II. Plenum (17.10.22)

Motivation:

Messwerte in QM diskret / quantisiert $\downarrow$

Wellenfunktion in QM kontinuierlich $\downarrow$

„Eigenwerte und Eigenvektoren / Eigenfunktionen von linearen Operatoren" $\leftarrow$ lineare Algebra

Matrizen, Operatoren und ∞-dim Hilberträume

4. Lineare Operatoren

Unter einem linearen Operator im $\mathcal{H}_N$ verstehen wir eine lineare Abbildung $\mathcal{H}_N \to \mathcal{H}_N$. Seien A, B, C lineare Operatoren im $\mathcal{H}_N$, dann erfüllen sie folgende Eigenschaften:

(1) Linearität: $A(|\psi\rangle + |\phi\rangle) = A|\psi\rangle + A|\phi\rangle$
mit $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_N$.

(2) Verknüpfungen: $(\alpha A)|\psi\rangle = \alpha A|\psi\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$

$$(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$$

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

(3) Assoziativität: $A(BC) = (AB)C$

$$A(B+C) = AB + AC$$

(4) Kommutativität: gilt nicht!
Im Allgemeinen $AB \neq BA$

(5) Einheitsoperator / Identität : $\exists\ \mathbb{1}$ mit $\mathbb{1}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_N$

(6) Inverser Operator zu A wird notiert als A^{-1}:

Betrachte Operator bei dem Definitionsmenge und Wertemenge identisch ist, dann gilt:

„$\exists\ A^{-1}$ mit $AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbb{1}$

$\Longleftrightarrow$

aus $A|\psi\rangle = 0$ folgt $|\psi\rangle = 0\ \forall |\psi\rangle$"

Anmerkungen :

(1) Der zu einem linearen Operator A gehörende adjungierte Operator $A^\dagger$ ist definiert über:

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^* \quad \forall\ |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_N$$

(2) unitäre Operatoren U sind definiert durch

$$U^\dagger = U^{-1} \quad \Rightarrow \quad U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}$$

(3) hermitesche Operatoren A sind definiert durch

$$A^\dagger = A \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|A|\phi\rangle^* = \langle\phi|A|\psi\rangle \quad \forall\ |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_N$$

Beispiel : 2-dim Hilbertraum $\mathcal{H}_2$

In der Orthonormalbasis $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ betrachten wir den Vektor $|\psi\rangle = 2\,|e_1\rangle + 4\,|e_2\rangle$ und den linearen Operator $A = 3\,|e_1\rangle\langle e_1| + 5\,|e_1\rangle\langle e_2|$

$$\Rightarrow A|\psi\rangle = 3\cdot 2\ |e_1\rangle\underbrace{\langle e_1|e_1\rangle}_{1} + 3\cdot 4\ |e_1\rangle\underbrace{\langle e_1|e_2\rangle}_{0}$$

$$+\ 5\cdot 2\ |e_1\rangle\underbrace{\langle e_2|e_1\rangle}_{0} + 5\cdot 4\ |e_1\rangle\underbrace{\langle e_2|e_2\rangle}_{1}$$

$$= 6\,|e_1\rangle + 20\,|e_1\rangle = 26\,|e_1\rangle$$

5. Darstellung linearer Operatoren als Matrizen

So wie wir jeden Vektor $|\psi\rangle$ im $\mathcal{H}_N$ als Spalten-vektor $\begin{pmatrix} \langle e_1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle e_N|\psi\rangle \end{pmatrix}$ darstellen können, so können wir auch einen linearen Operator mit Hilfe einer Basis als Matrix darstellen. Die Matrixelemente eines linearen Operators A sind in der Basis $\{|e_1\rangle \dots |e_N\rangle\}$ gegeben durch $a_{ij} = \langle e_i|A|e_j\rangle$. Das vorangegangene Beispiel lässt sich also einfach darstellen:

$$A|\psi\rangle = 26|e_1\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 26 \\ 0 \end{pmatrix}$$

"Matrix angewendet auf Vektor"

6. Unendlich dimensionaler Hilbertraum $\mathcal{L}^2$

In der QM spielen ∞-dim Hilberträume eine wichtige Rolle. Insbesondere der Vektorraum quadratintegrabler Funktionen

$$\mathcal{L}^2 = \left\{ f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}, \int_{\mathbb{R}^3} |f(\vec{r})|^2 d^3r < \infty \right\}$$

ist wichtig, leben darin doch die Wellenfunktionen.

Zusammen mit dem Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r})\, g(\vec{r})\, d^3r \qquad f, g \in L^2$$

bildet der L^2 einen Hilbertraum.

Genau hier zeigt sich die Stärke der Dirac-Notation mit "bra-" und "ket-Vektoren", denn wir können nun $f(\vec{r}) \in L^2$ schlicht als Darstellung eines abstrakten "ket-Vektors" $|\psi\rangle$ in der Orthonormalbasis

$$\{ |e_{\vec{r}}\rangle,\ \vec{r} \in \mathbb{R}^3,\ \langle e_{\vec{r}} | e_{\vec{r}\,'}\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \}$$

betrachten:

$$\text{Sei } |\psi\rangle = \int d^3r\, f(\vec{r})\, |e_{\vec{r}}\rangle$$

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

Für $\langle \psi | \phi \rangle$ ergibt sich mit $|\phi\rangle = \int d^3r\, g(\vec{r})\, |e_{\vec{r}}\rangle$ genau das Skalarprodukt von oben:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle f, g \rangle \qquad (\text{Übung})$$

Wir notieren den abstrakten Hilbertraum mit $\mathcal{H}$, also $f, g \in L^2$ und $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$. Wieder können wir einen Dualraum $\mathcal{H}^*$ definieren sodass auch $\langle \psi | \in \mathcal{H}^*$ (analog zum N-dim Fall) existiert.