2.4 Mathematische Struktur der QM: Hilbert-Raum, Zustände und Operatoren

Wie wir gesehen haben, haben Wellenfunktionen folgende Eigenschaften:

1. Superpositionsprinzip

Sind ψ_1 und ψ_2 Lösungen der SG, dann ist auch

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad , \quad c_{1,2} \in \mathbb{C}$$

eine Lösung der SG.

2. Normierbarkeit

Die Lösungen sind auf 1 normierbar, d.h. für die unnormierten Lösungen muss gelten

$$\int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t)\, \psi(\vec{x},t) = c \quad , \quad c \in \mathbb{R}^+ \quad (0 < c < \infty)$$

3. Vollständigkeit

Es gibt eine diskrete (aber in der Regel unendliche) Menge von orthonormalen Basis-Wellenfunktionen $\varphi_n(\vec{x})$, so dass jede Wellenfunktion als Reihe

$$\psi(\vec{x},t) = \sum_n c_n(t)\, \varphi_n(\vec{x})$$

dargestellt werden kann.

(genauer: Sei $\delta\psi_N = \psi - \sum_{n=1}^{N} c_n \varphi_n$,

dann gilt $\lim_{N \to \infty} \int d^3x \, |\delta\psi_N|^2 = 0$)

Mathematisch bedeutet das, dass die Wellenfunktionen Elemente eines (unendlich-dimensionalen) vollständigen komplexen Vektorraums mit Skalarprodukt ist. Einen solchen Vektorraum nennt man *Hilbert-Raum.*

- Das *Skalarprodukt* zweier Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 wird durch

$$\int d^3x \; \psi_1^*(\vec{x},t)\, \psi_2(\vec{x},t)$$

definiert (vgl. die Diskussion der orthonormierten Basiszustände in einer Dimension, $\int dx\, \varphi_m^*(x)\, \varphi_n(x) = \delta_{mn}$, S. 33).

→ Die Norm einer Wellenfunktion ist über das Skalarprodukt mit sich selbst gegeben, analog zur Länge eines gewöhnlichen Vektors, $|\vec{a}|^2 = \vec{a}\cdot\vec{a}$.

- Für die Vektorraumstruktur müssen wir die Wellenfunktion $\psi_0(\vec{x},t) \equiv 0$ als neutrales Element zulassen, auch wenn diese Funktion nicht durch Multiplikation mit einer Konstanten auf eins normiert werden kann. Wir beschränken uns jedoch weiterhin auf *quadratintegrable* Funktionen, d.h.

$$\int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t)\, \psi(\vec{x},t) \;=\; c \;<\; \infty$$

Darstellungsunabhängige Form

Betrachte den Geschwindigkeitsvektor $\vec{v}$ eines Autos. Bzgl. einer Orthonormalbasis (ONB) $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ hat dieser die Komponentendarstellung

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \equiv \sum_i v_i \vec{e}_i \quad , \quad v_i = \vec{e}_i \cdot \vec{v} \; ,$$

bzgl. einer anderen ONB $\{\vec{e}_1{}', \vec{e}_2{}', \vec{e}_3{}'\}$ die Darstellung

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1' \\ v_2' \\ v_3' \end{pmatrix} \equiv \sum_i v_i' \vec{e}_i{}' \quad , \quad v_i' = \vec{e}_i{}' \cdot \vec{v}$$

Beides sind äquivalente <u>Darstellungen</u> desselben Vektors $\vec{v}$.

Analog sind z.B. $\Psi(\vec{x},t)$ und $\tilde{\Psi}(\vec{p},t)$ äquivalente Darstellungen desselben Vektors im quantenmechanischen Hilbert-Raum. Diese Vektoren im Hilbert-Raum nennt man <u>Zustände</u> und schreibt sie darstellungsunabhängig als

$$|\Psi(t)\rangle \qquad \text{(Dirac'sche Notation)}$$

Im Folgenden betrachten wir stets einen beliebigen, aber festen (d.h. für alle Zustände gleichen) Zeitpunkt t und lassen das Zeitargument der Einfachheit halber weg, d.h. $|\Psi\rangle \equiv |\Psi(t)\rangle$

Die Zustände verhalten sich wie gewöhnliche Vektoren, z. B. ist

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle\,, \qquad c_{1,2} \in \mathbb{C}\,,$$

ein Element des Hilbert-Raums, wenn $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ Elemente des Hilbert-Raums sind.

- Skalarprodukte zweier Zustände $|\psi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ schreibt man als $\langle\psi|\varphi\rangle$ oder $\langle\varphi|\psi\rangle$.

  Ortsraumdarstellung:

$$\boxed{\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3x\; \psi^*(\vec{x})\, \varphi(\vec{x})}$$

$$\Rightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = \int d^3x\; \varphi^*(\vec{x})\, \psi(\vec{x}) = \langle\psi|\varphi\rangle^*$$

$(\Rightarrow \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle^* \in \mathbb{R}$ ✓ $\rightsquigarrow$ Norm$)$

Die Skalarprodukte sind (wie bei gewöhnlichen Vektoren) darstellungsunabhängig, z. B.

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3x\; \psi^*(\vec{x})\, \varphi(\vec{x}) = \int d^3p\; \tilde{\psi}^*(\vec{p})\, \tilde{\varphi}(\vec{p})$$

(Beweis: s. u. + Übung?)

Insbesondere nennt man Zustände

- $|\psi\rangle$ normiert $\Leftrightarrow \langle\psi|\psi\rangle = 1$
- $|\psi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ orthogonal $\Leftrightarrow \langle\psi|\varphi\rangle = 0$
- $\{|\psi_n\rangle\}$ orthonormal $\Leftrightarrow \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$

Operatoren

Wir haben gesehen, dass Observable $A(\vec{x},\vec{p})$ in der QM mit Operatoren $\hat{A}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}})$ zusammenhängen.

Erwartungswert:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}) \underbrace{\hat{A}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}) \psi(\vec{x})}_{=: \varphi(\vec{x})} = \langle \psi | \varphi \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle$$

- Als Mittelwert von Messergebnissen sollte $\langle \hat{A} \rangle$ reell sein: $\langle \hat{A} \rangle \overset{!}{=} \langle \hat{A} \rangle^*$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \overset{!}{=} \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle^* = \langle \hat{A} \psi | \psi \rangle \quad \forall \, |\psi\rangle$$

Diese Eigenschaft besitzen <u>hermitesche</u> Operatoren.

Allgemein definiert man für <u>beliebige</u> Operatoren $\hat{A}$ den <u>hermitesch adjungierten</u> Operator $\hat{A}^+$ durch

$$\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle$$

Für <u>hermitesche Operatoren</u> gilt dann $\hat{A} = \hat{A}^+$.

- Die Operatoren sind linear:

$$\hat{A} \left(c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \right) = c_1 \hat{A} |\psi_1\rangle + c_2 \hat{A} |\psi_2\rangle$$

- Stellt man sich die Zustände als Spaltenvektoren bzgl. einer Basis $\{|\varphi_n\rangle\}$ vor, kann man sich die linearen Operatoren als Matrizen vorstellen.

Man schreibt dann oft: $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle \equiv \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle$

„Zeilenvektor" „Matrix" „Spaltenvektor"

und bezeichnet $A_{mn} := \langle \varphi_m | \hat{A} | \varphi_n \rangle$
als „Matrixelemente".
(Vgl. gewöhnlichen Matrizen in einer komplexen ONB $\{\vec{e}_i\}$,
$\vec{e}_i^{\,*} \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$: $A_{mn} = \vec{e}_m^{\,*} \cdot \hat{A}\, \vec{e}_n$)

- Für Matrizen gilt: $\hat{A}^+ = (\hat{A}^*)^T$ ← transponiert

$$\Rightarrow \quad (\lambda \hat{A})^+ = \lambda^* \hat{A}^+ , \quad \lambda \in \mathbb{C}$$
$$(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$$
$$(\hat{A} \hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$$

Diese drei Regeln gelten auch für andere Operatoren

- Man bezeichnet auch

$|\psi\rangle$ als „ket" - Zustand
und $\langle \psi |$ " „bra"- "

Zusammen ergeben sie ein „bra(c)ket" um den Operator $\hat{A}$. Man sagt auch, der Operator $\hat{A}$ werde zwischen den Zuständen „gesandwicht".

- Beispiele:

$\hat{\vec{x}}$, $\hat{\vec{p}}$ und $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\vec{x}})$

sind lineare hermitesche Operatoren.
(→ Übung)