Mathematische Werkzeuge in der Quantenmechanik (1)

In QM:

Linear: ⇒ Superposition ist linear
⇒ lineare Operatoren; ~~auf~~ Wellenfunktionen auf einem abstrakten Hilbertraum

Historisch: Zwei Zugänge:

Schrödinger ⇒ kontinuierliche Basis
Heisenberg ⇒ diskrete Basis

Linearer Vektorraum

Zwei Mengen von Elementen, zwei algebraische Regeln

2 Mengen:
- ⇒ Menge der Vektoren $\{\psi, \phi, \chi, \ldots\}$
- ⇒ Menge der Skalare $\{a, b, c, \ldots\}$

2 Regeln:
- ⇒ Regel der Vektoraddition
- ⇒ Regel der Skalarmultiplikation

(a) Additionsregel: abelsche Gruppe, verknüpft Vektoren

(b) Multiplikationsregel: verknüpft Vektoren mit Skalaren

⇒ Produkt eines Skalars mit einem Vektor ergibt einen Vektor des Raumes, jede Linearkombination $a\psi + b\phi$ ist ebenfalls ein Vektor, a, b Skalare

⇒ Distributivität bzgl. der Addition:

$a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi \qquad (a+b)\psi = a\psi + b\psi$

⇒ Assoziativität bzgl. der Skalarmultiplikation:

$a(b\psi) = (ab)\psi$

⇒ ∀ Vektoren muss es ein Einheitsskalar I und ein Nullskalar 0 geben sodass: $I\psi = \psi I = \psi$; $0\psi = \psi 0 = 0$

Hilbertraum

Ein Euklidischer Raum, der bezüglich seiner Norm vollständig ist, heißt Hilbertraum.

Dirac-Notation

Physikalische Zustände wollen wir als Elemente des Hilbertraumes interpretieren. Diese Elemente sind Vektoren (Strahlen).

Dirac führte kets, bras und brac-kets ein.

|kets>: Elemente des (Hilbert) Vektorraumes

Dirac notierte den Zustandsvektor ψ mit $|\psi\rangle$ (ket).

kets leben im Hilbertraum $\mathcal{H}$, bzw in "ket-space".

<bras|: Elemente des Dualraumes (Raum der linearen Funktionale)

Dirac notierte für die Elemente des Dualraumes mit dem Symbol $\langle\psi|$. Zu jedem $|\psi\rangle$ gibt es ein eindeutiges $\langle\psi|$ und umgekehrt.

<bra|ket>: Diracnotation für Skalarprodukt

Wir notieren daher:

$$(\phi, \psi) \rightarrow \langle\phi|\psi\rangle$$

können entscheiden in welcher Basis wir arbeiten.

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*(\vec{r},t)\, \psi(\vec{r},t)\, d^3r \quad \text{(Ortsraum)}$$

Analog könnten wir aber auch $\psi(\vec{p},t)$ im Impulsraum betrachten.

Eigenschaften von bras, kets und brackets

- Jedes ket $|\psi\rangle \longleftrightarrow$ eindeutiges bra $\langle\psi|$

- Eins-zu-Eins-Zusammenhang zwischen bras und kets:

$$a|\psi\rangle + b|\phi\rangle \longleftrightarrow a^*\langle\psi| + b^*\langle\phi|$$

mit $a, b \in \mathbb{C}$.

Notation: $|a\psi\rangle = a|\psi\rangle$

$\langle a\psi| = a^*\langle\psi|$

- Orthogonale Zustände

Zwei kets $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ sind orthogonal, wenn deren Skalarprodukt verschwindet.

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0$$

Anm: $\left(\langle\phi|\psi\rangle^* = 0^* = 0\right)$

- Orthonormale Zustände

Zwei kets $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ heißen orthonormal, wenn sie orthogonal sind und ihre Norm 1 ist:

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1, \quad \langle\phi|\phi\rangle = 1$$

- 'Verbotene' Quantitäten:

$|\psi\rangle|\phi\rangle$, $\langle\phi|\langle\psi|$ mit ϕ u. ψ aus dem selben $\mathcal{H}$

Ausnahme: $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ aus unterschiedlichen Räumen

z.B.: Spinraum, Bahndrehimpulsraum

$$|\psi\rangle|\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \quad \text{Tensorproduktraum}$$

Bsp: Zwei Kets:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix} \qquad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -i \\ 2-3i \end{pmatrix}$$

(a) $\langle\phi| = ?$

(b) $\langle\phi|\psi\rangle = ?$

(a) $\langle\phi|$ erhalten wir durch Transponieren und komplexer Konjugation:

$$\langle\phi| = \begin{pmatrix} 2 & i & 2+3i \end{pmatrix}$$

(b) Skalarprodukt:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 2 & i & 2+3i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix} =$$

$$= -6i + (-1+2i) + 8 + 12i =$$

$$= \underline{\underline{7 + 8i}}$$

Anmerkung: So macht man

$|\phi\rangle\,|\psi\rangle$ keinen Sinn, da beide Spaltenvektoren (Matrizen)

Interpretation als Skalarprodukts:

(i) 'Euklidisch':

$\vec{A} \cdot \vec{B}$: Projektion von $\vec{B}$ auf $\vec{A}$

$\langle \phi | \psi \rangle$: Projektion von $|\psi\rangle$ auf $|\phi\rangle$

(ii) 'Born':

$\langle \phi | \psi \rangle$ ist die WS-Amplitude das System-Zustand $|\psi\rangle$ nach einer Messung in Zustand $|\phi\rangle$ gefunden wird. (Überlapp)

Operatoren

Ein Operator $\hat{A}$ ist eine mathematische Vorschrift, die, wenn auf ein ~~Vektor~~ (bra) angewandt, dieses in ein anderes Ket (bra) $|\psi'\rangle$ transformiert (aus demselben Raum).

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = |\psi'\rangle \qquad \langle \phi | \hat{A} = \langle \phi' |$$

für Wellenfunktionen: $\hat{A}\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$, $\quad \phi(\vec{r})\hat{A} = \phi'(\vec{r})$

Beispiele für Operatoren:

- $\mathbb{1}$: Einheitsoperator: $\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$
- $\vec{\nabla}$
- Impulsop.: $\vec{p}\,\psi(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$
- Laplace $\Delta = \nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$
- Parität: $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$

Ein Operator ist **linear**, wenn gilt:

$$\hat{A}(a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle) = a_1\hat{A}|\psi_1\rangle + a_2\hat{A}|\psi_2\rangle$$

bzw. f. Bras.

- Der Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ von einem Operator $\hat{A}$ bzgl einer Zustandes $|\psi\rangle$ ist definiert durch:

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

- $|\phi\rangle\langle\psi|$ ist ein linearer Operator in Diracnotation.
Denn:

$$|\phi\rangle\langle\psi|\psi'\rangle = \underbrace{\langle\psi|\psi'\rangle}_{\in\mathbb{C}}|\phi\rangle$$

- $|\psi\rangle\hat{A}$ und $\hat{A}\langle\psi|$ sind nicht erlaubt.