Vorlesung 0

Allgemeine Bemerkungen

Wie Sie wissen, ist es in der Quantenmechanik möglich, den Zustand eines Systems mit einer Wellenfunktion $\psi_x(\vec{r})$ zu beschreiben. Daneben ist es auch möglich das gleiche System mit der Wellenfunktion in der Impulsdarstellung $\psi_p(\vec{p})$ zu beschreiben. Um die Impulsdarstellung zu erreichen, wendet man die Fouriertransformation

$$\psi_x(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \psi_p(\vec{p})\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{1}$$

an. Die Operatoren, die man benutzt, um die Observablen zu beschreiben, unterscheiden sich in der Ortsdarstellung und Impulsdarstellung; zum Beispiel lautet der Operator der kinetischen Energie

$$T = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \tag{2}$$

in der Ortsdarstellung und

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{3}$$

in der Impulsdarstellung.

Es ist offensichtlich, dass die Wahl der Darstellung mit unseren Präferenzen und nicht mit dem Quantensystem oder der Physik zu tun hat. D.h., es gibt eine darstellungsunabhängige Weise Quantensysteme zu beschreiben.

Wir stellen uns vor, dass ein Zustand des Quantensystems einem Vektor im sogenannten Hilbertraum entspricht. Um diesen Vektor zu bezeichnen, schreibt man $|\psi\rangle$ oder $|n\rangle$, den sogenannten Ket-Vektor. Die Zustände der Quantenmechanik sind normiert. Für die Normierung brauchen wir, dass in unserem Hilbertraum ein Skalarprodukt zweier Vektoren definiert ist. Das Skalarprodukt von zwei Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ schreibt man als

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*, \tag{4}$$

wobei $\langle\psi|$ das Hermitesch Konjugierte von $|\psi\rangle$ ist

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger. \tag{5}$$

Man nennt diese Klammer Bra-Vektor.

Die Operatoren wirken auf Zustände im Hilbertraum. Zum Beispiel

$$\hat{A}|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle. \tag{6}$$

Das Matrixelement des Operators kann man dann so verstehen

$$\langle\psi_3|\psi_2\rangle = \langle\psi_3|\hat{A}|\psi_1\rangle. \tag{7}$$

Wie können wir die Verbindung zwischen der darstellungs-unabhängigen Schreibweise und der üblichen Wellenfunktionen etablieren? Dazu diskutieren wir, wie wir den Hilbertraum beschreiben können. Wie üblich für Vektorräume, brauchen wir eine Basis. Angenommen, wir haben eine orthonormale und vollständige Basis mit den Basisvektoren $\{|n\rangle\}$. Dann entsprechen diese Eigenschaften den Formeln

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \quad \sum |n\rangle\langle n| = \hat{1}, \tag{8}$$

sodass

$$|\psi\rangle = \hat{1}\ |\psi\rangle = \sum |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum c_n|n\rangle, \tag{9}$$

wobei $c_n = \langle n|\psi\rangle$ ist. Diese Formel gibt die Entwicklung des Vektors $|\psi\rangle$ in der Basis $|n\rangle$ an.

Man kann natürlich in einem Vektorraum verschiedene Basen wählen. Eine Möglichkeit ist, die Eigenzustände des Ortsoperators als Basisvektoren zu wählen

$$\hat{\vec{r}}\ |\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \tag{10}$$

Diese Vektoren sind vollständig und orthonormal

$$\langle\vec{r}'|\vec{r}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}), \quad \int \mathrm{d}^3\vec{r}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = \hat{1}. \tag{11}$$

Wir schreiben einen Quantenzustand $|\psi\rangle$ in der $\vec{r}$-Basis und erhalten

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ |\vec{r}\ \rangle\psi_x(\vec{r}). \tag{12}$$

Die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung ist dann durch das Skalarprodukt von $|\vec{r}\rangle$ und $|\psi\rangle$ gegeben

$$\psi_x(\vec{r}) = \langle r|\psi\rangle. \tag{13}$$

Eine andere Basis kann man aus den Eigenzuständen des Impulsoperators konstruieren

$$\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle. \tag{14}$$

Auch diese Basis ist orthonormal und vollständig

$$\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p}), \quad \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \hat{1}. \tag{15}$$

Die Wellenfunktion eines $|\vec{p}\rangle$-Zustands in Ortsdarstellung ist

$$\psi_{x;\vec{p}}(\vec{r}) = \langle r|\vec{p}\rangle = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}. \tag{16}$$

Die Relation zwischen Wellenfunktionen in den zwei Darstellungen folgt aus

$$\psi_x(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\ \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\ \psi_p(\vec{p}). \tag{17}$$

Wie wir schon gesagt haben, wirken die Operatoren auf die Vektoren im Phasenraum. Wie Operatoren auf Wellenfunktionen wirken, können wir folgendermaßen feststellen:

$$
\begin{aligned}
&|\psi_2\rangle = \hat{A}|\psi_1\rangle, \\
&\psi_2(\vec{r}\,') = \langle \vec{r}\,'|\psi_2\rangle = \langle \vec{r}\,'|\hat{A}|\psi_1\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \langle \vec{r}\,'|\hat{A}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\psi_1\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \langle \vec{r}\,'|\hat{A}|\vec{r}\rangle\psi_1(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{18}
$$

Wir sehen, dass wir das Matrixelement des Operators zwischen $|\vec{r}\rangle$-Zuständen brauchen. Als Beispiel berechnen wir dieses Matrixelement für die kinetische Energie

$$
\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}. \tag{19}
$$

Wir schreiben

$$
\begin{aligned}
&\langle \vec{r}\,'|\hat{T}|\vec{r}\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}^3\vec{p}\,'}{(2\pi\hbar)^3}\langle \vec{r}\,'|\vec{p}\,'\rangle\langle \vec{p}\,'|\hat{T}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle \\
&= \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}^3\vec{p}\,'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}(2\pi\hbar)^3\ \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}\,')\langle \vec{r}\,'|\vec{p}\,'\rangle\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\langle \vec{r}\,'|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle \\
&= \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}e^{i\vec{p}(\vec{r}\,'-\vec{r})/\hbar} = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla}_{r'})^2}{2m}\int \frac{\mathrm{d}^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{i\vec{p}(\vec{r}\,'-\vec{r})/\hbar} = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla}_{r'})^2}{2m}\delta(\vec{r}\,'-\vec{r}).
\end{aligned}
$$

Dann müssen wir Gl. (18) benutzen. Für $A = T$ erhalten wir das bekannte Ergebnis

$$
\psi_2(\vec{r}\,') = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla}_{r'})^2}{2m}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\delta(\vec{r}\,'-\vec{r})\psi(\vec{r}) = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla}_{r'})^2}{2m}\psi_1(\vec{r}\,'). \tag{20}
$$