05.05
Theo VL

V Die Theorie der Quantenmechanik

Hilbertraum:
Ein Hilbertraum H ist ein vollständiger Vektorraum mit einem Skalarprodukt.
Der Vektorraum ist über dem Körper der komplexen Zahlen definiert.
Vollständig bedeutet, dass jede Cauchy-Folge von Funktionen in H gegen eine Funktion in H konvergiert.
(Cauchy-Folge: die Elemente der Folge nähern sich uniform für ∞ an.)

$$\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi \in H$$

Man nennt ein Element von H einen Vektor $|\Psi\rangle$.
Das Skalarprodukt von zwei Elementen $|\Psi_1\rangle$ und $|\Psi_2\rangle$ aus H wird geschrieben als:

$$\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle$$

Es ist hermitesch:

$$(\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle)^* = \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

Man definiert die Norm eines Vektors durch

$$\|\Psi\| = \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

Für ein Teilchen in 3D ist der Hilbertraum, der Raum der quadrat integrablen Funktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Eine Wellenfunktion kann einen Zustand beschreiben.
Sie ist nicht eindeutig.
Man kann zum Beispiel die Orts- oder Impulsdarstellung wählen.
Man nennt das Element, welches einen Zustand beschreibt, Zustandsvektor oder auch "ket".
Beispiele:
1)
Die Wellenfunktionen $\in L^2(\mathbb{R}^3)$ mit unendlicher Dimension.
Das Skalarprodukt:

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \int \psi_2^*(\vec{r})\, \psi_1(\vec{r})\, d^3r$$

2)
Die Vektoren eines endlichen Hilbertraums der Dimensionen n. Diese können durch Spaltenvektoren dargestellt werden:

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \text{ mit } u_i, v_i \in \mathbb{C}$$

Das Skalarprodukt

$$\langle v | u \rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i^* u_i = (v_1^*, v_2^* \dots v_n^*) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$$

$$\langle v | u \rangle = (\langle u | v \rangle)^*$$

Dualer Raum H^*

Ein lineares Funktional χ über den Raum H ist ein linear Operation, die jedem ket eine komplexe Zahl zuordnet.

$$|\psi\rangle \in H, \; \chi : H \to \mathbb{C}, \; |\psi\rangle \to \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

Die Gesamtheit der linearen Funktionale bildet einen Vektorraum, den zu H dualen Raum H^*. Ein beliebiger Vektor aus H^* heißt Bra und es wird notiert mit $\langle\chi|$.

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle \quad \text{ein "Braket"}$$

Es entspricht dem eingeführten Skalarprodukt. Ket-Bra wird ein linearer Operator, eine Matrix:

$$|u\rangle\langle u| = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} (u_1^* \dots u_n^*) = \begin{pmatrix} u_1^* u_1 & \dots & u_n^* u_1 \\ \vdots & & \vdots \\ u_1^* u_n & \dots & u_n^* u_n \end{pmatrix}$$

Operatoren auf dem Hilbertraum

Ein linearer Operator $\hat{A}$ transformiert einen Ket in einen anderen Ket:

$$\hat{A} : H \to H, \; |\psi\rangle \to \hat{A}|\psi\rangle \in H$$

Bei endlicher Dimension n von H kann der Operator durch eine dimensionale Matrix dargestellt werden.
Die Anwendung des Operators $\hat{A}$ entspricht dann einer Matrixmultiplikation.
Bei unendlicher Dimension gibt es einige Schwierigkeiten die wir hier nicht betrachten.

Es ist

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \varphi | (\hat{A} | \psi \rangle) = (\langle \varphi | \hat{A}) | \psi \rangle$$

$\langle \varphi |$ Bra, $\hat{A} | \psi \rangle$ Ket

einfach zu sehen für Matrizenschreibweise

Der Erwartungswert eines Operators $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$ ist definiert durch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Der adjungierte Operator: $\hat{A}^\dagger : H \to H$ von $\hat{A}$ ist definiert durch:

$$\langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle = (\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle)^* \quad \forall \text{ Paare } |\psi_1\rangle \text{ und } |\psi_2\rangle$$

Es ist

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

Für Matrizen $\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^T)^*$.

Ein Operator $\hat{A}$ ist hermitesch (oder selbstkonjungiert) wenn

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

Wenn $\hat{A}$ hermitesch ist, ist sein Erwartungswert reell:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \hat{A} \rangle^*$$

$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^* \Rightarrow$ muss reell sein

Regel:

Das adjungierte eines Ausdrucks erhält man

i) durch Invertieren der Ordnung der Terme

ii) durch Transformation:

Operator -> Adjungierter Operator

Ket -> Bra

Zahlen -> komplexkonjugierte Zahl

Beispiel:

$\lambda \langle \psi_1 | \hat{A} \hat{B}^\dagger | \psi_2 \rangle$:

$$\rightarrow \langle \psi_2 | (\hat{B}^\dagger)^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle \lambda^*$$

$$= \lambda^* \langle \psi_2 | \hat{B} \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle$$

Der Operator $\hat{x}$ ist hermitesch:

$$\langle \psi_2 | \hat{x}^\dagger | \psi_1 \rangle \overset{\text{Def.}}{=} (\langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_2 \rangle)^*$$

$$= \left(\int \psi_1^*(\vec{r}) \, x \, \psi_2(\vec{r}) \, d^3r \right)^*$$

$$= \int \psi_1(\vec{r}) \, x \, \psi_2^*(\vec{r}) \, d^3r$$

$$= \langle \psi_2 | \hat{x} | \psi_1 \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{x}^\dagger = \hat{x}$$

Der Impulsoperator ist hermitesch:

$$\langle \psi_2 | \hat{p}_x^\dagger | \psi_1 \rangle \overset{\text{Def.}}{=} \left(\langle \psi_1 | \hat{p}_x | \psi_2 \rangle \right)^*$$

$$= \left(\int \psi_1^*(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi_2(\vec{r}) \right) d^3r \right)^*$$

$$= i\hbar \int \psi_1(\vec{r}) \, \partial_x \psi_2^*(\vec{r}) \, d^3r$$

$$\overset{\text{PI}}{=} -i\hbar \int \left(\partial_x \psi_1(\vec{r}) \right) \psi_2^*(\vec{r}) \, d^3r$$

$$= \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_1 \rangle$$

Eigenvektoren und Eigenwerte

Def:

Ein Vektor (ungleich dem Nullvektor) $|\Psi_\alpha\rangle$ ist ein Eigenvektor von einem Operator $\hat{A}$, wenn

$$\hat{A}|\Psi_\alpha\rangle = a_\alpha|\Psi_\alpha\rangle$$

a_α ist der zugehörige Eigenwert.
Die Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell.
Zwei Eigenvektoren $|\Psi_\alpha\rangle$ und $|\Psi_\beta\rangle$ eines hermiteschen Operators, die zu zwei unterschiedlichen Eigenwerten gehören, sind orthogonal:

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = 0$$

Beispiel:

$$\langle\Psi_\alpha|\hat{A}|\Psi_\beta\rangle = \begin{cases} a_\beta\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle \\ a_\alpha\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle \end{cases}$$

Dies ist nur erfüllt, wenn $a_\beta = a_\alpha$ oder $\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = 0$.
Wenn wir fordern, dass $a_\beta \neq a_\alpha$ sein können soll, muss $\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = 0$ gelten.

Basis des Hilbertraums (Darstellung)

Die in der nicht-relativistischen Quantenmechanik benutzten Hilberträume besitzen wenigstens eine abzählbare orthonormale Basis, eine sog. "Hilbertbasis".
Dabei ist die Orthonormierungsbedingung

für eine diskrete Menge $\{|n\rangle\}$ ist:

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

Jeder ket $|\psi\rangle$ oder Bra $\langle\psi|$ kann geschrieben werden durch:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$\wedge \ \langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle n|$$

mit:

$$c_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$\wedge \ c_n^* = \langle\psi|n\rangle$$

Dieses kann man auch in Vektordarstellung schreiben bei endlicher Dimension D:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_D \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^* \dots c_D^*)$$

Jeder lineare Operator $\hat{A}$ kann in dieser Basis durch eine Matrix dargestellt werden mit den Elementen:

$$A_{n,m} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$$

Beispiel: $D = 3$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{A}^\dagger$$

Eigenwerte: $a_1 = 1$ mit Eigenvektor $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$a_2 = 3$ ist 2-Fach entartet

Beispiel für Eigenvektoren:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Es sind aber auch andere Vekoren möglich!

__Projektor__

Sei eine Hilbertbasis gegeben $\{|n\rangle ; n = 1, 2 \dots\}$.
Der Operator $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$ ist der Projektions-operator oder einfach der Projektor auf den Zustand $|n\rangle$:

$$\hat{P}_n |\psi\rangle = (|n\rangle\langle n|) \sum_m c_m |m\rangle$$

$$= \sum_m c_m |n\rangle\langle n|m\rangle$$

$$= c_n |n\rangle$$

Es ist (Übung):

$$\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$$