III. Formalisierung der Quantenmechanik

III.1. Zustandsvektoren im Hilbertraum

Vorbemerkungen

1) wir hatten bereits

$$\psi(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p}\ \tilde{\psi}(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$\boxed{\underline{p} = \hbar \underline{k}}$

Wellenfunktion
(lasse Zeitabhängigkeit der Einfachheit halber weg)

Impulswellenfkt.: $\tilde{\psi}(\underline{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}\ \psi(\underline{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$

„Zustand" in der Ortsdarstellung

„Zustand" in der Impulsdarstellung

Betrachte im folgenden die Funktion $\psi(\underline{r})$ und $\tilde{\psi}(\underline{p})$ als Projektionen eines abstrakten <u>Zustandsvektors</u> $|\psi\rangle$

auf die „$\underline{r}$"- bzw. die „$\underline{p}$"-Darstellung
(Orts-) (Impuls-)

Letztere haben die Funktion einer Basis <u>eines unitären Vektorraums</u>

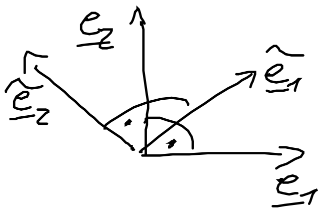
2) Erinnerung: Betrachte gewöhnl. 2-dim. Vektorraum
(planare Fläche)

Veranschaulichung:

Skalarprodukt

Basis: $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2\}$ oder $\{\underline{\tilde{e}}_1, \underline{\tilde{e}}_2\}$ mit $\underline{e}_i \cdot \underline{e}_j = \delta_{ij}$
Einheitsvektoren

$i = 1, 2$



$$\underline{\tilde{e}}_i \cdot \underline{\tilde{e}}_j = \delta_{ij}$$

z.B. $\underline{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \underline{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\underline{\tilde{e}}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \underline{\tilde{e}}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Zerlegung eines Vektors $\underline{a}$ bzgl. dieser Basen

$$\underline{a} = \sum_{i=1}^{2} a_i \underline{e}_i \quad \text{mit } a_i = \underline{a} \cdot \underline{e}_i$$

(*) Koeffizient, Basisvektoren; „Projektion“ (Skalarprodukt)

oder $\underline{a} = \sum_{i=1}^{2} \tilde{a}_i \underline{\tilde{e}}_i$ mit $\tilde{a}_i = \underline{a} \cdot \underline{\tilde{e}}_i$

d.h. Die Komponenten von $\underline{a}$ sind basisabhängig.
Man erhält sie durch Projektion von $\underline{a}$ auf die Basisvektoren
(Skalarprodukt)

Zurück zur Quantenmechanik

Neue Schreibweise:

Lineare Algebra		QM
$\underline{a}$	$\longrightarrow$	$\vert\underline{a}\rangle$
$\underline{e}_i$	$\longrightarrow$	$\vert\underline{e}_i\rangle$

$$\underline{e}_i \cdot \underline{a} \longrightarrow \langle \underline{e}_i | \underline{a} \rangle = a_i$$ ← Zahl

„bra – Ket"

„bracket": engl. Klammer

$|a\rangle$: „Ket"-Vektor

$\langle \underline{e}_i|$: „bra"-Vektor

Dann gilt:

analog zu (*) : $$|a\rangle = \sum_{i=1}^{2} \underbrace{\langle \underline{e}_i|\underline{a}\rangle}_{a_i} |\underline{e}_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{2} \langle \tilde{\underline{e}}_i|\underline{a}\rangle |\tilde{e}_i\rangle$$

Basisvektoren: Vektoren, die den Raum, der zu einem quantenmechan. System gehört, vollständig aufspannen

Vollständigkeitsrelation (für zwei diskrete Basisvektoren)

$$\textcircled{**} \quad \sum_{i=1}^{2} |\underline{e}_i\rangle\langle\underline{e}_i| = \underline{\underline{\hat{1}}}$$

physikal: Quantenmechan. System mit zwei diskrete Zustände

Einheitsoperator

oder $\underbrace{\sum_{i=1}^{2} |\hat{\underline{e}}_i\rangle\langle\hat{\underline{e}}_i|}_{\text{das ist kein Skalarprodukt!}} = \underline{\underline{\hat{1}}}$

Damit

$$|\underline{a}\rangle = \underline{\underline{\hat{1}}}|\underline{a}\rangle$$

Anwendung des Einheitsoperators ändert den Zustand nicht!

$$\overset{(**)}{=} \sum_{i=1}^{2} |\underline{e}_i\rangle\underbrace{\langle\underline{e}_i|\underline{a}\rangle}_{a_i} = \sum_{i=1}^{2} a_i\,|\underline{e}_i\rangle$$

Darstellung bzgl. der Basis $|e_i\rangle$

Übertragung auf die Orts- und Impulsdarstellung quantenmechanischer Zustände

$$\psi(\underline{r}) = \langle\underline{r}|\psi\rangle$$

allg. $\psi(\underline{r},t) = \langle\underline{r}|\psi(t)\rangle$

$$\tilde{\psi}(\underline{p}) = \langle\underline{p}|\psi\rangle$$

Projektion eines Zustands-Vektors

$|\psi\rangle$ auf die $\underline{r}$ – bzw. $\underline{p}$-Basis

$|\underline{r}\rangle$ bzw $|\underline{p}\rangle$ nennt man manchmal
Orts– bzw. Impuls–Zustände

$|\psi\rangle$ ist Element des sogenannten „Hilbertraums"
$\hat{=}$ Raum, in dem die Zustände des quantenmechanischen Systems „leben"

Vollständigkeitsrelation für die Orts- / Impuls-Zustände

a) $\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| = \underline{\hat{1}}$

b) $\int d\underline{p}\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}| = \underline{\hat{1}}$

Beispiele für kontinuierliche Basen!

Damit

$|\psi\rangle = \underline{\hat{1}}\,|\psi\rangle$

Setze Ortsdarstellung ein

$$\overset{a)}{=} \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle \underbrace{\langle\underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})}$$

$$= \int d\underline{r}\ \underbrace{\psi(\underline{r})}\ |\underline{r}\rangle$$ „Entwicklung des Zustandes $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis"

entspricht den Koeffizienten! (Projektion)

gleichwertig:

$$|\psi\rangle = \hat{\underline{1}}\,|\psi\rangle \overset{b)}{=} \int dp\ |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int dp\ \tilde{\psi}(p)\,|p\rangle$$

Basiswechsel

$$\langle \underline{r}|\psi\rangle = \psi(\underline{r})$$

$$= \langle \underline{r}|\underbrace{\hat{\underline{1}}\,\psi}_{\psi}\rangle$$ „Einschieben einer Eins"

$$= \langle \underline{r}|\int dp\ |p\rangle\langle p|\psi\rangle$$

$$= \int dp\ \langle \underline{r}|p\rangle\underbrace{\langle p|\psi\rangle}$$

$$\underbrace{\psi(\underline{r})}_{\langle \underline{r}|\psi\rangle} = \int dp\ \langle \underline{r}|p\rangle\,\tilde{\psi}(p) \qquad (*)$$

Analogie zur lin. Algebra

$$\underline{e}_j\cdot\underline{a} = a_j = \underline{e}_j\cdot\sum_{i=1}^{3}\tilde{a}_i\tilde{\underline{e}}_i = \sum_{i=1}^{3}\underline{e}_j\cdot\tilde{\underline{e}}_i\ \tilde{a}_i$$

Frage: Was ist $\langle \underline{r}|p\rangle$?

Vergleiche dazu (*) mit dem früher hergeleiteten Zusammenhang zw. $\psi(\underline{r})$ und $\tilde{\psi}(\underline{p})$ über die Fouriertransformation

$$\psi(\underline{r}) \overset{!}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p}\; e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\; \tilde{\psi}(\underline{p})$$

~~Verg~~ Vergleiche mit (*)

$$\Rightarrow \underbrace{\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle}_{\text{Skalarprodukt zw. Basisvektoren der Orts- und Impulsbasis}} \overset{!}{=} \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}}_{\text{ebene Welle!}}$$

$$\boxed{\frac{\underline{p}}{\hbar} = \underline{k}}$$

Analog findet man:

$$\langle \underline{p} | \psi \rangle = \tilde{\psi}(\underline{p}) = \langle \underline{p} | \hat{\underline{1}}\, \psi \rangle = \langle \underline{p} | \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\, \psi\rangle$$

$$= \ldots = \int d\underline{r}\; \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle\; \psi(\underline{r})$$

Vergleiche das mit

$$\tilde{\psi}(\underline{p}) \overset{!}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{r}\; e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}\; \psi(\underline{r})$$

$$\Rightarrow \langle \underline{p} | \underline{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i/\hbar\, \underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$$= \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle^{*}$$

Komplex Konjugiert!

Hier sieht man eine erste wichtige Regel für Skalarprodukte im Hilbertraum!

III.2. Axiome des Hilbertraums $\mathcal{H}$

i) $\mathcal{H}$ ist linearer, unitärer Vektorraum

Bedeutung: seien $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ Vektoren in $\mathcal{H}$

(„Ket")

$\Rightarrow$ $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ ist auch Element von $\mathcal{H}$

$$\underbrace{\lambda_1 |\psi_1\rangle}_{\text{„Vektor" parallel zu } |\psi_1\rangle} + \lambda_2 |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$$

(Überlagerung (Superposition) von Zuständen!)

($\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ komplexe Zahlen)

außerdem:

$$(\lambda_1 + \lambda_2)|\psi\rangle = \lambda_1|\psi\rangle + \lambda_2|\psi\rangle$$

$$\lambda(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \lambda|\psi_1\rangle + \lambda|\psi_2\rangle$$

Distributivgesetz

$$\lambda(\mu|\psi\rangle) = \lambda\mu|\psi\rangle = \mu\lambda|\psi\rangle$$

Assoziativgesetz

Superposition $\Longleftrightarrow$ reflektiert die Tatsache, dass die Schrödingergl. (Grundgl. der Dynamik) linear in den Zuständen ist!

Lineare Unabhängigkeit

Mehrere Vektoren $|\psi_i\rangle$ heißen linear unabhängig, wenn aus $\sum_i \lambda_i|\psi_i\rangle = 0$ folgt, dass $\lambda_i = 0$

Seien die Vektoren speziell (diskrete) Basisvektoren $|b_i\rangle$, d.h. linear unabhängige Vektoren, welche $\mathcal{H}$ vollständig aufspannen ($\sum_i |b_i\rangle\langle b_i| = \hat{1}$) Einheitsoperator

Dann kann jeder $|\psi\rangle$ dargestellt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle$$

(c) Skalarprodukt

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$$

Komplexe Zahlen

Multiplikation eines „bra"-Vektors $\langle\psi_1|$ mit einem „ket"-Vektor $|\psi_2\rangle$

Skalarprodukt ist

- <u>Linear</u>

$$\langle\psi|(\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2)\rangle$$

$$= \lambda_1\langle\psi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\psi|\psi_2\rangle$$

- Skalarprodukt ist <u>hermitesch</u>

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$$

Bemerkungen: • Das hatten wir gerade schon beim Basiswechsel zw. $\underline{r}$- und $\underline{p}$-Darstellung gesehen

$$\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$$= \langle\underline{p}|\underline{r}\rangle^*$$

- sei speziell $|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$

$$\Rightarrow \langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle^*$$

$\Rightarrow$ somit $\langle\psi_1|\psi_1\rangle$ reell!

- Folgerung aus der Hermitizität des Skalarprodukts:

$$\langle \lambda \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \lambda \psi_1 \rangle^*$$
$$= \left(\lambda \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \right)^*$$

Linearität

$$= \lambda^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$$
$$= \lambda^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

Man muss aufpassen, auf welcher Seite des Skalarprodukts die Zahlen stehen!

- Skalarprodukt ist positiv definit

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$$

- Falls $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ und $|\psi_1\rangle \neq |\psi_2\rangle$

$\Longrightarrow$ $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ heißen orthogonal

„Orthonormalbasis":

Eine Basis von auf 1 normierten Vektoren, die orthogonal aufeinander stehen.

- Norm eines Zustands

$$\| \psi \| = \sqrt{\underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\geq 0}}$$

analog $|\underline{a}| = \sqrt{\underline{a} \cdot \underline{a}}$

Eigenschaften:

$$\| \lambda \psi \| = \sqrt{\langle \lambda \psi | \lambda \psi \rangle}$$

$$= \sqrt{\lambda^* \lambda \langle \psi | \psi \rangle}$$

$$= \underbrace{|\lambda|}_{\substack{\text{Betrag von} \\ \lambda \in \mathbb{C}}} \| \psi \|$$

- Schwarz'sche Ungleichung (hier ohne Beweis)

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \leq \| \psi_1 \| \, \| \psi_2 \|$$

- Dreiecksungleichung:

$$\| \psi_1 + \psi_2 \| \leq \| \psi_1 \| + \| \psi_2 \|$$

beweisbar auf Basis der Schwarz'schen Ungleichung!

Beispiel: (Orts- und Impulsdarstellung)

Skalarprodukt:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{1}\, \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r}\, \langle \psi_1 | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi_2 \rangle$$

$$= \int d\underline{r}\; \psi_1^*(\underline{r})\, \psi_2(\underline{r})$$

analog: $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \dots = \int d\underline{p}\; \tilde{\psi}_1^*(\underline{p})\, \tilde{\psi}_2(\underline{p})$