

III. Formalisierung der Quantenmechanik

III.1. Zustandsvektoren im Hilbertraum

Vorbemerkungen

1) wir hatten bereits

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

Wellenfunktion
(lasse Zeitabhängigkeit
der Einheitsvektoren weglassen)

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

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

"Zustand" in der Ortsdarstellung

"Zustand" in der Impulsdarstellung

Betrachte im folgenden die Funktionen $\psi(\underline{r})$ und $\tilde{\psi}(\underline{p})$ als Projektionen eines abstrakten Zustandsvektors $|\psi\rangle$

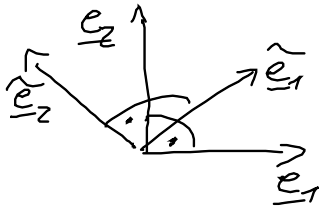
auf die " \underline{r} "- bzw. die " \underline{p} "-Darstellung
(Orts-) (Impuls)

Letztere haben die Funktion einer Basis eines unitären Vektorraums

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

Veranschaulichung:

Basis: $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2\}$
Einheitsvektoren



oder $\{\underline{\tilde{e}}_1, \underline{\tilde{e}}_2\}$ mit $\underline{e}_i \cdot \underline{e}_j = \delta_{ij}$
 $i, j = 1, 2$

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

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 Basis

$$\underline{a} = \sum_{i=1}^2 a_i \underline{e}_i$$

(*)

Basisvektoren
Koeffizient

mit $a_i = \underline{a} \cdot \underline{e}_i$

'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 zu Quantenmechanik

Neue Schreibweise:

Lineare Algebra

QM

\underline{a}

\longrightarrow

$|\underline{a}\rangle$

\underline{e}_i

\longrightarrow

$|\underline{e}_i\rangle$

$\underline{e}_i \cdot \underline{a}$

\longrightarrow

$\langle \underline{e}_i | \underline{a} \rangle = a_i$

„bra-Vekt“

$|\underline{a}\rangle$: „ket“-Vekt

$\langle \underline{e}_i |$: „bra“-Vekt

← Zahl

„bracket“:
„opt. Klammern“

Dann gilt:

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

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

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

Vollständigkeitsrelation (für ^{zwei} diskrete Basisvektoren)

$$\textcircled{**} \sum_{i=1}^2 |e_i\rangle \langle e_i| = \hat{1}$$

physikal:
Quantenmechan.
System mit zwei
diskrete Zustände

oder $\sum_{i=1}^2 |\bar{e}_i\rangle \langle \bar{e}_i| = \hat{1}$ Einheitsoperator

das ist kein Skalarprodukt!

Dann

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

Anwendung des Einheitsoperators
ändert den Zustand nicht!

$$\textcircled{**} \sum_{i=1}^2 |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i | a \rangle}_{a_i} = \sum_{i=1}^2 a_i |e_i\rangle$$

Darstellung bzgl. der Basis
 $|e_i\rangle$

Übertragung auf die Orts- und Impulsdarstellung
quantenmechanischer Zustände

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{allg.} \\ \psi(x,t) = \langle x | \psi(t) \rangle \end{array} \right.$$

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

Projektion: ^{Zustands-}energie ψ / Wellenfunktion

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

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

Beispiele für
 unähnliche Basen!

Dann

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

Setze Ortsdarstellung ein

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

$$= \int dx \underbrace{\psi(x)}_{\text{entspricht den Koeffizienten! (Projektion)}} |x\rangle \quad \text{"Entwicklung des Zustands } |\psi\rangle \text{ in der Ortsbasis"}$$

gleiches gilt:

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

Basiswechsel

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \langle x|\hat{1}|\psi\rangle \quad \text{"Einschreiben eines Eins"}$$

$$= \langle x|\int dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle$$

$$= \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle$$

$$\frac{\psi(x)}{\langle x|\psi\rangle} = \int dp \langle x|p\rangle \tilde{\psi}(p) \quad (*)$$

Analogie zur lini. Algebra

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

$$= \sum_{i=1}^n \mathbf{e}_j \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i \tilde{a}_i$$

Frage: Was ist $\langle x|p\rangle$?

Vergleiche dazu \textcircled{P} mit dem früher hergeleitete Zusammenhang
 zw. $\psi(x)$ und $\tilde{\psi}(p)$ über die Fouriertransformation

$$\psi(x) \stackrel{!}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dp e^{i/\hbar p \cdot x} \tilde{\psi}(p)$$

~~Vergleiche~~ Vergleiche mit \textcircled{P}

$$\Rightarrow \langle x | p \rangle \stackrel{!}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar p \cdot x}$$

Skalarprodukt zw.
 Basisvektoren der Orts-
 und Impulsbasis

ebene Welle!

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

Analog findet man:

$$\begin{aligned} \langle p | \psi \rangle &= \tilde{\psi}(p) = \langle p | \hat{1} | \psi \rangle = \langle p | \int dx |x\rangle \langle x| \psi \rangle \\ &= \int dx \langle p | x \rangle \psi(x) \end{aligned}$$

Vergleiche das mit

$$\tilde{\psi}(p) \stackrel{!}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dx e^{-i/\hbar p \cdot x} \psi(x)$$

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

$$= \langle \psi | p \rangle^*$$

← Komplex
Konjugiert!

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

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

i) \mathcal{H} ist linear, 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}

$\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ (Überlagerung
Superposition
von Zuständen!)
 („Vektoren“ parallel
zu $|\psi_1\rangle$)
 $(\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C})$
 Komplex 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 \Leftrightarrow bedeutet die Tatsache, dass die
Schwüchergl. (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 $\lambda_i = 0$
(diskret)

Siehe die Vektoren speziell Basisvektoren $|b_i\rangle$,
d.h. linear unabhängige Vektoren, welche JE vollständig
aufspannen ($\sum_i |b_i\rangle \langle b_i| = \hat{1}$) Einheitsvektoren

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

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

(c) Skalarprodukt

Komplexe Zahlen

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

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

Skalarprodukt ist
• Linear

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

• Skalarprodukt ist hermitisch

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

Bemerkung: • Das hatten wir gerade schon beim Basiswechsel
zu \underline{n} - und \underline{p} -Darstellung gesehen

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

• Sei speziell $|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$

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

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

- Folgerung aus der Hermitizität des Skalarprodukts:

$$\begin{aligned}
 \langle \lambda \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_2 | \lambda \psi_1 \rangle^* \\
 &\stackrel{\text{Kommutat}}{=} (\lambda \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle)^* \\
 &= \lambda^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \\
 &= \lambda^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle
 \end{aligned}$$

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 $|\psi_1\rangle \neq |\psi_2\rangle$

$\Rightarrow |\psi_1\rangle$ 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

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

Eigenschaften.

$$\begin{aligned} \|\lambda \psi\| &= \sqrt{\langle \lambda \psi | \lambda \psi \rangle} \\ &= \sqrt{\lambda^* \lambda \langle \psi | \psi \rangle} \\ &= \underbrace{|\lambda|}_{\substack{\text{Betrag von} \\ \lambda \in \mathbb{C}}} \|\psi\| \end{aligned}$$

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