Matrixelement ; Erwartungswert : A sei Observable beschrieben durch selbst adj. Operator

$$(\psi_\beta, A\psi_\alpha) = \int d^3x\, \psi_\beta^*(\vec{x},t)\, A\, \psi_\alpha(\vec{x},t) \doteq \langle\beta|A|\alpha\rangle$$

Weitere Rechenregeln:

Sei $c, d \in \mathbb{C}$, dann gilt:

- $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \quad (\longleftrightarrow c\psi_\alpha(\vec{x},t) = \psi_\alpha(\vec{x},t)\, c)$

- $(\langle\beta|d) = d^* \langle\beta|$

  betrachte gesamte Größe als bra

  $(\longleftrightarrow \int d^3x\, (d\,\psi_\beta(\vec{x},t))^*\, \circ = d^* \int d^3x\, \psi_\beta^*(\vec{x},t)\, \circ)$

- Somit: $(\langle\beta|d)(c|\alpha\rangle) = d^*c\, \langle\beta|\alpha\rangle$

  $\neq dc\,\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta|(dc|\alpha\rangle)$

- $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$

  $$\langle\beta|\alpha\rangle \doteq \int \psi_\beta^* \psi_\alpha\, d^3x = \int (\psi_\beta \psi_\alpha^*)^*\, d^3x = \left(\int \psi_\alpha^* \psi_\beta\, d^3x\right)^* \doteq \langle\alpha|\beta\rangle^*$$

Sei $\{\phi_n\}$ ein orthonormales Basissystem, gehörig zu einem volldiskreten, nicht-entarteten Eigenwertspektrum:

$$\phi_n(x) \doteq |n\rangle \,, \qquad (\phi_m, \phi_n) = \delta_{mn} = \langle m|n\rangle$$

Entwicklung eines ket nach Basiszuständen:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} |n\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\langle m|\alpha\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} \langle m|n\rangle = c_m^{(\alpha)}$$

Vollständigkeit:

$$\psi_\alpha(\vec{x},t) = \int d^3x' \; \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') \, \psi_\alpha(\vec{x}',t)$$

$$= \int d^3x' \sum_n \phi_n^*(\vec{x}) \, \phi_n(\vec{x}') \; \psi_\alpha(\vec{x}',t)$$

$$|\alpha\rangle = \sum_n \langle n|\alpha\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \mathbb{1}\,|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \sum_n \phi_n^*(\vec{x}) \, \phi_n(\vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

Entwicklung eines bra:

$$\langle\beta| = \sum_n \langle\beta|n\rangle\langle n| = \sum_n \langle n|\beta\rangle^* \langle n| = \sum_n c_n^{(\beta)*} \langle n|$$

Matrixelemente von Operatoren

A, B Operatoren, $\{|n\rangle\}$ vollständiges, orthonormales Basissystem, $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ q.m. Zustände

Dann ist:

$$\langle\beta|AB|\alpha\rangle = \langle\beta|A\underbrace{\mathbb{1}}_{\sum_n |n\rangle\langle n|}B|\alpha\rangle$$

$$= \sum_n \langle\beta|A|n\rangle\langle n|B|\alpha\rangle$$

Nützlich wenn $\{|n\rangle\}$ Eigenvektoren von A, B.

3.3 Hilbertraum

Verallgemeinerung des Zustandsbegriffs auf Vektoren in einem linearen Vektorraum

Benötige mathematischen Formalismus zur Behandlung unendlich-dimensionaler Vektorräume, bzw. Funktionenräume

$\rightarrow$ Funktionalanalysis (Hilbert, Banach, Ries, Schmidt, Fischer,…)

Definition: Ein Hilbertraum $\mathscr{H}$ ist ein linearer Vektorraum über $\mathbb{C}$ mit den Eigenschaften:

I. Die Vektorraum-Axiome sind erfüllt

(1) Sind $f, g \in \mathscr{H}$, so auch $f + g \in \mathscr{H}$; $(f+g)+h = f+(g+h)$ Assoziativität

(2) $\exists$ Nullelement 0 mit $f + 0 = f \quad \forall f \in \mathscr{H}$

(3) $\exists$ inverses Element: $f + (-f) = 0 \quad \forall f$

(4) Multiplikation mit Skalar: $\mu, \nu \in \mathbb{C}$

$$\mu f \in \mathscr{H}, \quad (\nu\mu) f = \nu(\mu f)$$

$$(\mu+\nu) f = \mu f + \nu f, \quad \mu(f+g) = \mu f + \mu g$$ Distributivgesetz

II. Es existiert ein Skalarprodukt auf $\mathscr{H}$, d.h. eine positiv definite hermitische Form

$$(\star,\star):\quad \mathscr{H}\to\mathbb{C},\quad f,g\mapsto(f,g)$$

mit den Eigenschaften:

$$(f,g_1+g_2)=(f,g_1)+(f,g_2)$$

$$(f,\mu\, g)=\mu\,(f,g)$$ (linear im 2. Argument)

$$(f,g)=(g,f)^*$$

$$(\nu f,g)=\nu^*(f,g)$$ (antilinear im 1. Argument)

$$(f,f)\geq 0\quad\forall f,\qquad (f,f)=0\quad\Leftrightarrow\quad f\equiv 0$$

III. Der Raum $\mathscr{H}$ ist vollständig d.h. jede Cauchy-Folge $f_1,f_2,f_3,\ldots$ konvergiert gegen ein Element $f\in\mathscr{H}$, $f_n\to f$ wenn

$$\lim_{n\to\infty}\|f_n-f\|=0$$

IV. Der Raum $\mathscr{H}$ ist abzählbar unendlich-dimensional

Bemerkungen:

(a) In III haben wir die Norm eines Elements benutzt.
Diese ist über das Skalarprodukt definiert:

$$\|f\| := \sqrt{(f,f)}$$

Die Norm erfüllt die SCHWARZsche Ungleichung

$$\|(f,g)\| \leq \|f\| \cdot \|g\|$$

Beweis:

$$\left(f - g\frac{(g,f)}{(g,g)},\ f - g\frac{(g,f)}{(g,g)} \right) \overset{\text{wg. II}}{\geq} 0$$

$$= (f,f) - \cancel{\frac{(g,f)^2}{(g,g)}} - (f,g)\frac{(g,f)}{(g,g)} + \cancel{(g,g)\frac{(g,f)^2}{(g,g)^2}} \geq 0$$

$$\Rightarrow \|f\|^2 - \frac{|(f,g)|^2}{\|g\|^2} \geq 0 \quad \Rightarrow \text{Beh.}$$

$\blacksquare$

Es gilt außerdem die Dreiecksungleichung:

$$\| f+g \| \leq \|f\| + \|g\|$$

Beweis: $\|f+g\|^2 = (f+g, f+g) = (f, f+g) + (g, f+g)$

$$\underset{\text{Schwarz}}{\leq} \|f\| \cdot \|f+g\| + \|g\| \cdot \|f+g\|$$

Dividiere durch $\|f+g\| > 0 \Rightarrow$ Beh.

(b) Ohne Eigenschaften $\underline{\text{III}}$ und $\underline{\text{IV}}$ spricht man von einem Prä-Hilbertraum

Cauchy-Folge:

$\forall \varepsilon > 0 \;\exists\; N \in \mathbb{N}$ so daß $\|f_n - f_m\| < \varepsilon$

$$\forall\; n, m > N$$

Eigenschaft daß $\lim_{n\to\infty} \|f_n - f\| = 0$ heißt

Starke Konvergenz, d.h. Konvergenz im quadratischen Mittel, also nicht punktweise

$$\|f_n - f_m\| \sim \left\{ \int d^3x \, (f_n - f)^*(\vec{x}) (f_n - f)(\vec{x}) \right\}^{1/2} < \varepsilon$$

$\underline{\text{III}}$ macht Prä-Hilbertraum zum Hilbertraum.

(c) In der mathematischen Literatur wird $\underline{\overline{IV}}$ in der Regel nicht gefordert.

Die Räume der Q.M. sind in der Regel abzählbar unendlich-dim.:

$\Rightarrow$ Beschränkung auf sog. separable Hilbert räume

Physikalischer Zustandsraum

Wellen mechanik: Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion nur sinnvoll, falls

$$\int d^3x \;\; \psi_\alpha^*(\vec{x},t)\, \psi_\alpha(\vec{x},t) = 1$$

Mathematisch abstrakte Formulierung : $|\alpha\rangle_t \in L^2(\mathbb{R}^3)$

Zustand zur Zeit t

Superpositionsprinzip fordert, dass Linearkombination physikalischer Zustände $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ wieder einem physikalischem Zustand entspricht:

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3), \qquad a, b \in \mathbb{C}$$

ϟ Normierbarkeit scheint Superpositionsprinzip zu widersprechen:

$|\alpha\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, $|\beta\rangle = a|\alpha\rangle$, $a \in \mathbb{C}$

$\Rightarrow \langle\beta|\beta\rangle = a^*a\,\langle\alpha|\alpha\rangle \neq 1$

Auflösung: Zustände, die zueinander proportional sind, sind physikalisch äquivalent

Äquivalenzrelation:

$$\boxed{|\alpha\rangle \sim |\beta\rangle \iff |\beta\rangle = a|\alpha\rangle \;, \; a \in \mathbb{C}, \; a \neq 0}$$

$\curvearrowright$ $|\alpha\rangle$ und $a|\alpha\rangle$ beschreiben denselben physikalischen Zustand

"Nur die "Richtung" eines Vektors im Hilbertraum ist phys. relevant, nicht jedoch seine Länge"

Der physikalische Zustandsraum wird durch die Äquivalenzklassen

$$|\hat{\alpha}\rangle = \{ |\beta\rangle \mid |\beta\rangle \sim |\alpha\rangle \}$$

gebildet. In der Mathematik nennt man eine solche Klasse einen Strahl.

Beispiel: $|\alpha\rangle = e^{i\varphi}|\beta\rangle$

Hier gilt tatsächlich:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\beta| e^{-i\varphi} e^{i\varphi} |\beta\rangle = \langle\beta|\beta\rangle$$

d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Wahrscheinlichkeitsstrom ändern sich nicht.