* Wie wir bereits in Bsp. gesehen haben gibt es auch nicht normierbare Streuzustände, die physikalisch wichtig sind!

=> wir müßten diese eigentlich normierbar machen, z.B. durch ein endliches physikalisches Volumen, oder durch einen konvergenzerzeugenden Faktor $e^{ikx} \to e^{ikx - \varepsilon|x|}$

* Wir postulieren, daß $|\Psi\rangle$ und $\alpha|\Psi\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ konstant dieselbe physikalische Info enthalten, d.h. wir beschränken uns auf Zustände mit $\|\Psi\| = 1$.

(Observablen!)

- Physikalische Größen (Energie, Impuls, Ort, ...) werden durch lineare Abbildung $\hat{A}: V \to V$ dargestellt, diese heißen auch Operatoren $\hat{A}$ ($\mathbb{R}^3$: 3x3 Matrizen bilden $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ ab)

d.h. es gilt $\boxed{\hat{A}[\underbrace{\alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle}_{\in V}] = \alpha\hat{A}|\Psi_1\rangle + \beta\hat{A}|\Psi_2\rangle} \in V$

Im Folgenden werden wir oft versuchen, Eigenzustände $|a\rangle$ mit Eigenwert a zum Operator $\hat{A}$ zu finden: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$,

z.B. s. S. 14 $\boxed{\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle}$, mit $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})$ Hamiltonop.

mit Eigenwerten E, der Energie. Diese entsprechen den Meßwerten der phys. Größe (des Operators), diese sollte hier reel sein $E = E^*$ (wie später)

* Wie bereits gesehen (z.B. S. 12) gibt es verschiedene Darstellungen eines physikalischen Zustandes, z.B.

$\Psi(\vec{r})$ in Ortsdarstellung, oder seine Fourier trafo

$\Psi(\vec k)$ in Impulsdarstellung, $\vec p = \hbar \vec k$. Wie bilden wir dies ab in V?

- Ortsoperator $\hat X$ mit Eigenwert x $\quad \hat X|x\rangle = x|x\rangle$ (hier 1D)

$\Rightarrow$ Wellenfkt in Ortsdarst. $\quad \Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$

" " Impulsdarst. $\quad \Psi(k) = \langle k|\Psi\rangle$

oder allgemein in "a-Darst." $\quad \Psi(a) = \langle a|\Psi\rangle$

- Die Wahrscheinlichkeit, den physikalischen Zustand Ψ im Zustand a zu finden

$$\boxed{P_\Psi(a) = |\Psi(a)|^2 = |\langle a|\Psi\rangle|^2}$$

- Orthonormalbasis (ONB) ist gegeben durch $\{|n\rangle \mid n\in\mathbb{N}\}$ mit

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$$ im abzählbaren dim. Fall (diskreten)

Oftmals haben wir aber auch eine Basis $\{|\xi\rangle\}$ die von einer kont. Variablen abhängt (wie von x), dann gilt

$$\langle\xi|\xi'\rangle = \delta(\xi-\xi')$$ (z.B. für $|x\rangle$ Eigenbasis des Ortsoperators)

und jedes Element $|\Psi\rangle$ von V läßt sich in dieser eindeutig darstellen, z.B.

$$|\Psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} a_n|n\rangle,\ a_n = \langle n|\Psi\rangle \quad \text{bzw} \quad |\Psi\rangle = \int d\xi\, \Psi(\xi)|\xi\rangle,\ \Psi(\xi) = \langle\xi|\Psi\rangle$$

Oftmals spannen die Eigenvektoren eines Operators eine Basis auf.

- Vollständigkeitsrelation:

diskret: $$1 = \sum_a P_\Psi(a) = \sum_a \langle\Psi|a\rangle\langle a|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Big(\sum_a |a\rangle\langle a|\Big)|\Psi\rangle$$

$|a\rangle$ Basis, vollst. $\quad = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

Damit dies für alle normierten $|\Psi\rangle \in V$ gelten muß, erhalten wir folgende Operatoridentität $\quad \boxed{\sum_a |a\rangle\langle a| = \hat{\mathbb{1}}}$ Einheitsoperator mit $\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in V$

Bemerkung: In vielen Rechnungen werden wir diesen Op $\hat{\mathbb{1}}$ einschieben.

Genauso zeigt man kontinuierlich $\boxed{\int d\xi\, |\xi\rangle\langle\xi| = \hat{\mathbb{1}}}$

- Erwartungswerte: (z.B. mittlere Energie; Ort)

$$\langle \hat{A}\rangle = \sum_a a\, P_\psi(a) = \sum_a a\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle = \langle\psi|\Big(\sum_a |a\rangle a\langle a|\Big)|\psi\rangle$$

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad \text{im Zustand } |\psi\rangle$$

d.h. wir erhalten folgende Spektraldarstellung von $\boxed{\hat{A} = \sum_a |a\rangle a\langle a|}$

da dies $\forall |\psi\rangle \in V$ gelten muß.

(oder: $\hat{A} = \hat{A}\hat{\mathbb{1}} = \hat{A}\sum_a |a\rangle\langle a| = \sum_a \hat{A}|a\rangle\langle a| = \sum_a a|a\rangle^{*}\langle a|$)

- Für welche Art von Operatoren erhalten wir reelle Eigenwerte (= Meßwerte)?

Def: den zu $\hat{A}$ adjungierten (hermitesch konjugierten) Operator $\hat{A}^+$

durch $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$: $\langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle \equiv \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle$

Spektraldarstellung von $\hat{A}^+$:

$$\boxed{\hat{A}^+} = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}^+\hat{\mathbb{1}} = \sum_{a,a'} |a'\rangle\langle a'|\underbrace{\hat{A}^+|a\rangle}_{|\hat{A}^+ a\rangle}\langle a| = \sum_{a,a'} |a'\rangle\langle\hat{A}a|a'\rangle^{*}\langle a|$$

$$= \sum_{a,a'} |a'\rangle\big(\underbrace{\langle a|\hat{A}a'\rangle}_{= a'\langle a|a'\rangle = a'\delta_{a,a'}}\big)^{*}\langle a| = \boxed{\sum_a |a\rangle a^{*}\langle a|}$$

wenn $|a\rangle$ ONB bilden

d.h. wenn $\boxed{\hat{A}^+ = \hat{A}} \Rightarrow a^{*} = a \quad \forall a$ (Eigenwerte). Solche Operatoren heißen

selbstadjungiert (hermitesch) und haben automatisch ein reelles Spektrum. Wir erwarten also $\hat{H} = \hat{H}^+$.

(es gilt nicht $a^{*} = a\ \forall a \Rightarrow \hat{A}^+ = \hat{A}$, es gibt nicht-hermitesche Op mit reellen Eigenwerten!)

• die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators, die verschiedene Eigenwerte haben, sind orthogonal

denn sei $\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$, $\hat{A}|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$, $a_1 \neq a_2$, $a_1 a_2 \in \mathbb{R}$ da $\hat{A} = \hat{A}^+$

$$\Rightarrow \underline{\langle\psi_2|\hat{A}\psi_1\rangle} = \langle\psi_2|a_1\psi_1\rangle = a_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle^* = \langle\psi_1|a_2\psi_2\rangle^* = a_2^*\langle\psi_1|\psi_2\rangle^* = a_2\langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

$$= \langle\underset{\overset{\shortparallel}{\hat{A}}}{\hat{A}^+}\psi_1|\psi_2\rangle^* = \underline{\langle\psi_2|\hat{A}\psi_1\rangle}$$ bilde Differenz

$$\Rightarrow 0 = a_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle - a_2\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \underbrace{(a_1 - a_2)}_{\neq 0}\langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$$ sind orthogonal.

Basiswechsel

wie in der Linearen Algebra in endlich dim Vektorräumen können wir zwischen zwei ONB wechseln

Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ gegeben mit $\langle a|a'\rangle = \delta_{a,a'}$, $\langle b|b'\rangle = \delta_{b,b'}$

und $\hat{\mathbb{1}} = \sum_b |b\rangle\langle b|$ sowie $\hat{\mathbb{1}} = \sum_a |a\rangle\langle a|$

- Wechsel von Basis von $\hat{A}$ zu $\hat{B}$: $\psi(a) = \langle a|\psi\rangle = \langle a|\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \langle a|\sum_b |b\rangle\langle b|\psi\rangle$
(für Vektoren $|\psi\rangle \in V$) $\quad = \sum_b \langle a|b\rangle\, \psi(b)$

Übergangsamplitude

sowie von $\hat{B}$ nach $\hat{A}$: $\psi(b) = \langle b|\psi\rangle = \ldots = \sum_a \underbrace{\langle b|a\rangle}_{=\langle a|b\rangle^*} \psi(a)$

- Basiswechsel für Operatoren: $\hat{A}$ in Basis $|b\rangle$:

$$\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}} = \sum_{b,b'} |b\rangle \underbrace{\langle b|\hat{A}|b'\rangle}_{\equiv A_{bb'}} \langle b'| = \sum_{b,b'} |b\rangle A_{bb'} \langle b'|$$

wobei $A_{bb'}$ die Matrixelemente von $\hat{A}$ in der Basis $|b\rangle$ sind (dies sind nun komplexe Zahlen, keine Operatoren mehr!)

- Wie wir im Kastenpotential gesehen haben gibt es auch physikalische Probleme, wo wir sowohl diskrete Energieeigenwerte haben mit $-V_0 < E < 0$ als auch kontinuierliche mit $E > 0$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation $\boxed{\hat{\mathbb{1}} = \sum_n |E_n\rangle\langle E_n| + \int_0^\infty dE\, |E\rangle\langle E|}$

hier nicht normierbar

d.h. $\langle E_n|E_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$

$\langle E|E'\rangle = \delta(E-E')$, $\quad \langle E_n|E\rangle = 0$

mit Spektraldarstellung $\hat{H} = \sum_n |E_n\rangle E_n \langle E_n| + \int_0^\infty dE\, |E\rangle E \langle E|$