Die Wellenfunktionen $\psi(\vec{x},t)$ und $\tilde{\psi}(\vec{k},t)$ gehen durch Fourier-Transformation auseinander hervor:

$$\tilde{\psi}(\vec{k},t) = \int \frac{d^3\cancel{x}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\vec{x},t)\, e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

Dabei ist $|\hat{\psi}(k)|^2$ die Wahrscheinlichkeit für die Messung des Impulses $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, bzw. der Wellenzahl k:

$$|\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2 = |\hat{\psi}(k)|^2 e^{-i\omega t} e^{i\omega t} = |\hat{\psi}(k)|^2$$

↷ Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum

Daher kann man den Erwartungswert des Impulses schreiben als

$$\langle\vec{p}\rangle_t = \int d^3k\, |\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2\, \hbar\vec{k}$$

$$= \int d^3k\, \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hbar\vec{k}\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

Wir wollen nun zeigen, dass dies konsistent mit dem Ausdruck

$$\langle\vec{p}\rangle_t = \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t) \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$

ist (d.h. der Differentialoperator wirkt nur auf $\psi(\vec{x},t)$). Betrachte dazu t = fest gewählt

Hierzu benutzen wir die Parseval'sche Gleichung

$$\int d^3x\, f^*(\vec{x})\, g(\vec{x}) = \int d^3k\, \tilde{f}^*(\vec{k})\, \tilde{g}(\vec{k})$$

Wähle $\tilde{f}(\vec{k}) = \tilde{\psi}(\vec{k})$, $\tilde{g}(\vec{k}) = \hbar\vec{k}\,\tilde{\psi}(\vec{k})$

Die Funktion $g(\vec{x})$ ist die Fourier-Transformierte von $\tilde{g}(\vec{k})$, also

$$g(\vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \hbar\vec{k}\, \tilde{\psi}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \tilde{\psi}(\vec{k})\, \frac{\hbar}{i}\left(\vec{\nabla} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \tilde{\psi}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{x})$$

Einsetzen in die Parseval'sche Gleichung liefert

$$\langle\vec{p}\rangle_t = \int d^3k\, \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hbar\vec{k}\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

$$= \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$

Dies entspricht der allgemeinen Definition des Erwartungswerts.

Die Beschreibung physikalischer Größen durch selbstadjungierte Operatoren kann in der Orts- oder der Impulsdarstellung erfolgen:

Impulsoperator:

$$\hat{\vec{p}}\,\psi(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t) \qquad \text{Ortsraum}$$

$$\hat{\vec{p}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) = \hbar\vec{k}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) \qquad \text{Impulsraum}$$

Ortsoperator:

$$\hat{\vec{x}}\,\psi(\vec{x},t) = \vec{x}\,\psi(\vec{x},t) \qquad \text{Ortsraum}$$

$$\hat{\vec{x}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) = -\frac{1}{i}\vec{\nabla}_k\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) \qquad \text{Impulsraum}$$

Da $\hat{\vec{x}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t)$ die Fouriertransformierte von $\hat{\vec{x}}\,\psi(\vec{x},t)$ ist, findet man wieder mit der Parsevalschen Gleichung

$$\langle\vec{x}\rangle_t = \int d^3x\;\psi^*(\vec{x},t)\,\vec{x}\,\psi(\vec{x},t)$$

$$= \int d^3k\;\tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\left(-\frac{1}{i}\vec{\nabla}_k\right)\tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

Mit der Dirac-Schreibweise lassen sich diese Beziehungen darstellungsunabhängig formulieren:

$$\psi(\vec{x},t) \rightarrow |\alpha\rangle\,, \quad \langle\vec{x}\rangle = \langle\alpha|\hat{\vec{x}}|\alpha\rangle$$

Der Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ als Hilbertraum

Sei F ein selbst-adjungierter Operator und φ_n, φ_m zwei quadratintegrable Funktionen, $\varphi_n, \varphi_m \in L^2(\mathbb{R}^3)$, so gilt

$$\int d^3x \; \varphi_m^* \, F \varphi_n = \int d^3x \; (F\varphi_m)^* \varphi_n \qquad (*)$$

⚠ Für $m \neq n$ ist das Integral i. A. komplex!

Definiere ein Skalarprodukt auf $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$(\varphi_m, \varphi_n) := \int d^3x \; \varphi_m^*(\vec{x}) \, \varphi_n(\vec{x})$$

Da F selbstadjungiert ist, gilt

$$(\varphi_m, F\varphi_n) \underset{(*)}{=} (F\varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_n, F\varphi_m)^*$$

Also ist i. A. $(\varphi_m, F\varphi_n) \in \mathbb{C}$

$n = m$: $\quad (\varphi_n, F\varphi_n) = (\varphi_n, F\varphi_n)^* \in \mathbb{R}$

($\hat{=}$ Erwartungswert)

Der i. A. unendlich-dimensionale lineare Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ wird durch eine Basis von Funktionen aufgespannt:

$$\{ \varphi_n(\vec{x}) \mid n = 1, \dots \}$$

Ein linearer Raum auf dem ein Skalarprodukt definiert ist, heißt Hilbertraum

Die Größen $(\varphi_m, F\varphi_n)$ sind die Elemente einer unendlich-dimensionalen Matrix:

$$F_{mn} = (\varphi_m, F\varphi_n) = (F\varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_n, F\varphi_m)^*$$

$$= F_{nm}^* \qquad (**)$$

$\rightarrow$ Die Matrix F_{mn} ist hermitisch

Bezeichnet $\underline{F}$ die Matrix im Sinne von (**) so gilt

$$\underline{F} = \underline{F}^+$$

(Unterscheide zw. dem Operator F und der Matrix $\underline{F}$)

Alle Operatoren die wir diskutieren, sind linear:

Sind φ_1, φ_2 Elemente von $L^2(\mathbb{R}^3)$, und sind $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, so gilt

$$F(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1 F\varphi_1 + c_2 F\varphi_2$$

Gelegentlich treten anti-hermitische Operatoren auf

$$F(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1^* F\varphi_1 + c_2^* F\varphi_2$$

1.6 Bewegungsgleichungen; Kommutatoren

Sei F ein selbstadjungierter linearer Operator der über das Korrespondenzprinzip einer klassischen Observable zugeordnet ist.

Betrachte die zeitliche Änderung des Erwartungswerts $\langle F \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\langle F\rangle + \int d^3x \left\{ \dot{\psi}^* F\psi + \psi^* F\dot{\psi} \right\}$$

Über die Schrödingergleichung erhält man

$$\dot{\psi} = -\frac{i}{\hbar} H\psi \,, \qquad \dot{\psi}^* = \frac{i}{\hbar}(H\psi)^*$$

und somit

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar}\int d^3x \left\{ (H\psi)^*(F\psi) - \psi^* F H \psi \right\}$$

H ist hermitesch!

$$= \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar}\int d^3x \left\{ \psi^* H F\psi - \psi^* F H\psi \right\}$$

$$= \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar}\int d^3x \; \psi^* [H,F]\psi \,, \quad \text{mit}$$

$$[H,F] := HF - FH$$

Dies bezeichnet man als **Kommutator von H und F.**

Allgemein definiert man den Kommutator zweier linearer Operatoren A und B als

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

Zurück zu $\frac{d}{dt}\langle F\rangle$. Mit der Definition des Kommutators läßt sich der Ausdruck für $\frac{d}{dt}\langle F\rangle$ schreiben als

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle [H, F]\rangle} \quad (*)$$

Man zeigt völlig analog, dass für alle $\varphi_n, \varphi_m \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gilt

$$\frac{d}{dt}(\varphi_m, F\varphi_n) = \left(\varphi_m, \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)\varphi_n\right) + \frac{i}{\hbar}(\varphi_m, [H, F]\varphi_n),$$

d.h. die Form der zeitlichen Variation ist unabhängig von der Wahl der quadratintegrablen Funktionen.

Daher kann man (*) als Operatoridentität schreiben:

$$\boxed{\frac{d}{dt}F = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H, F]}$$

Dies ist die Heisenbergsche Bewegungsgleichung