5. Formalismus der QM

- Wellenfkt., Operatoren → In welchen Raum leben Wellenfkt? Was für Objekte sind Operatoren?

  $\hat{H}\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \rightarrow$ EW glg.
- Diracnotation
- Observable / Meßgrößen, $\underbrace{\psi(\vec{r}) \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{k})}$

  $\psi \rightarrow$ physik. Zustände
- Postulate der QM

Vorlesung heute: 5.1 Hilbertraum ✓

5.2 Physikalischer Zustandsraum ✓

5.3 Lineare Operatoren

Weitere digitale Sprechstunde Mi 17 – 18 Uhr

5.1 Hilbertraum

QM: Physikalische Zustände sind durch normierbare Wellenfktion $\psi(\vec{r})$ beschrieben

Betrachte Vektorraum aller normierbaren Fktion $\mathcal{H}'$

$$\mathcal{H}' = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \, , \quad \int d^3r \, |\psi(\vec{r})|^2 < \infty \right\}$$

$\mathcal{H}'$ ist Vektorraum mit den üblichen Eigenschaften

i) Additivität $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}' \Rightarrow \psi_1 + \psi_2 \in \mathcal{H}'$
mit $(\psi_1+\psi_2)(\vec{r}) = \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})$

ii) Skalarmultiplikation $\psi \in \mathcal{H}', \alpha \in \mathbb{C} \Rightarrow (\alpha\psi) \in \mathcal{H}'$
mit $(\alpha\psi)(\vec{r}) = \alpha\psi(\vec{r})$

iii) Assoziativität $\psi_1 + (\psi_2 + \psi_3) = (\psi_1 + \psi_2) + \psi_3$

iv) $\exists$ Nullelement 0 mit $\psi + 0 = \psi$ und $0(\vec{r}) = 0$

v) $\exists$ Inverses $-\psi$ mit $(-\psi)(\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$

vi) Distributivität $\alpha(\psi_1 + \psi_2) = \alpha\psi_1 + \alpha\psi_2$

$$(\alpha+\beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi$$

$$(\alpha\beta)\psi = \alpha\beta\psi$$

$$1 \cdot \psi = \psi$$

... haben wir bisher ganz natürlich angewandt und wollen jetzt Vektorraum noch genauer diskutieren

Betrachte <u>Skalarprodukt</u> $(\ldots,\ldots)$

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

mit Eigenschaften

i) $(\psi_3, \psi_1 + \psi_2) = (\psi_3, \psi_1) + (\psi_3, \psi_2)$

ii) $(\psi_1, \alpha\psi_2) = \alpha\,(\psi_1, \psi_2)$

iii) $(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*$

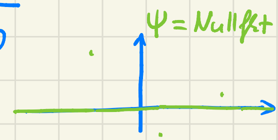
iv) $(\psi, \psi) \geq 0$

$\rightarrow$ Vektorraum $\mathcal{H}'$ mit Skalarprodukt

Aber: $(\psi,\psi) = 0 \;\not\Rightarrow\; \psi = 0$

da ψ auch eine sogenannte *<u>Nullfunktion</u> sein kann,

d.h. Fkt. für die $\psi(\vec{r}) \neq 0$ auf Maß 0



Daher betrachte den Raum $\mathcal{H} = \mathcal{H}'/\mathcal{N}$

mit $\mathcal{N} = \left\{ \eta \in \mathcal{H}',\ \int d^3r\ |\eta(\vec{r})|^2 = 0 \right\}^*$ Raum der Nullfkten
ohne Nullelement

d.h. ψ_1 und $\psi_2 = \psi_1 + \eta$ sind äquivalente Fkten in $\mathcal{H}$

$\Rightarrow$ $\mathcal{H}$ ist komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt

und $(\psi,\psi) = 0 \iff \psi \in 0$ (Nullelement)

und Norm $\|\psi\| = \sqrt{(\psi,\psi)}$ $\rightarrow$ $\mathcal{H}$ = Hilbertraum

$\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$

Eigenschaften der Norm

i) Schwarzsche Ungleichung $|(\psi_1, \psi_2)| \leq \|\psi_1\| \, \|\psi_2\|$

ii) Dreiecksungleichung $\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\|$

Orthogonalität

ψ_1 und ψ_2 sind orthogonal $\Longleftrightarrow$ $(\psi_1, \psi_2) = 0$

Vollständige Funktionensysteme

Sei $\{u_n \in \mathcal{H}\}$ ein Orthonormalsystem $(u_n, u_m) = \delta_{nm}$

$\{u_n\}$ ist Basis von $\mathcal{H}$, falls für jedes $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi = \sum_n c_n u_n \quad \text{mit} \quad c_n \in \mathbb{C}$$

$$(u_n, \psi) = \left(u_n, \sum_m c_m u_m\right) = \sum_m c_m \underbrace{(u_n, u_m)}_{\delta_{nm}} \Rightarrow c_n = (u_n, \psi)$$

$$\psi = \sum_n (u_n, \psi)\, u_n$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}) = \sum_n u_n(\vec{r}) \int d^3r' \, u_n^*(\vec{r}\,') \, \psi(\vec{r}\,')$$

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \underbrace{\sum_n u_n(\vec{r}) \, u_n^*(\vec{r}\,')}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')} \psi(\vec{r}\,') \qquad \text{für bel. } \psi(\vec{r})$$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation $\boxed{\sum_n u_n(\vec{r}) \, u_n^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

5.2 Physikalischer Zustandsraum

Physikalische Zustände werden beschrieben durch

Vektoren $\psi \in$ Hilbertraum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^d)$

Zeitabhängigkeit $\psi(\vec{r}, \underline{\underline{t}})$ $\rightarrow$ Bewegung des Vektors in $\mathcal{H}$

mit Norm $\|\psi\| = 1$.

NB: Zustände $\psi_1 \in \mathcal{H}$ und $\psi_2 = \lambda \psi_1 \in \mathcal{H}$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$
sind physikalisch äquivalent

$\rightarrow$ Zustände sind Strahlen in $\mathcal{H}$

Superpositionsprinzip

Für Zustände ψ_1, ψ_2 ist $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$
wieder ein physikalischer Zustand

5.3 Lineare Operatoren

Operator $\hat{A}$ ist Abbildung

$$\hat{A} : D_{\hat{A}} \rightarrow \mathcal{H} \qquad \text{mit } D_{\hat{A}} \subseteq \mathcal{H}$$

Definitionsbereich von $\hat{A}$

$$\underbrace{\psi}_{\in D_{\hat{A}} \subseteq \mathcal{H}} \rightarrow \underbrace{\hat{A}\psi}_{\in \mathcal{H}}$$

in QM für uns immer $D_{\hat{A}} = \mathcal{H}$

$\hat{A}$ ist <u>lineare Abbildung</u> wenn

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2$$

Beispiele: Ortsoperator $\hat{\vec{Q}}$, Impulsoperator $\hat{\vec{P}}$, Hamilton-op. $\hat{H}$

im Ortsraum

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = \hat{A}\,\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \underbrace{\hat{A}(\vec{r},\vec{r}')}_{\text{Kern des Operators}} \psi(\vec{r}')$$

$\mathbb{1}$ $\qquad \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

$\hat{\vec{Q}}$ $\qquad \vec{r}\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

<u>Adjungierter Operator</u> $\hat{A}^+$ zu $\hat{A}$ definiert durch

$$(\chi, \underset{(\hat{A}\hat{B})}{\hat{A}\psi}) = (\hat{A}^+\chi, \psi)$$

für alle $\psi \in D_{\hat{A}}$ und $\chi \in D_{\hat{A}^+}$ $\qquad$ in QM immer $D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^+} = \mathcal{H}$

$\Rightarrow$ Adj. Operator eines Produkts von Op. $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

$\hat{A}$ ist <u>hermitsch</u>, wenn

$$(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\chi, \psi) \quad \text{für alle } \psi, \chi \in D_{\hat{A}} \quad D_{\hat{A}} \subseteq D_{\hat{A}^+}$$

$\hat{A}$ ist <u>selbstadjungiert</u>, wenn

$$\hat{A} = \hat{A}^+ \quad \text{und} \quad D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}'}$$

$\Rightarrow$ selbstadj. Operator ist auch immer hermitsch

Wenn $D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^+} = \mathcal{H}$ (wie in QM): selbstadj. = hermitsch

Beispiele für selbstadj. = hermitsche Operatoren: $\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}, \hat{H}$

Betrachte $\hat{\vec{P}}_i$, check dass hermitsch

$$(\chi, \hat{\vec{P}}_i \psi) = \int d^3r \; \chi^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \psi(\vec{r})$$

$$\overset{\text{Part. Int.}}{=} - \int d^3r \left(\frac{\partial}{\partial r_i} \chi^*(\vec{r}) \right) \frac{\hbar}{i} \psi(\vec{r})$$

$$= \int d^3r \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \chi(\vec{r}) \right)^* \psi(\vec{r})$$

$$= (\hat{\vec{P}}_i \chi, \psi)$$

selbstadj.: $(\hat{\vec{P}}_i)^+ = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \right)^+ = \left(\frac{\hbar}{-i} \left(- \frac{\partial}{\partial r_i} \right) \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} = \hat{\vec{P}}_i$

Eigenwerte und Eigenvektoren von Operatoren

wenn für $a \in \mathbb{C}$ ein $\psi \neq 0 \in \mathcal{H}$ existiert mit

$$\hat{A} \psi = a \psi$$

heißt a Eigenwert und ψ Eigenvektor des Op. $\hat{A}$

Eigenwerte hermitscher Operatoren sind reell

Beweis: $\hat{A}\psi = a\psi \Rightarrow (\psi, \hat{A}\psi) = a\,(\psi, \psi)$ ①

$\hat{A}$ hermitsch $\quad (\psi, \hat{A}\psi) = \underbrace{(\hat{A}\psi, \psi)}_{(a\psi, \psi)} = a^* (\psi, \psi)$ ②

① − ②

$$\Rightarrow \quad 0 = (a - a^*)\underbrace{(\psi,\psi)}_{\neq 0} \quad \Rightarrow \quad a = a^* \;, \quad a \in \mathbb{R}$$

Betrachte $\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1$ und $\hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2$

$$\hat{A}(\psi_1+\psi_2) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \neq c(\psi_1+\psi_2)$$

$\hat{H}$