II Math. Hilfsmittel (Teil 2)

A) Wellenfkt. als Zustandsraum

B) Dirac - Notation

1) Einführung

Zustand eines Teilchens wird charakterisiert durch $\psi(\vec{r})$ oder allg. durch die Komponenten bzgl. einer Basis

Basis	Index	Komponente	$\psi(\vec{r})$	Bezeichnung
$u_i(\vec{r})$	i	c_i	$\sum_i c_i u_i(\vec{r})$	allg.
$v_p(\vec{r})$ (ebene Wellen)	p	$\tilde{\psi}(p)$	$\int dp\, \psi_p(p)\, v_p(\vec{r})$	Impulsdarstellung
$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	$\vec{r}_0$	$\psi(\vec{r}_0)$	$\int dr\, \psi(\vec{r}_0)\, \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	Orts-darstellung
$W_{E_n}(\vec{r})$ (Energie-Eigenfkt)	n	c_n	$\sum_n c_n W_{E_n}(\vec{r})$	Energiedarstellung für geb. Zustände
$W_E(\vec{r})$ (Streuzustand)	E	$c(E)$	$\int dE\, c(E)\, W_E(\vec{r})$	Energiedarst. für Streuzustände

Analogie zum Vektorraum mit $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \sum_i a_i \vec{e}_i \quad \text{bzgl. Basis } \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$$

Basiswechsel:

neue Basisvektoren $\vec{e}_i^{\,\prime}$ mit $\vec{e}_i = \underset{\text{Orthogonale Basiswechselmatrix}}{O}\, \vec{e}_i$

damit ist dann

$$\vec{a} = \sum_j a_j' \vec{e}_j^{\,\prime}$$

wobei $a_j' = \sum_i a_i \vec{e}_j^{\,\prime} \vec{e}_i = \sum a_i \underbrace{\vec{e}_j^{\,\prime}\, O\, \vec{e}_i^{\,\prime}}_{O_{ji} \text{ orthogonal}}$

$\vec{a}$ hat Bedeutung unabhängig von Basis (a_i nicht)

$\vec{a}\cdot\vec{b}$ liefert das gleiche Resultat über jede Basis

$$\sum a_i b_i = \sum a_i' b_i'$$

2) Dirac „Ket" und „Bra" („Bra"„Ket")

Beschreibung eines Zustands ohne Bezug auf die Ortsvariablen

a) „Ket" = Element des Zustandsraumes

Symbol: $|a\rangle$

(Analogie: $\vec{a}$ — Objekt ist Vektor ; Name)

Für jedes $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \Rightarrow |\psi\rangle$

ψ charakterisiert den Zustand ohne Bezug auf Koordinatensysteme

b) „Bra"

Zu jedem Ket $|\varphi\rangle$ gehört ein Bra $\langle\varphi|$ der zusammen mit einem bel. Ket $|\psi\rangle$ eine komplexe Zahl ergibt.

$$\langle\varphi|\psi\rangle = c \in \mathbb{C} \;\hat{=}\; \text{Skalarprodukt}$$

gelegentlich lassen wir für φ auch nicht normierbare Zustände zu.

Es gilt $\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle$

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$$

! $$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi_2\rangle$$

3) Lineare Operatoren

$A|\psi\rangle$ ist wieder Ket

Dann ist $\langle \varphi | (A | \psi\rangle)$ einerseits Skalarprod. von $\langle \varphi |$ mit $(A|\psi\rangle)$.
Andererseits ist es auch Matrixelement.

Beispiele für Operatoren

gegeben sei $|\psi_1\rangle$ und $\langle \varphi_1|$ fest
Dann definiert $|\psi_1\rangle\langle\varphi_1|$ einen linearen Operator auf bel. $|\psi\rangle$ durch

$$\underbrace{|\psi_1\rangle}_{\text{Ket}}\underbrace{\langle\varphi_1|\varphi\rangle}_{\text{komplexe Zahl}}$$

Analogie zu Vektoren

$$a^\dagger b = \sum_i a_i^* b_i$$

$$b\,a^\dagger = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} (a_1^* \dots a_n^*) = \begin{pmatrix} b_1 a_1^* & b_1 a_2^* & \dots \\ b_2 a_1^* & \ddots & \\ \vdots & & \end{pmatrix}$$

dyadisches Produkt

Projektor

(FAKTORRAUM aus LA 1)

Es sei $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ Operator

$$P_\psi |\varphi\rangle = \underbrace{|\psi\rangle}_{\text{neue Richtung}} \underbrace{\langle\psi|\varphi\rangle}_{\text{Gewicht}}$$ Projektion von φ auf ψ

Es gilt $P_\psi^2 = P_\psi$

Analogie im $\mathbb{R}^3$

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad P_a = \begin{pmatrix} 0&0&0 \\ 0&0&0 \\ 0&0&1 \end{pmatrix} = \vec{a}\,\vec{a}^\dagger$$

$$P_a \vec{b} = b_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es seien $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_q\rangle$ orthonormierte Ket

d.h. $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ für $1 \le i, j \le q$

dann ist $P = \sum_{1\le i \le q} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ Projektor auf den

durch $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_q\rangle$ aufgespannten Raum.

Zeige dass $P^2 = P$

$$P^2 = \Big(\sum_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\Big)\Big(\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\Big) = \sum_{ij} |\psi_j\rangle\underbrace{\langle\psi_j|\psi_i\rangle}_{\delta_{ij}}\langle\psi_i|$$

$$= \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = P$$

$(|u\rangle\langle v|)$ ist Operator

$(|u\rangle\langle v|)^+ = |v\rangle\langle u|$

Bew: für bel. φ, ψ:

$$\langle\varphi|(|v\rangle\langle u|)^+|\psi\rangle = (\langle\psi|u\rangle\langle v|\varphi\rangle)^*$$

$$= \langle\varphi|v\rangle\langle u|\psi\rangle$$

Also ist $(|u\rangle\langle u|)^+ = |u\rangle\langle u|$ ist hermitisch

Allg: Für hermitesche Operatoren gilt $A^+ = A$

d.h. für alle φ, ψ $\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^+|\varphi\rangle$

$$= \langle\psi|A|\varphi\rangle$$

(wie bei hermiteschen Matrizen)

$A^+ = (A^T)^*$ also transponiert + komplex konjugiert

(Beachte den Unterschied zw. hermitesch und selbstadjungiert)

$$A = A_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad A^* = A_{ij}^* = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{12}} \\ \overline{a_{21}} & \overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$

$$A^+ = (A^*)^T = (A_{ij}^*)^T = A_{ji}^* = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{21}} \\ \overline{a_{12}} & \overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$

4 Hermitescher konj. (= adjungiert) Operator

A angewendet auf ket $|\psi\rangle$ liefert $A|\psi\rangle$ (ket)
Wirkung von A auf bra $\langle\varphi|$ liefert bra $\langle\varphi|A$
ist festgelegt
$$(\langle\varphi|A)\,\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$
und wir schreiben in Analogie zur Matrix-Gl.
$$\langle\varphi|A|\psi\rangle \quad \text{Matrix-Element}$$
zu A adjung. Operator A^+ ist def. durch
$$\langle\varphi|A^*|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$$

(Matrizen $(M^+)_{ij} = (M^*)_{ji}$)

Beachte: $|A\psi\rangle = A|\psi\rangle$

Aber $\langle A\psi| = \langle\psi|A^+$

Es gilt
$$A^{++} = A$$
$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$$
$$(A\cdot B)^+ = B^+ A^+$$

C Darstellung im Zustandsraum

Wahl einer Darstellung $\hat{=}$ Wahl einer Orthonormalen Basis

Zustände werden „dargestellt" durch die Komponenten bzgl. dieser Basis.

Operatoren wie Matrizen.

Formelsammlung (nur diskrete Index)

$\{|u_i\rangle\}$ Basis

$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$

Jede 'Ket' kann geschrieben werden als
$$|\psi\rangle = \sum_i c_i\,|u_i\rangle$$

$P_i = |u_i\rangle\langle u_i|$ ist Projektor auf den durch $|u_i\rangle$ aufgespannten Vektorraum

$$\sum_i P_i = \mathbb{1}$$

Beispiel $\langle\varphi|\psi\rangle \overset{\text{in Darstellung}}{=} \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle$

$$= \langle\varphi|\sum_i (|u_i\rangle\langle u_i|)|\psi\rangle$$
$$= \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$$

„Ket" $|\psi\rangle$ in der durch $\{|u_i\rangle\}$ festgelegten Darstellung entspricht der einspaltigen Matrix

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$