7 Diracs Bracket-Notation

7.1 Entwicklungen nach Eigenfunktionen

7.1.1 Oszillator-Eigenfunktionen

Die Oszillator-Eigenfunktionen $\Phi_n(x)$,

$$\Phi_n(x) = \mathcal{N}_n \, H_n\Big(\frac{x}{a}\Big) \, e^{-x^2/2a^2}, \qquad \mathcal{N}_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} a}} \qquad (n = 0, 1, 2, ...), \tag{232}$$

bilden ein VONS <u>im</u> Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ aller quadrat-integrablen Wellenfunktionen $\psi(x)$. Es gibt also zu jedem $\psi \in \mathcal{H}$ eine eindeutig bestimmte Folge $\{\psi_n\}_{n \in \mathsf{N}_0}$ von Koeffizienten $\psi_n \in \mathsf{C}$, sodaß gilt

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n \, \Phi_n(x). \tag{233}$$

Zu gegebenem $\psi(x)$ findet man die ψ_n mit der Formel

$$\psi_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \Phi_n^*(x) \, \psi(x). \tag{234}$$

7.1.2 Impuls-Eigenfunktionen

Die Impuls-Eigenfunktionen $\Phi_k(x)$,

$$\Phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{\mathrm{i}kx} \qquad (k \in \mathsf{R}), \tag{235}$$

sind <u>nicht</u> quadrat-integrabel. Sie bilden dennoch ein VONS, allerdings nicht <u>in</u>, sondern <u>für</u> $\mathcal{H}$: Zu jedem $\psi \in \mathcal{H}$ gibt es eine eindeutig bestimmte Funktion $\{\widetilde{\psi}(k)\}_{k \in \mathsf{R}}$ mit

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \widetilde{\psi}(k) \, \Phi_k(x) \;\equiv\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \widetilde{\psi}(k) \, e^{\mathrm{i}kx}. \tag{236}$$

Zu gegebenem $\psi(x)$ findet man $\widetilde{\psi}(k)$ mit der Formel (Fourier-Transformation !)

$$\widetilde{\psi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \Phi_k^*(x) \, \psi(x) \;\equiv\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{-\mathrm{i}kx} \, \psi(x). \tag{237}$$

7.2 Darstellungen

Die Zahlenfolge $\{\psi_n\}_{n\in\mathsf{N}_0}$ und die Funktion $\widetilde{\psi}(k)$ enthalten dieselbe Information wie die Wellenfunktion $\psi(x)$ selbst. Es handelt sich lediglich um drei verschiedene *Darstellungen* ein- und desselben Quantenzustands, den wir mit dem Symbol $|\psi\rangle$ bezeichnen.

Die Folge $\{\psi_n\}_{n\in\mathsf{N}_0}$ und die Funktion $\widetilde{\psi}(k)$ heißen *Oszillator-* bzw. *Impuls-Darstellung* von $|\psi\rangle$. Wir zeigen jetzt, daß entsprechend $\psi(x)$ selbst die *Orts-Darstellung* von $|\psi\rangle$ ist.

Die Orts-Eigenfunktion $\Phi_z(x)$ zum Eigenwert z ist die Delta-Funktion

$$\Phi_z(x) = \delta(x-z) \qquad (z \in \mathsf{R}). \tag{238}$$

Tatsächlich gilt mit dem Orts-Operator $\hat{x} \equiv x$:

$$\hat{x}\,\Phi_z(x) \equiv x\,\delta(x-z) = z\,\delta(x-z). \tag{239}$$

Wie die Impuls-Eigenfunktionen $\Phi_k(x)$ sind auch die Funktionen $\Phi_z(x) = \delta(x-z)$ <u>nicht</u> quadrat-integrabel. In Analogie zu Gl. (236) gilt nun trivialerweise für beliebige $|\psi\rangle$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dz\,\psi(z)\;\Phi_z(x). \tag{240}$$

Die Orts-Darstellung von $|\psi\rangle$ ist also die Funktion $\psi(z)$ selbst !

Die verschiedenen Darstellungen sind völlig gleichwertig. So gilt etwa

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk\,|\widetilde{\psi}(k)|^2 = 1. \tag{241}$$

Die Menge aller quadrat-integrablen Funktionen $\widetilde{\psi}(k)$, sowie die Menge aller quadrat-summierbaren Folgen $\{\psi_n\}$ bilden je einen Hilbert-Raum. Diese Räume sind zum Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ der quadrat-integrablen Wellenfunktionen $\psi(x)$ isomorph.

Ab jetzt verstehen wir unter dem Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ die Menge der ("darstellungs-freien") Kets $|\psi\rangle$. Um das Skalarprodukt $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ zweier Kets $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ zu berechnen, muß man allerdings in eine (beliebige) spezielle Darstellung gehen,

$$\Big(|\psi\rangle, |\phi\rangle\Big) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x)\,\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*\,\phi_n = \int_{-\infty}^{\infty} dk\,\widetilde{\psi}^*(k)\,\widetilde{\phi}(k). \tag{242}$$

Nun können wir die Gleichungen (233), (236) und (240) schreiben in der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n|\Phi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk\,\widetilde{\psi}(k)|\Phi_k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi(z)|\Phi_z\rangle, \tag{243}$$

mit den Kets $|\Phi_n\rangle$, $|\Phi_k\rangle$ bzw. $|\Phi_z\rangle$ der entsprechenden Eigenzustände.

Beachte: Anders als $|\Phi_n\rangle \in \mathcal{H}$ gehören die Kets $|\Phi_k\rangle$ bzw. $|\Phi_z\rangle$ strenggenommen nicht zum Hilbert-Raum $\mathcal{H}$. Sie sind uneigentlich.

Die Formeln (234) und (237) lauten nun

$$\psi_n = \Big(|\Phi_n\rangle, |\psi\rangle\Big), \qquad \widetilde{\psi}(k) = \Big(|\Phi_k\rangle, |\psi\rangle\Big), \tag{244}$$

und in Gl. (240) ist

$$\psi(z) = \Big(|\Phi_z\rangle, |\psi\rangle\Big). \tag{245}$$

7.3 Linearformen

In Bezug auf den Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ unterscheiden wir drei Typen von Objekten:

- <u>Vektoren $|\psi\rangle$</u> $\in \mathcal{H}$ (die Elemente von $\mathcal{H}$, auch “Kets” genannt),
- <u>Operatoren $\hat{A}$</u> $: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ (lineare Selbst-Abbildungen von $\mathcal{H}$),
- <u>Linearformen $\langle\psi|$</u> $: \mathcal{H} \to \mathsf{C}$ (lineare Abbildungen von $\mathcal{H}$ nach C, auch “Bras” genannt).

Operatoren $\hat{A}$ und Linearformen $\langle\psi|$ können, jeweils *links vor* einen Vektor $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ geschrieben, auf diesen “wirken”. Dabei ergibt sich im ersten Fall ein neuer Vektor $|\phi'\rangle$,

$$\hat{A}|\phi\rangle = |\phi'\rangle \in \mathcal{H}, \tag{246}$$

im zweiten Fall dagegen eine komplexe Zahl z,

$$\langle\psi||\phi\rangle \equiv \langle\psi|\phi\rangle = z \in \mathsf{C}. \tag{247}$$

In beiden Fällen handelt es sich jeweils um eine lineare Operation: Für beliebige $\lambda, \mu \in \mathsf{C}$ und $|\phi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\hat{A}\Big(\lambda|\phi\rangle + \mu|\chi\rangle\Big) = \lambda\hat{A}|\phi\rangle + \mu\hat{A}|\chi\rangle, \qquad \langle\psi|\Big(\lambda|\phi\rangle + \mu|\chi\rangle\Big) = \lambda\langle\psi|\phi\rangle + \mu\langle\psi|\chi\rangle. \tag{248}$$

Die Menge aller Linearformen $\langle\psi|$ bildet einen zu $\mathcal{H}$ isomorphen Hilbert-Raum $\mathcal{H}^*$, den sog. *Dualraum* von $\mathcal{H}$. Wie die Schreibweise andeutet, gehört zu jedem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ umkehrbar eindeutig eine Linearform $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$:

Def.: Die zum Ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gehörende Linearform $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ wird definiert durch

$$\langle\psi| : \mathcal{H} \to \mathsf{C}, \quad |\phi\rangle \mapsto \langle\psi|\phi\rangle := \Big(|\psi\rangle, |\phi\rangle\Big). \tag{249}$$

Der Vektor $|\psi\rangle$ und die zugehörige Linearform $\langle\psi|$ heißen zueinander adjungiert; man schreibt dies als

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger \qquad \Leftrightarrow \qquad |\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger. \tag{250}$$

Dadurch werden tatsächlich alle denkbaren Linearformen $\mathcal{H} \to \mathsf{C}$ erfaßt: Jede Linearform $\mathcal{H} \to \mathsf{C}$ ist das adjungierte eines (eindeutig) bestimmten Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Ferner stellt das Symbol "$\langle\psi|\phi\rangle$" eine bequemere Notation für das Skalarprodukt $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ dar.

Beachte: Die zum Vektor $|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle$ (mit $\lambda \in \mathsf{C}$) adjungierte Linearform $\langle\psi'|$ ist nicht etwa $\lambda\langle\psi|$, sondern vielmehr

$$\langle\psi'| \equiv \Big(\lambda|\psi\rangle\Big)^\dagger = \lambda^*\langle\psi|. \tag{251}$$

Begründung: Läßt man nämlich $\langle\psi'|$ auf einen beliebigen Vektor $|\phi\rangle$ wirken, so folgt wegen der Semilinearität des Skalarprodukts

$$\langle\psi'|\phi\rangle = \Big(|\psi'\rangle, |\phi\rangle\Big) = \Big(\lambda|\psi\rangle, |\phi\rangle\Big) = \lambda^*\Big(|\psi\rangle, |\phi\rangle\Big) = \lambda^*\langle\psi|\phi\rangle. \tag{252}$$

Während die Ortsdarstellung des Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ die Wellenfunktion $\psi(x)$ ist, so ist die Ortsdarstellung der Linearform $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ gegeben durch die Abbildungsvorschrift

$$z = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \cdot\ \ldots\ , \tag{253}$$

wobei für "..." die Ortsdarstellung $\phi(x)$ des Vektors $|\phi\rangle$ einzusetzen ist, auf den die Linearform $\langle\psi|$ wirken soll.

Als Beispiel betrachten wir das Ket $|\psi\rangle$ mit der Ortsdarstellung

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a^3\sqrt{\pi}}}\, x\, e^{-x^2/2a^2}. \tag{254}$$

Die zugehörige Linearformen $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ ordnet einem beliebigen Ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, das die Ortsdarstellung $\phi(x)$ hat, folgende komplexe Zahl zu,

$$z = \langle\psi|\phi\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \phi(x) = \sqrt{\frac{2}{a^3\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, e^{-x^2/2a^2}\, \phi(x). \tag{255}$$

7.4 Verknüpfungen linearer Operationen

Man kann einen Operator $\hat{A}$ auf einen Vektor $|\psi\rangle$ anwenden, und erhält einen neuen Vektor $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$. Die vertauschte Verknüpfung "$|\psi\rangle\hat{A}$" ist hingegen nicht erklärt. Alle nicht-trivialen Möglichkeiten, zwei lineare Operationen zu verknüpfen, sind in folgender Tabelle zusammengefaßt. Dabei stehen die Buchstaben L, O, V, Z für "Linearform", "Operator", "Vektor", bzw. "Zahl".

	Verknüpfung	Resultat	Beispiel(e)
1.	$O \cdot V$	V	$\hat{A}\|\psi\rangle = \|\psi'\rangle$
2.	$O \cdot O$	O	$\hat{A}\hat{B} = \hat{C}, \qquad \hat{B}\hat{A} = \hat{D}$
3.	$L \cdot V$	Z	$\langle\psi\|\chi\rangle = z, \qquad \langle\chi\|\psi\rangle = z^*$
4.	$L \cdot O$	L	$\langle\psi\|\hat{A} = \langle\psi'\|$
5.	$V \cdot L$	O	$\|\chi\rangle\langle\psi\| = \hat{A}$

7.4.1 Die Linearform $\langle\psi|\hat{A}$

Die Linearform $\langle\psi'| := \langle\psi|\hat{A}$ ist definiert durch

$$\langle\psi'|\phi\rangle \equiv \left(\langle\psi|\hat{A}\right)|\phi\rangle := \langle\psi|\left(\hat{A}|\phi\rangle\right). \tag{256}$$

Faßt man die RS als Verknüpfung *dreier* Operationen auf, so gilt also das *Assoziativgesetz*,

$$\left(\langle\psi|\hat{A}\right)|\phi\rangle = \langle\psi|\left(\hat{A}|\phi\rangle\right) =: \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle. \tag{257}$$

Def.: Der zu $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *adjungierte* Operator $\hat{A}^\dagger : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ wird definiert durch

$$\hat{A}^\dagger|\psi\rangle := \left(\langle\psi|\hat{A}\right)^\dagger. \tag{258}$$

$\hat{A}$ heißt *hermitesch*, wenn gilt $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. ■

Der zur Linearform $\langle\psi'| := \langle\psi|\hat{A}$ adjungierte Vektor $|\psi'\rangle$ ist also gegeben durch

$$|\psi'\rangle := \langle\psi'|^\dagger \equiv \left(\langle\psi|\hat{A}\right)^\dagger = \hat{A}^\dagger|\psi\rangle. \tag{259}$$

Dies ist ein Spezialfall der "Regel von Jacke und Mantel":
Ist die Verknüpfung XY erklärt, so auch $Y^\dagger X^\dagger$, und es gilt:

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger. \tag{260}$$

In Abschnitt 7.5 werden wir sehen wie man den Operator $\hat{A}^\dagger$ zu gegebenem $\hat{A}$ "berechnet". Einen hermiteschen Operator $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, mit $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ und $\hat{A}|\phi\rangle = |\phi'\rangle$, kann man im Matrixelement $\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$ nach links oder nach rechts wirken lassen,

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\psi|\Big(\hat{A}|\phi\rangle\Big) \equiv \langle\psi|\phi'\rangle = \Big(\langle\psi|\hat{A}\Big)|\phi\rangle \equiv \langle\psi'|\phi\rangle. \tag{261}$$

Ist hingegen $\hat{A}$ nicht hermitesch, $\hat{A}^\dagger \neq \hat{A}$, mit $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = |\psi''\rangle \neq |\psi'\rangle$, so gilt

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\psi|\phi'\rangle = \langle\psi''|\phi\rangle \neq \langle\psi'|\phi\rangle. \tag{262}$$

Während hier nach wie vor $\hat{A}$ nach rechts wirkt, wirkt jetzt aber nach links $\hat{A}^\dagger$!

7.4.2 Der Operator $|\chi\rangle\langle\psi|$

Der Operator $\hat{A} = |\chi\rangle\langle\psi|$ ist definiert durch

$$\hat{A}|\phi\rangle \equiv \Big(|\chi\rangle\langle\psi|\Big)\,|\phi\rangle := |\chi\rangle\Big(\langle\psi|\phi\rangle\Big) = |\chi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \underbrace{\langle\psi|\phi\rangle}_{\in\mathbb{C}}|\chi\rangle. \tag{263}$$

Auch hier gilt also wieder das Assoziativgesetz: Die Klammern sind überflüssig.

Mit $\hat{A} = |\chi\rangle\langle\psi|$ gilt $\hat{A}^\dagger = |\psi\rangle\langle\chi|$ (Jacke-Mantel!), denn für beliebiges $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \Big(\langle\phi|\hat{A}\Big)^\dagger = \Big(\underbrace{\langle\phi|\chi\rangle}_{\in\mathbb{C}}\langle\psi|\Big)^\dagger = \langle\phi|\chi\rangle^*|\psi\rangle = \langle\chi|\phi\rangle|\psi\rangle = \underbrace{|\psi\rangle\langle\chi|}_{=\hat{A}^\dagger}\phi\rangle. \tag{264}$$

Def.: Sei $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ein normierter Vektor, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Dann heißt der Operator

$$\hat{P} := |\psi\rangle\langle\psi| \equiv \hat{P}^\dagger \tag{265}$$

der Projektiosoperator (kurz: Projektor) auf den Zustand $|\psi\rangle$.

Bem.: Es gibt sicher ein VONS $\{|\Phi_n\rangle\}_{n=1,2,...}$ mit $|\Phi_1\rangle = |\psi\rangle$. Dann folgt für ein beliebiges $|\chi\rangle = \sum_{n=0}^\infty \chi_n|\Phi_n\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\hat{P}|\chi\rangle = \sum_{n=0}^\infty \chi_n|\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\Phi_n\rangle}_{=\delta_{n,1}} = \chi_1|\Phi_1\rangle \equiv \chi_1|\psi\rangle. \tag{266}$$

$\hat{P}|\chi\rangle$ ist also genau die Komponente von $|\chi\rangle$ in "Richtung" von $|\psi\rangle$.

Mit dem VONS der Oszillator-Eigenzustände $|\mathit{\Phi}_n\rangle$ und den zugehörigen Linearformen $\langle\mathit{\Phi}_n|$ definieren wir als weiteres Beispiel den Operator

$$\hat{E} := \sum_{n=0}^{\infty} |\mathit{\Phi}_n\rangle\langle\mathit{\Phi}_n|. \tag{267}$$

Seine Wirkung auf einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m|\mathit{\Phi}_m\rangle$,

$$\hat{E}|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m \hat{E}|\mathit{\Phi}_m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m \sum_{n=0}^{\infty} |\mathit{\Phi}_n\rangle \underbrace{\langle\mathit{\Phi}_n|\mathit{\Phi}_m\rangle}_{=\delta_{nm}} = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m|\mathit{\Phi}_m\rangle = |\psi\rangle, \tag{268}$$

entlarvt ihn als den Einheits-Operator, $\hat{E} = \hat{1}$.

7.5 Matrixdarstellung von Operatoren

Läßt man statt $\hat{E}$ die Linearform $\langle\mathit{\Phi}_n|$ auf den Vektor $|\psi\rangle$ wirken, so erhält man die Zahl

$$\langle\mathit{\Phi}_n|\psi\rangle = \langle\mathit{\Phi}_n| \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m|\mathit{\Phi}_m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m \underbrace{\langle\mathit{\Phi}_n|\mathit{\Phi}_m\rangle}_{=\delta_{nm}} = \psi_n, \tag{269}$$

also gerade den n-ten Entwicklungskoeffizienten der Oszillator-Darstellung von $|\psi\rangle$. Schiebt man also in die Gleichung $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ die Eins aus Gl. (267) ein,

$$|\psi'\rangle = \hat{A}\hat{E}|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{A}|\mathit{\Phi}_n\rangle\langle\mathit{\Phi}_n|\psi\rangle, \tag{270}$$

und "multipliziert" beide Seiten von links mit der Linearform $\langle\mathit{\Phi}_m|$, so hat man

$$\langle\mathit{\Phi}_m|\psi'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\mathit{\Phi}_m|\hat{A}|\mathit{\Phi}_n\rangle\langle\mathit{\Phi}_n|\psi\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \psi'_m = \sum_{n=0}^{\infty} A_{mn}\psi_n. \tag{271}$$

Fassen wir also die Zahlen $A_{mn} := \langle\mathit{\Phi}_m|\hat{A}|\mathit{\Phi}_n\rangle$ $(m, n = 1, 2, 3, ...)$ als Elemente einer $(\infty \times \infty)$-Matrix $\underline{\underline{A}}$ und die Koeffizienten ψ'_m und ψ_n als Komponenten zweier unendlicher Spaltenvektoren $\underline{\psi}$ bzw. $\underline{\psi}'$ auf,

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} & A_{02} & \dots \\ A_{10} & A_{11} & A_{12} & \\ A_{20} & A_{21} & A_{22} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \underline{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \underline{\psi}' = \begin{pmatrix} \psi'_0 \\ \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{272}$$

so wird aus der Gleichung $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ die Matrix-Gleichung

$$\underline{\psi}' = \underline{\underline{A}} \circ \underline{\psi}. \tag{273}$$

So wie die Spalten $\underline{\psi}$ bzw. $\underline{\psi}'$ die Oszillator-Darstellungen der Vektoren $|\psi\rangle$ bzw. $|\psi'\rangle$ sind, heißt die Matrix $\underline{\underline{A}}$ die Oszillator-Darstellung des Operators $\hat{A}$.

Bsp. 1: Wie es auch sein muß, hat der Einheitsoperator $\hat{E}$ die Matrixelemente

$$E_{mn} := \langle \Phi_m|\hat{E}|\Phi_n\rangle = \langle \Phi_m|\Phi_n\rangle = \delta_{mn}. \tag{274}$$

Er wird also durch die $\infty \times \infty$-Einheitsmatrix $\underline{\underline{E}}$ dargestellt,

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{275}$$

Bsp. 2: Für den Hamiltonian $\hat{H}$ des Oszillators selbst ergibt sich in seiner eigenen Darstellung die Diagonalmatrix $\underline{\underline{H}}$ mit den Eigenwerten

$$H_{mn} := \langle \Phi_m|\hat{H}|\Phi_n\rangle = E_n\delta_{mn}, \qquad \Rightarrow \qquad \underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E_1 & 0 & \\ 0 & 0 & E_2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{276}$$

Bsp. 3: Die Oszillator-Darstellung $\underline{\underline{X}}$ des Ortsoperators $\hat{x}$ findet man mit den Leiter-operatoren,

$$\hat{a} := \alpha\hat{x} - \mathrm{i}\beta\hat{p}, \qquad \hat{a}^\dagger := \alpha\hat{x} + \mathrm{i}\beta\hat{p} \qquad \Big(\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}, \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\Big). \tag{277}$$

Mit $\hat{x} = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/2\alpha$ ergeben sich die Matrixelemente

$$\begin{aligned} X_{mn} := \langle \Phi_m|\hat{X}|\Phi_n\rangle &= \frac{1}{2\alpha}\Big[\langle \Phi_m|\hat{a}|\Phi_n\rangle + \langle \Phi_m|\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle\Big] \\ &= \frac{1}{2\alpha}\Big[\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\Big], \\ &\Rightarrow \underline{\underline{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{278}$$

Als Beispiel berechnen wir

$$\underline{\underline{X}} \circ \underline{\Phi}_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \sqrt{2} \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{279}$$

Tatsächlich gilt mit $\ell := \sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \Big[\Phi_0(x) + \sqrt{2}\,\Phi_2(x)\Big] &\equiv \frac{\ell}{\sqrt{2}} \Big[\frac{1}{\sqrt{\ell\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2\ell^2} + \sqrt{2}\,\frac{4x^2/\ell^2 - 2}{\sqrt{8\ell\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2\ell^2}\Big] \\ &= \frac{\ell}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\ell\sqrt{\pi}}} \Big[1 + 2\,\frac{x^2}{\ell^2} - 1\Big] e^{-x^2/2\ell^2} \\ &= x\,\frac{2x/\ell}{\sqrt{2\ell\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2\ell^2} \\ &= x\,\Phi_1(x). \end{aligned} \tag{280}$$

Übung: Man berechne auf dieselbe Weise die Matrix $\underline{\underline{P}}$ des Impulsoperators $\hat{p}$ und verifiziere die Kommutator-Relation $\underline{\underline{X}} \circ \underline{\underline{P}} - \underline{\underline{P}} \circ \underline{\underline{X}} = \mathrm{i}\hbar \underline{\underline{E}}$.

• Wie sieht die Matrix $\underline{\underline{A}}^\dagger$ des adjungierten Operators $\hat{A}^\dagger$ aus,

$$A^\dagger_{mn} := \langle \Phi_m | \hat{A}^\dagger | \Phi_n \rangle = \Big(\hat{A}|\Phi_m\rangle, |\Phi_n\rangle\Big) = \quad ? \tag{281}$$

Es handelt sich jedenfalls um das Skalarprodukt des Kets $\hat{A}|\Phi_m\rangle$ mit dem Ket $|\Phi_n\rangle$,

$$A^\dagger_{mn} = \Big(\hat{A}|\Phi_m\rangle, |\Phi_n\rangle\Big) = \Big(|\Phi_n\rangle, \hat{A}|\Phi_m\rangle\Big)^* = \langle \Phi_n|\hat{A}|\Phi_m\rangle^* = A^*_{nm}. \tag{282}$$

Es ist also $\underline{\underline{A}}^\dagger$ das Komplex-konjugierte der Transponierten $\underline{\underline{A}}^T$ von $\underline{\underline{A}}$,

$$A^\dagger_{mn} = A^*_{nm} \qquad \Leftrightarrow \qquad \underline{\underline{A}}^\dagger = \Big(\underline{\underline{A}}^T\Big)^*. \tag{283}$$

• Wie sieht entsprechend die Oszillator-Darstellung der zum Vektor $|\psi\rangle$ adjungierten Linearform $\langle\psi|$ aus ? Um dies herauszufinden, schieben wir in die Gleichung $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}$ rechts die Eins $\hat{E}$ ein und multiplizieren beide Seiten von rechts mit $|\Phi_m\rangle$,

$$\langle\psi'|\Phi_m\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{A}|\Phi_m\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \psi'^*_m = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^*_n\, A_{nm}. \tag{284}$$

$\langle\psi|$ wird also dargestellt als *Zeilenvektor* $\underline{\psi}^\dagger$ mit den Elementen ψ_n^*,

$$\underline{\psi}^\dagger = (\psi_0^*, \psi_1^*, \psi_2^*, \ldots) \equiv \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}^\dagger . \tag{285}$$

7.6 Kontinuierliche Matrizen

Notation: Für die Impuls-, Oszillator- bzw. Orts-Eigenzustände schreiben wir kurz

$$|\Phi_k\rangle =: |k\rangle, \qquad |\Phi_n\rangle =: |n\rangle, \qquad |\Phi_z\rangle =: |z\rangle. \tag{286}$$

Um Verwechslung auszuschließen, vereinbaren wir, daß für die Impulsvariable “Wellenzahl” nur die Buchstaben k oder q und für die Ortsvariable nur die Buchstaben x, y oder z verwendet werden sollen. Die Buchstaben n, m und ℓ sind dagegen für den diskreten Index der Oszillator-Eigenzustände reserviert.

In dieser Kurznotation liest sich Gl. (243) als

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, \widetilde{\psi}(k')|k'\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m |m\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz\, \psi(z)|z\rangle. \tag{287}$$

Während die Zustände $\{|n\rangle\}_{n=0,1,\ldots}$ ein VONS in $\mathcal{H}$ bilden,

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \tag{288}$$

sind die Kontinuum-Eigenzustände $|k\rangle$ bzw. $|x\rangle$ nicht normierbar, $|k\rangle, |x\rangle \notin \mathcal{H}$. Sie sind stattdessen auf die δ-Funktion “normiert”,

$$\langle k|k'\rangle = \delta(k-k'), \qquad \langle x|z\rangle = \delta(x-z). \tag{289}$$

Damit erhalten wir aus Gl. (287)

$$\begin{aligned}
\langle k|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, \widetilde{\psi}(k')\, \underbrace{\langle k|k'\rangle}_{=\delta(k-k')} = \widetilde{\psi}(k), \\
\langle n|\psi\rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{nm}} = \psi_n, \\
\langle x|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dz\, \psi(z)\, \underbrace{\langle x|z\rangle}_{=\delta(x-z)} = \psi(x).
\end{aligned} \tag{290}$$

Um also etwa die Ortsdarstellung $\psi(x)$ eines beliebigen Zustandsvektors $|\psi\rangle$ zu gewinnen, braucht man lediglich die zum Orts-Eigenzustand $|x\rangle$ adjungierte Linearform $\langle x|$ auf $|\psi\rangle$ wirken zu lassen,

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{291}$$

Dabei ist x, je nach Sichtweise, ein bestimmter Ortswert oder, letztendlich, die Variable der Wellenfunktion. Entsprechendes gilt für die Impulsdarstellung $\widetilde{\psi}(k)$ und die Oszillatordarstellung $\{\psi_n\}$.

Neben Gl. (267) erhalten wir jetzt auch kontinuierliche Formen der Eins,

$$\hat{E} = \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m| = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, |k\rangle\langle k| = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x|. \tag{292}$$

Tatsächlich gilt für beliebiges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ etwa

$$\hat{E}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{=\psi(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)|x\rangle = |\psi\rangle. \tag{293}$$