Der Impulsoperator: $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{p}\phi) &= \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \phi(x) \\ &= -\int \mathrm{d}x \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x)\right) \phi(x) \\ &= \int \mathrm{d}x \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)^* \phi(x) \\ &= (\hat{p}\psi, \phi)\end{aligned}$$

Für die Eigenwerte und -vektoren eines hermitschen Operators A

$$A\psi_{n,\alpha} = \lambda_n\psi_{n,\alpha}$$

gelten die Eigenschaften:

- Die **Eigenwerte sind reell**: $\lambda_n \in \mathbb{R}$
- Die **Eigenvektoren** $\psi_{n,\alpha}$ **sind orthogonal**:

$$(\psi_{n,\alpha}, \psi_{m,\beta}) = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}$$

[Beweis: Siehe später.]

2.2 Dirac Schreibweise

Ist eine sehr effiziente Notation für Rechnungen in der Quantenmechanik.

- Ein Vektor in einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ wird als **'Ket'** bezeichnet und geschrieben als

$$|\psi\rangle$$

- Ein lineares Funktional χ auf $\mathcal{H}$ ist eine Abbildung, die einem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eine komplexe Zahl zuordnet

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \xmapsto{\chi} \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

  und linear ist:

$$\chi\big(\lambda\,|\psi\rangle + \mu\,|\phi\rangle\,\big) = \lambda\chi(|\psi\rangle) + \mu\chi(|\phi\rangle)$$

  Der Raum der linearen Funktionale ist selbst ein Vektorraum und heißt dualer Raum $\mathcal{H}^*$ zu $\mathcal{H}$. Elemente im dualen Raum $\mathcal{H}^*$ werden als **'Bra'** bezeichnet und geschrieben als

$$\langle\chi|$$

  so, dass $\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$

- Wir können zu jedem Ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ einen Bra $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ assoziieren: $\langle\psi|$ bildet einen ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ auf die komplexe Zahl $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ ab, das heißt

$$\begin{aligned} \langle\psi|\phi\rangle &= (|\psi\rangle, |\phi\rangle) \\ &= \int \mathrm{d}^n x\, \psi^*(\vec{x})\phi(\vec{x}) \qquad \text{[für Elemente in } L^2\text{]} \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle, \;.\;)$$

Damit gilt (siehe Skalarprodukt):

- $\langle\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle$
- $\langle\psi|\lambda\phi_1 + \mu\phi_2\rangle = \lambda\,\langle\psi|\phi_1\rangle + \mu\,\langle\psi|\phi_2\rangle$
- $\langle\lambda\psi + \mu\phi|\phi\rangle = \lambda^*\,\langle\psi|\phi\rangle + \mu^*\,\langle\phi|\phi\rangle$
- $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ und $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \Longleftrightarrow |\psi\rangle = 0$

- Für einen linearen Operator A gilt:

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\phi\rangle &= (|\psi\rangle\,, A\,|\phi\rangle)\\ &= \int \mathrm{d}^n x\,\psi^*(\vec{x})(A\phi(\vec{x})) \qquad \text{[z.B. für Elemente in } \mathcal{H}=L^2\text{]}\end{aligned}$$

Es gilt

$$\langle\psi|A|\phi\rangle^* = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle$$

Beweis: $\langle\psi|A|\phi\rangle^* = (|\psi\rangle\,, A\,|\phi\rangle)^* = (A\,|\phi\rangle\,, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle\,, A^\dagger\,|\psi\rangle) = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle$
Damit lassen sich Mittelwerte schreiben als

$$\langle\vec{x}\rangle := \langle\psi|\hat{\vec{x}}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^n x\,\psi^*(\vec{x})(\hat{\vec{x}}\,\psi(\vec{x})) = \int \mathrm{d}^n x\,\vec{x}|\psi(\vec{x})|^2$$

$$\langle\vec{p}\rangle := \langle\psi|\hat{\vec{p}}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^n x\,\psi^*(\vec{x})(\hat{\vec{p}}\,\psi(\vec{x})) = \int \mathrm{d}^n x\,\psi^*(\vec{x})\left(-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x})\right)$$

- Es gilt

$$A\,|\psi\rangle = |\phi\rangle \qquad \longleftrightarrow \qquad \langle\psi|\,A^\dagger = \langle\phi|\,.$$

Beweis:
Wegen $A\,|\psi\rangle - |\phi\rangle = 0$ gilt für alle $|\chi\rangle$, dass $0 = \langle\chi|\,\big(A\,|\psi\rangle - |\phi\rangle\,\big) = \langle\chi|A|\psi\rangle - \langle\chi|\phi\rangle$
bzw. durch komplex konugieren $0 = \langle\psi|A^\dagger|\chi\rangle - \langle\phi|\chi\rangle = \big(\,\langle\psi|\,A^\dagger - \langle\phi|\,\big)\,|\chi\rangle$ also $\langle\psi|\,A^\dagger = \langle\phi|$.

- Beweis für: Die **Eigenwerte** eines selbstadjungierten Operators sind **reell**.

  Es gelte die Eigenwertgleichung

  $$A \left|\psi_n\right\rangle = \lambda_n \left|\psi_n\right\rangle .$$

  O.B.d.A. sei das Spektrum $\{\lambda_n\}$ diskret und die Eigenwerte seien nicht entartet. Damit gilt

  $$\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\lambda_n|\psi_n\rangle = \lambda_n \langle\psi_n|\psi_n\rangle$$

  und wegen $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = || \left|\psi\right\rangle ||^2 \geq 0$ gilt einerseits

  $$\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle^* = \lambda_n^* \langle\psi_n|\psi_n\rangle .$$

  Andererseits

  $$\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle^* = \langle\psi_n|A^\dagger|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|A|\psi_n\rangle = \lambda_n \langle\psi_n|\psi_n\rangle$$

  und damit folgt

  $$\lambda_n^* = \lambda_n.$$

- Beweis für: Die **Eigenvektoren** eines selbstadjungierten Operators sind **orthogonal**.

  Wir multiplizieren die Eigenwertgleichung

  $$A\,|\psi_n\rangle = \lambda_n\,|\psi_n\rangle$$

  von links mit dem zum Eigenzustand $|\psi_m\rangle$ assoziierten Bra $\langle\psi_m|$

  $$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle = \lambda_n\,\langle\psi_m|\psi_n\rangle\,.$$

  Damit gilt einerseits

  $$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle^* = \lambda_n\,\langle\psi_m|\psi_n\rangle^* = \lambda_n\,\langle\psi_n|\psi_m\rangle$$

  und andererseits

  $$\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle^* = \langle\psi_n|A^\dagger|\psi_m\rangle = \langle\psi_n|A|\psi_m\rangle = \lambda_m\,\langle\psi_n|\psi_m\rangle$$

  Also $(\lambda_n - \lambda_m)\,\langle\psi_n|\psi_m\rangle = 0$. Falls $\lambda_n \neq \lambda_m$ muss $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = 0$ gelten. Somit ist gilt für normierte Eigenzustände $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ die Orthogonalitätsrelation

  $$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}.$$

  Bemerkung: Falls die Eigenwerte λ_n entartet sind, können die Eigenzustände $\{|\psi_{n,\alpha}\rangle\}$ orthogonal gewählt werden, d.h. $\langle\psi_{n,\alpha}|\psi_{m,\beta}\rangle = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}$.

- Die **Eigenzustände** eines hermiteschen Operators **bilden eine vollständige Basis** im Hilberraum.

Es gelte $A\,|\psi_n\rangle = \lambda_n\,|\psi_n\rangle$ für einen Operator $A = A^\dagger$. Die Eigenzustände $\{|\psi_n\rangle\}$ bilden eine Basis, d.h. für alle Zustände $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ existiert eine Darstellung

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n\,|\psi_n\rangle$$

mit Amplituden $c_n \in \mathbb{C}$.

Multiplikation von links mit $\langle\psi_m|$ ergibt $\langle\psi_m|\Psi\rangle = \sum_n c_n\,\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n c_n\delta_{mn} = c_m$.

Also sind die Amplituden

$$c_n = \langle\psi_n|\Psi\rangle\,.$$

Damit folgt für beliebiges $|\Psi\rangle = \sum_n c_n\,|\psi_n\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\Psi\rangle = \left[\sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\right]|\Psi\rangle\,.$

Die Eigenzustände erfüllen die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| = \mathbb{1}$$

- Ein selbstadjungierter Operator besitzt eine **Spektraldarstellung**

$$A = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|$$

wobei $|\psi_n\rangle$ und λ_n die Eigenzustände und -werte von A sind, $A|\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle$.

Es gilt

$$\begin{aligned} A = \mathbb{1} A \mathbb{1} &= \left[\sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\right] A \left[\sum_m |\psi_m\rangle \langle\psi_m|\right] = \sum_{n,m} |\psi_n\rangle \langle\psi_n|A|\psi_m\rangle \langle\psi_m| \\ &= \sum_{n,m} |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\lambda_m|\psi_m\rangle \langle\psi_m| \\ &= \sum_{n,m} \lambda_m \delta_{nm} |\psi_n\rangle \langle\psi_m| = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n| \end{aligned}$$

- Die Funktion eines Operators $f(A)$ ist definiert als

$$f(A) = \sum_n f(\lambda) |\psi_n\rangle \langle\psi_n|$$

- **Kommutierende Operatoren** $[A, B] = 0$ besitzen einen **gemeinsamen Satz von Eigenvektoren**

$$A\,|a_n, b_m, \alpha\rangle = a_n\,|a_n, b_m, \alpha\rangle \qquad B\,|a_n, b_m, \alpha\rangle = b_m\,|a_n, b_m, \alpha\rangle$$

α ist ein Entartungsindex.

Beweis:

- Die Eigenwertgleichungen von A und B seien

$$A\,|a_{n\alpha}\rangle = a_n\,|a_{n\alpha}\rangle \qquad B\,|b_{m\beta}\rangle = b_m\,|b_{m\beta}\rangle$$

Die Eigenvektoren von B können in der Basis der Eigenvektoren von A aufgespannt werden mit Amplituden $c^{n\alpha}_{m\beta} = \langle b_{m\beta}|a_{n\alpha}\rangle$

$$|a_{n\alpha}\rangle = \sum_m \sum_\beta c^{n\alpha}_{m\beta}\,|b_{m\beta}\rangle = \sum_m |\psi_{nm\alpha}\rangle \qquad |\psi_{nm\alpha}\rangle := \sum_\beta c^{n\alpha}_{m\beta}\,|b_{m\beta}\rangle$$

Die $|\psi_{nm\alpha}\rangle$ sind (nicht-normierte) Eigenzustände von B

$$B\,|\psi_{nm\alpha}\rangle = b_m\,|\psi_{nm\alpha}\rangle\,.$$

- Es gilt

$$0 = (A - a_n)\,|a_{n\alpha}\rangle = \sum_m (A - a_n)\,|\psi_{nm\alpha}\rangle \tag{2}$$

- Wegen $[A,B]=0$ gilt für jeden Term in der Summe

$$B(A-a_n)\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle = (A-a_n)B\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle = b_m(A-a_n)\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle$$

  Also sind die Vektoren $(A-a_n)\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle$ wieder Eigenzustände von B zu Eigenwert b_m und daher linear unabhängig.

- Es muss daher jeder Term in der Summe in Gleichung (2) verschwinden, $(A-a_n)\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle = 0$, bzw

$$A\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle = a_n\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle$$

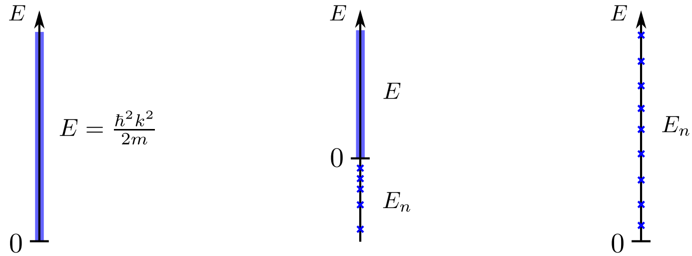
- Die normierten, gemeinsamen Eigenzustände von A und B zu Eigenwerten a_n und b_m sind daher

$$\left|a_n, b_m, \alpha\right\rangle := \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_{nm\alpha}|\psi_{nm\alpha}\rangle}}\left|\psi_{nm\alpha}\right\rangle$$

Bemerkung: Dies verallgemeinert sich für einen grösseren Satz $\{A,B,C,\ldots\}$ kommutierender Operatoren.

- Das **Spektrum** (die Menge der Eigenwerte) eines selbstadjungierten Operators hat im Allgemeinen einen diskreten und/oder kontinuierlichen Anteil.

  Beispiel: Spektrum des Hamiltonoperators $\hat{H}$



freies Teilchen | endlicher Potentialtopf | unendlich tiefer Potentialtopf

Die Eigenwertgleichung für einen selbstadjungierten Operator A lautet daher im Allgemeinen:

$$A\,|\psi_{n,\alpha}\rangle = \lambda_n\,|\psi_{n,\alpha}\rangle \qquad \text{diskret:} \quad \{\lambda_1,\,\lambda_2,\,\lambda_3,\ldots\}$$

$$A\,|\psi_{\lambda,\alpha}\rangle = \lambda\,|\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \qquad \text{kontinuierlich:} \quad \lambda \in [a,b]$$

α bezeichnet eine mögliche Entartung.

- Weiterhin gilt:
  - Die Eigenwerte sind reell, $\lambda_n, \lambda \in \mathbb{R}$
  - Die Eigenzustände sind orthogonal

$$\langle \psi_{m,\alpha} | \psi_{n,\beta} \rangle = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \qquad \langle \psi_{\lambda,\alpha} | \psi_{\lambda',\beta} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \delta_{\alpha\beta} \qquad \langle \psi_{n,\alpha} | \psi_{\lambda,\beta} \rangle = 0$$

    diskret: Kroneckerdelta
  - Die Eigenzustände bilden eine vollständige Basis in $\mathcal{H}$, d.h. für alle $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ gibt es eine Darstellung mit Amplituden $c_{n,\alpha} = \langle \psi_{n,\alpha} | \Psi \rangle$ und $c_{\lambda,\alpha} = \langle \psi_{\lambda,\alpha} | \Psi \rangle$.

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,\alpha} c_{n,\alpha} \, |\psi_{n,\alpha}\rangle + \sum_{\alpha} \int \mathrm{d}\lambda \, c_{\lambda,\alpha} \, |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle$$

  - Es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = \sum_{n,\alpha} |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + \sum_{\alpha} \int \mathrm{d}\lambda \, |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

  - Die Spektraldarstellung von A ist

$$A = \sum_{n,\alpha} \lambda_n \, |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + w \sum_{\alpha} \int \mathrm{d}\lambda \, \lambda \, |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

  - Eine Funktion von A ist

$$f(A) = \sum_{n,\alpha} f(\lambda_n) \, |\psi_{n,\alpha}\rangle \langle \psi_{n,\alpha}| + \sum_{\alpha} \int \mathrm{d}\lambda \, f(\lambda) \, |\psi_{\lambda,\alpha}\rangle \langle \psi_{\lambda,\alpha}|$$

2.3 Orts- und Impulsbasis

- Wir betrachten zwei (selbstadjungierte) Operatoren $\hat{x}, \hat{p}$ mit

  $$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$$

  Was sind die Eigenwerte und -vektoren von $\hat{x}, \hat{p}$?

- Wir definieren den **Verschiebungsoperator**

  $$S(\lambda) = e^{-i\lambda\hat{p}/\hbar} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^n}{n!} \hat{p}^n \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

  Eigenschaften:

  - $S(\lambda)$ ist **unitär**, d.h. $S(\lambda)S^\dagger(\lambda) = S^\dagger(\lambda)S(\lambda) = \mathbb{1}$

    Beweis: $S^\dagger(\lambda) = S(-\lambda)$ und $S(\lambda)S(-\lambda) = S(-\lambda)S(\lambda) = \mathbb{1}$

  - $[\hat{x}, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda)$

    Beweis: $[\hat{x}, S(\lambda)] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^n}{n!} [\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar \left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!} \hat{p}^{n-1} = \lambda S(\lambda)$

- Angenommen $\hat{x}$ hat einen Eigenvektor $|x\rangle$ mit einem Eigenwert $x \in \mathbb{R}$

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$$

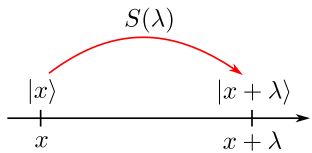
Dann ist auch $S(\lambda)\,|x\rangle$ ein Eigenvektor mit Eigenwert $(x+\lambda)$, d.h.

$$\hat{x}S(\lambda)\,|x\rangle = (x+\lambda)S(\lambda)\,|x\rangle$$

Beweis:

$$\hat{x}S(\lambda)\,|x\rangle = S(\lambda)(\hat{x}+\lambda)\,|x\rangle = S(\lambda)\big(\hat{x}\,|x\rangle + \lambda\,|x\rangle\big) = S(\lambda)(x+\lambda)\,|x\rangle = (x+\lambda)S(\lambda)\,|x\rangle$$

Daher der Name “Verschiebungsoperator” für $S(\lambda)$.



- Weil $\lambda \in \mathbb{R}$ können wir Vektoren mit beliebigen Eigenwerten in $\mathbb{R}$ konstruieren:

Das **Spektrum** von $\hat{x}$ ist kontinuierlich und umfasst ganz $\mathbb{R}$.

- Sei $|0\rangle$ der Eigenvektor zum Eigenwert 0

$$\hat{x}\,|0\rangle = 0$$

Ein allgemeiner **Eigenvektor** $|x\rangle$ **des Ortsoperators** mit Eigenwert x ist

$$|x\rangle = S(x)\,|0\rangle = e^{-ix\hat{p}/\hbar}\,|0\rangle \qquad \hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \qquad x \in \mathbb{R}$$

Eigenschaften der Eigenzustände $|x\rangle$ des Ortsoperators

- Orthogonalität

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

- Vollständigkeit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |x\rangle\,\langle x| = \mathbb{1}$$

- Basis, d.h. wir können alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ darstellen durch

$$|\psi\rangle = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ |x\rangle\,\langle x|\right]|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ |x\rangle\,\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ \langle x|\psi\rangle\,|x\rangle$$

- Das Skalarprodukt $\langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ stellt $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in der Basis der Eigenzustände $|x\rangle$ des Ortsoperators $\hat{x}$ dar.

  Das Skalarprodukt $\langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ ist die **Wellenfunktion in Ortsdarstellung** $\psi(x)$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \qquad\qquad |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi(x)\, |x\rangle$$

  [Bemerkung: Diese Relationen stellen den Zusammenhang zwischen der Diracnotation $|\psi\rangle$ und der Ortsdarstellung $\psi(x)$ aus Kapitel 1 her.]

- Wir können analog einen **Verschiebungsoperator im Impulsraum** definieren

$$T(\lambda) = e^{i\lambda\hat{x}/\hbar}$$

  Es gilt (wie vorher)

  - $T(\lambda)$ ist **unitär**, d.h. $T(\lambda)T^\dagger(\lambda) = T^\dagger(\lambda)T(\lambda) = \mathbb{1}$
  - $[\hat{p}, T(\lambda)] = \lambda T(\lambda)$

- Das **Spektrum des Impulsoperators** ist ganz $\mathbb{R}$ und die Eigenzustände sind orthogonal und vollständig

$$\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle \qquad p \in \mathbb{R}$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\ |p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$$

- Die Darstellung einer Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in der Basis der Impulseigenzustandes $|p\rangle$, d.h. die **Impulsdarstellung der Wellenfunktion** ist

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle \qquad\qquad |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\ \langle p|\psi\rangle\,|p\rangle$$

- Was ist die Darstellung des Impuleigenzustandes $|p\rangle$ in der Ortsbasis?

$$\langle x|p\rangle =: \psi_p(x)$$

Wir betrachten

$$\langle x'|S(-x)|p\rangle = \langle x'|S^\dagger(x)|p\rangle = \langle x'+x|p\rangle = \psi_p(x+x')$$

andererseits ist

$$\langle x'|S(-x)|p\rangle = \left\langle x' \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ix/\hbar)^n}{n!}\hat{p}^n \right| p \right\rangle = e^{ixp/\hbar}\langle x'|p\rangle = e^{ixp/\hbar}\psi_p(x')$$

wobei die Eigenwertgleichung $\hat{p}^n|p\rangle = p^n|p\rangle$ verwendet wurde. Für $x' = 0$ folgt $\psi_p(x) = e^{ixp/\hbar}\psi_p(0)$. Die Normierung entnehmen wir der Orthogonalitätsrelation

$$\langle p'|p\rangle = \langle p'|\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ |x\rangle\langle x|\right]|p\rangle = \int \mathrm{d}x\, \psi^*_{p'}(x)\psi_p(x) = 2\pi\hbar|\psi_p(0)|^2\delta(p-p') \stackrel{!}{=} \delta(p-p')$$

Die **Ortsdarstellung des Impulseigenzustandes** ist

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ixp/\hbar}$$

Der Impulseigenzustand $|p\rangle$ ist in Ortsdarstellung also eine ebene Welle e^{ikx} mit $k = p/\hbar$.

- Damit ist der Zusammenhang zur Orts- und Impulsdarstellung

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle = \langle p| \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \; |x\rangle \langle x| \right] \psi\rangle = \int \mathrm{d}x \; \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

Mit $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ixp/\hbar}$ und $\langle x|p\rangle = \psi(x)$ finden wir die bereits bekannte Relation

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, e^{-ixp/\hbar} \psi(x)$$

- Bemerkung: Alle Relationen folgen aus dem kanonischen Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Die folgenden Abschnitte sind Nachträge zur eindimensionalen Wellenmechanik (Kapitel 1) und Anwendungen des Dirac-Formalismus (Abschnitt 2.2).

Alle Ableitungen setzen nur den kanonischen Kommutator und dessen Konsequenzen aus Abschnitt 2.3 voraus.