Review 5. QM formalism

5.1 **Hilbert space** = complex vector space $\mathcal{H}$
with scalar product (ψ, ψ),
where $(\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$
and norm $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$

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

positive definit sesquilinear form

Completeness relation $\sum_n u_n(\vec{r}) \, u_n^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$

for orthonormal and complete basis $\{u_n\}$
$\hookrightarrow (u_n, u_m) = \delta_{nm}$

5.2 **Physical states** $\psi \in \mathcal{H}$ Hilbert space

5.3 **Linear operator** $\hat{A}$ transform $\psi \rightarrow \psi' = \hat{A}\psi$

Adjoint operator $\hat{A}^+$ defined through $(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\chi, \psi)$

Hermitian operator when $(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\chi, \psi)$

Self-adjoint operator $\hat{A}^+ = \hat{A}$, is also hermitian

Eigenvectors and **eigenvalues**: $\hat{A}\psi = a\psi$ for $a \in \mathbb{C}$

Hermitian operators have real eigenvalues ✓

Vorlesung heute: 5.3 Lineare Operatoren Continued ✓

5.4 Diracnotation

5.3 Continued

Eigenvectoren von herm. Op. zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

Beweis: $\hat{A}\psi_1 = a_1 \psi_1 \quad , \quad \hat{A}\psi_2 = a_2 \psi_2 \qquad a_i \in \mathbb{R}, \quad a_1 \neq a_2$

$$\text{Aus} \quad (\psi_2, \hat{A}\psi_1) = a_1 (\psi_2, \psi_1)$$

$$\overset{\text{herm. Op.}}{\parallel}$$

$$(\hat{A}\psi_2, \psi_1) = a_2 (\psi_2, \psi_1)$$

$$\Rightarrow \quad (a_1 - a_2)(\psi_2, \psi_1) = 0 \quad \Rightarrow \quad (\psi_2, \psi_1) = 0, \quad \psi_1 \perp \psi_2$$

Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert a (bei n-facher Entartung)

z.B. 2-fach entartet $\quad \hat{A}\psi_3 = a\psi_3 \quad , \quad \hat{A}\psi_4 = a\psi_4$

ψ_3, ψ_4 linear unabh.

$$\Rightarrow \quad \hat{A}(c_3\psi_3 + c_4\psi_4) = a(c_3\psi_3 + c_4\psi_4)$$

Linearkomb. wieder Eigenvektor

2-dim. Teilraum kann mit Gram-Schmidt orthogonale Basis konstruieren

$$\underbrace{\tilde{\psi}_3, \tilde{\psi}_4}_{a} \rightarrow (\tilde{\psi}_3, \tilde{\psi}_4) = 0$$

$\Rightarrow$ Hermitische Operatoren haben reelle EW und orthogonale EV

$$\text{"} \qquad \text{"} \quad \hat{A} \rightarrow a_n \qquad \{\psi_n\}$$

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$$

Vollständigkeit

Sei $\hat{A}$ selbstadj. mit diskretem Spektrum (= Menge der Eigenwerte) $\{\lambda_n\}$

z.B. unendl. Potkasten

$\Rightarrow$ Eigenvektoren $\{u_n\}$ von $\hat{A}$ spannen gesamten Hilbertraum $\mathcal{H}$ auf.

Vergleiche zur Linearen Algebra

Für jedes $\psi \in \mathcal{H}$ gilt $\psi = \sum_{n=1}^{N} c_n u_n$ mit $c_n \in \mathbb{C}$

Repräsentation von $\psi \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$ als N-dim Spaltenvektor der Entwicklungskoeffizienten

$\rightarrow$ Repräsentation von $\hat{A} \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix}$ $N \times N$ Matrix

$\rightarrow$ Adjungierter Operator $\hat{A}^+ \rightarrow A^{t*}$

Falls $\hat{A} = \hat{A}^+$ selbstadj.: $A_{ij} = A_{ji}^*$ $\rightarrow$ selbstadj $\Rightarrow$ herm.

gibt es reelle Eigenwerte $\{\lambda_i\}$ mit Eigenvektoren $\vec{e}_i$, d.h. $A\vec{e}_i = \lambda_i \vec{e}_i$

in $\{\vec{e}_i\}$ Basis der Eigen(spalten)vektoren ist A diagonal

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_N \end{pmatrix}$$

In Matrixdarstellung ist finden von Eigenwerten und Eigenvektoren gegeben durch Diagonalisierung

später: Lösen der zeitunabh. S-Glg $\hat{H}\psi = E\psi \Longleftrightarrow$ Diagonalisierung von $\hat{H}$ in geg. Basis

Beispiele: Unendlicher Potentialtopf, zeitunabh. S-Glg. $\hat{H}\Psi_i = E_i \Psi_i$

$\hat{H}$ selbstadj. Op. E_i diskretes Spektrum, $\{\Psi_i\}$ vollständig orthonormal

Matrixdarstellung

$$\hat{H} \rightarrow (H_{ij}) = \Big(\underbrace{(u_i, \hat{H} u_j)}_{\{u_i\} \text{ vollst. Basis}} \Big) = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

für bel. Basis: hermitische Matrix $H_{ij} = H_{ji}^*$

in Basis von Eigenvektoren (Eigenbasis)

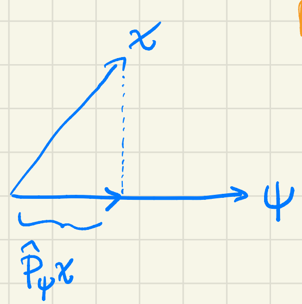
$$\rightarrow (H_{ij}) = \Big((\Psi_i, \underbrace{\hat{H}\Psi_j}_{E_j \Psi_j}) \Big) = (E_j \delta_{ij}) = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ Lösen der zeitunabh. S-Glg. $\Longleftrightarrow$ Diagonalisierung von $\hat{H}$ in bel. vollst. Basis

Projektionsoperatoren

für $\Psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\Psi\| = 1$

betrachte lin. Op. $\hat{P}_\Psi$: $\quad \underbrace{\hat{P}_\Psi x}_{\text{projiziert bel. } x \in \mathcal{H} \text{ in } \Psi \text{ Richtung}} \equiv \overbrace{(\Psi, x)}^{\in \mathbb{C}} \Psi \sim \Psi$



Projektionsop. $\hat{P}_\Psi$ ist selbstadj. $\hat{P}_\Psi = \hat{P}_\Psi^+$ und $(\hat{P}_\Psi)^2 = \hat{P}_\Psi$

$$\hat{P}_\psi \hat{P}_\psi x = \hat{P}_\psi (\psi, x) \psi = (\psi, x) \hat{P}_\psi \psi = (\psi, x) \underbrace{(\psi, \psi)}_{1} \psi$$

$$= \hat{P}_\psi x$$

Allg. sei $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ Orthonormalbasis, die Unterraum U aufspannt

$$\hat{P}_U = \sum_{i=1}^{n} \hat{P}_{\psi_i}$$ projiziert auf Unterraum

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

Allg. ist ein linearer, selbstadj. Operator $\hat{P}$ mit $\hat{P}^2 = \hat{P}$

ein Projektionsop.

5.4 Diracnotation

QM Notation für Vektoren/Zustände und Operatoren

↳ QM: Selbstadj. Operatoren

⟷ Observable/Meßgrößen

Vektoren/Zustände $\in \mathcal{H}$ $\rightarrow$ $|\psi\rangle$, $|u_n\rangle$, $|n\rangle$, ... "ket"

ψ, u_n

Skalarprodukt (ψ_1, ψ_2) $\rightarrow$ $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

"bra" "ket"

Dirac bra-ket Notation

Operator mit Matrixelementen $(x, \hat{A}\psi)$ $\rightarrow$ $\langle x | \hat{A} | \psi \rangle$

Projektor $\hat{P}_\psi$ $\rightarrow$ $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

Warum? $\hat{P}_\psi x = (\psi, x)\,\psi \rightarrow \langle \psi | x \rangle |\psi\rangle = \underbrace{|\psi\rangle\langle\psi|}_{\hat{P}_\psi} x\rangle$

$$\hat{P}_\psi |x\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle \psi | x \rangle}$$

Sei $\{|n\rangle\}$ vollst. Orthonormalsystem

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

Vollständigkeit $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{\in \mathbb{C}} |n\rangle$

$c_n = (n, \psi)$

$$= \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\mathbb{1}} \psi\rangle$$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation in Diracnotation $\boxed{\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|}$

↳ im Hilbertraum

Spektraldarstellung eines selbstadj. Operators $\hat{A}$, $\hat{A}|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$

reelle EW

$$\hat{A} = \mathbb{1}\,\hat{A}\,\mathbb{1} \quad \text{mit Vollständigkeit } \mathbb{1} = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|$$

$$= \sum_{n,m} |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|\hat{A}|u_m\rangle}\langle u_m|$$

$$\boxed{\hat{A}} = \sum_{n,m} |u_n\rangle\, a_n \delta_{nm} \langle u_m| = \boxed{\sum_n |u_n\rangle a_n \langle u_n|}$$

Skalarprodukte, Matrixelemente, .. $\in \mathbb{C}$ $\longrightarrow$ brakets

Operatoren $\longrightarrow$ ket bra's

Allgemeine Darstellung eines Operators $\hat{A}$ (in allg. Basis)

$$\hat{A} = \mathbb{1}\,\hat{A}\,\mathbb{1} \qquad \mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

$$\boxed{\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle \underbrace{\langle n|\hat{A}|m\rangle}_{A_{nm}} \langle m|}$$

QM Zustände $|\psi\rangle$ und Wellenfkt

Wellenfkt. $\psi(\ldots)$ ist Abbildung des Zustandes $|\psi\rangle$ auf geeignete Basis (Ortsraum, Impulsraum, Eigenfkten)

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

wobei $\underbrace{|\vec{r}\rangle}$ Eigenzustand des Ortsoperators $\hat{\vec{Q}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$

entspricht bei $\vec{r}$ lokalisiertem Teilchen

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \int d^3r' \, \delta(\vec{r}\,' - \vec{r}) \, \psi(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \quad \langle \vec{r} | \vec{r}\,' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \,, \qquad \mathbb{1} = \int d^3r \, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|$$

⋮

oder Wellenfkt. im Impulsraum

$$\tilde{\psi}(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \psi \rangle$$