

DVP VORBEREITUNGSKURS
TU MÜNCHEN SS 2008

QUANTENMECHANIK I

Tutoren:

Hansjörg ZELLER
Johannes SIEBENSON
Nicolas HÖRMANN
Max HÄBERLEIN
Ulrich NÖBAUER

26. Juli 2008

Zusammenfassung

Dieses Skript ist als eine knappe aber fundierte Zusammenfassung des Quantenmechanik I Kurses gedacht. Wir haben uns sehr an die Darstellung und den Aufbau in S. GASIOROWICZ, QUANTENPHYSIK; SCHWABL, QUANTENMECHANIK; SKRIPT VON PROF. WEISE (SS07) UND PROF. RATZ (WS 07/08) gehalten. Da der Vorbereitungskurs nur 5 Tage umfasst müssen wir den Stoff leider so dicht packen. Auf etwaige Details können leider nicht tiefer eingegangen werden. Wir hoffen dennoch die wichtigsten Punkte aus der Vorlesung von Herrn SCHIRRMACHER ausführlich und verständlich darzustellen.

Inhaltsverzeichnis

1	Schrödingergleichung	3
1.1	Schrödingergleichung, Wellenfunktionen und Interpretationen	3
1.2	Beispiele zur Schrödingergleichung	5
1.2.1	Das freie Teilchen	5
1.2.2	Ein Teilchen im endlich hohem Potentialkasten	6
1.3	Die Potentialbarriere und das Tunnelphänomen	9
1.4	Der eindimensionale harmonische Oszillator	12
2	Mathematische Struktur	14
2.1	Überblick	14
2.2	Vektorräume und Operatoren	14
2.3	Zeitabhängigkeit von Operatoren in der QM	15
3	Abstraktere Formulierung der QM	17
3.1	Dirac Notation	17
3.2	Vergleich mit Matrizen	18
4	Drehimpuls	20
4.1	Allgemeine Definitionen	20
4.2	Lösen des Winkelanteils im Hamiltonoperator	21
5	Rotationssymmetrische Probleme	25
5.1	Zweikörperproblem	25
5.2	Bewegung im Coulombpotential - Wasserstoffatom	26
5.3	Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator	30
6	Matrixdarstellung von Operatoren	32
6.1	Matrizen in der Quantenmechanik	32
6.2	Matrixdarstellung des Drehimpulsoperators	34
7	Der Spin	36
7.1	Darstellung des Spins	36
7.2	Magnetisches Moment des Elektrons	37
7.3	Spin-Bahn-Kopplung	38
7.4	Spinkugelfunktionen	38
7.5	Drehimpulskopplungen	39
8	Störungstheorie	40
8.1	Motivation	40
8.2	Zeitunabhängige Störungstheorie (Rayleigh-Schrödinger)	40
8.2.1	nicht-entartete Störungstheorie	40
8.2.2	Entartete Störungstheorie	42
8.3	Die WKB(Wentzel-Kramers-Brillouin)-Methode	42
8.3.1	Theorie	42

8.3.2	Gebundene Zustände in der WKB-Theorie	44
9	Vielteilchensysteme	45
9.1	Vielteilchenzustände	45
9.1.1	Einführung	45
9.1.2	(Un-)Unterscheidbarkeit von Teilchen	46
9.2	Helium	47
9.2.1	Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung	47
9.2.2	Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion	47
9.2.3	Energiekorrektur des Grundzustands	48
9.2.4	Energiekorrektur der angeregten Zustände	49
9.2.5	Energiekorrekturen der ersten beiden angeregten Zustände	50

Kapitel 1

Schrödingergleichung

1.1 Schrödingergleichung, Wellenfunktionen und Interpretationen

Anfang des 20. Jahrhunderts kam es zu einigen grundlegenden Problemen im physikalischen Verständnis (z.B. beim Doppelspaltversuch mit Elektronen). Man nahm daraus an, dass sich Teilchen mal wie eine Welle, mal wie Teilchen verhalten. Nach deBroglie kann man jedem Teilchen mit Impuls \vec{p} eine Wellenlänge zuschreiben.

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \hbar \frac{1}{\lambda} \quad (1.1)$$

Aus der *nichtrelativistischen* Energie -Impuls-Beziehung

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (1.2)$$

und der aus der Optik bekannten Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{x}} = A(\mathbf{p}, E) e^{-i\frac{E}{\hbar}t + i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\mathbf{x}} \quad (1.3)$$

Wendet man hierauf den Operator $-i\hbar\nabla$ an so liefert dies einfach den Impuls mal die Wellenfunktion. Ebenso kann man durch anwenden des Operators $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ die Energie E erhalten. Schrödingers Idee war nun einfach die *nichtrelativistischen* Energie -Impuls-Beziehung zu erhalten indem er diese Operatoren auf die Wellengleichung anwendete. Dabei ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) \Rightarrow \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.4)$$

Allgemeiner wird das Problem, wenn wir noch ein Potential $V(\vec{x}, t)$ einführen. Dann ergibt sich die Schrödingergleichung in der allgemeinsten Form:

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.5)$$

Man fasst den rechten Term dieser Gleichung meist folgendermaßen zusammen:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) ; \hat{H} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{x}, t) \quad (1.6)$$

\hat{H} ist der Hamiltonoperator. Diese partielle Differentialgleichung ist im Allgemeinen nicht analytisch lösbar. Wir betrachten im Folgenden aber nur den einfachen Fall, dass das Potential zeitunabhängig ist. Dann kann man mit dem Separationsansatz

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (1.7)$$

und anschließendem Einsetzen in die Schrödingergleichung folgende Eigenwertgleichung erhalten:

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (1.8)$$

wobei die Exponentialfunktion schon gekürzt wurde. Dieses Ding heißt Eigenwertgleichung, weil auf der linken Seite kein Operator mehr steht, sondern eine reelle Zahl (die Energie) die entweder kontinuierliche oder diskrete Werte annehmen kann.

Nun ist noch wichtig, was die Funktion $\psi(x, t)$ bedeutet. Das Betragsquadrat $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h. die Wahrscheinlichkeit das Teilchen (das durch die Schrödingergleichung beschrieben wird) zum Zeitpunkt t im Volumenelement $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d^3\mathbf{x}]$ zu finden ist gegeben durch:

$$P(x, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} \tag{1.9}$$

Insgesamt muss deshalb $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ normiert sein:

$$1 = \int_V |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = \int_V \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)d^3\mathbf{x} \tag{1.10}$$

Wobei V das zugängliche Volumen ist.

Wir geben nun noch weitere Eigenschaften für $\Psi(\mathbf{x}, t)$ an:

1. $\Psi(\mathbf{x}, t)$ ist eine stetige und stetig differenzierbare Funktion (s. Beispiele)
2. $\Psi(\mathbf{x}, t)$ verschwindet auf den Rändern des Volumens, d.h.: $\Psi(\mathbf{x}, t)=0 \forall \mathbf{x} \notin V$
3. Die Lösungen der separierten Schrödingergleichung haben bestimmte Energien E_n und werden mit $\Psi_n(\mathbf{x}, t)$ bezeichnet: d.h.:

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi_n(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}) = E_n\psi_n(\mathbf{x}, t) \tag{1.11}$$

wobei n diskret oder kontinuierlich sein kann. Außerdem löst die zeitabhängige Wellenfunktion die zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi_n(\mathbf{x})e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} + V(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x})e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\mathbf{x}, t)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \tag{1.12}$$

4. Die Lösungen zur Eigenwertgleichung mit Energie E_n sind eindeutig und außerdem orthonormal (wenn sie vorher normiert wurden). D.h.:

$$1 = \int_V |\psi_n(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = \int_V \psi_n^*(\mathbf{x}, t)\psi_n(\mathbf{x}, t)d^3\mathbf{x} \quad \forall n \text{ (normiert)} \tag{1.13}$$

und

$$(\psi_n(\mathbf{x}, t), \psi_m(\mathbf{x}, t)) = \int_V \psi_n^*(\mathbf{x}, t)\psi_m(\mathbf{x}, t)d^3\mathbf{x} = \delta_{n,m} \text{ (orthonormal)} \tag{1.14}$$

Hierbei ist für kontinuierliche Energieverteilungen das Kronecker-Delta durch eine Deltafunktion ($\delta(n-m)$) zu ersetzen. Der Ausdruck $(\psi_n(\mathbf{x}, t), \psi_m(\mathbf{x}, t))$ ist ein Skalarprodukt auf einem Vektorraum (s.Kapitel 2)

5. Die Lösungen $\psi_n(\mathbf{x}, t)$ bilden zusammen einen vollständigen Vektorraum:

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{x}, t)\psi_n(\mathbf{y}, t) = 1 = \delta(x - y) \tag{1.15}$$

Dabei ist für kontinuierliche n die Summe durch ein Integral zu ersetzen. Anschaulich bedeutet die Vollständigkeit, dass jede Funktion $\psi(\mathbf{x}, t)$, die die zeitabhängige Schrödingergleichung und die oben definierten Randwerte erfüllt, durch die Eigenwertfunktionen $\psi_n(\mathbf{x}, t)$ dargestellt werden kann:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n\psi_n(\mathbf{x}, t) \tag{1.16}$$

wobei diese Wellenfunktion natürlich auch normiert sein muss.

6. Die c_n haben eine wichtige Bedeutung: $|c_n|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine Messung des Systems das Ergebnis liefert, dass sich das Teilchen im Eigenzustand zur Energie E_n befindet. c_n erhält man einfach durch Projektion von $\psi_n(\mathbf{x}, t)$ auf $\psi(\mathbf{x}, t)$, denn die Projektion ist:

$$\begin{aligned} (\psi_n(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{x}, t)) &= \int_V \psi_n^*(\mathbf{x}, t) \left(\sum_m c_m \psi_m(\mathbf{x}, t) \right) d^3\mathbf{x} \\ &= \sum_m c_m \delta_{n,m} = c_n \end{aligned} \quad (1.17)$$

wobei das 2. Gleichheitszeichen aus der Orthonormalitätsbedingung der $\psi_n^*(\mathbf{x}, t)$ folgt.

7. Wir können zu einem Zustand $\psi(\mathbf{x}, t)$ nur Observablen O (z.B. Impuls, Energie, Ort, ...) messen. Den dazugehörigen Erwartungswert bezeichnet man mit $\langle O \rangle$ und dieser ist definiert als:

$$\langle O \rangle = (\psi(\mathbf{x}, t), \hat{O}\psi(\mathbf{x}, t)) = \int_V \psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{O}\psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} \quad (1.18)$$

wobei \hat{O} der Operator zur Observablen O ist. Beispiel: Erwartungswert der Energie für ein Teilchen im Zustand $\psi(\mathbf{x}, t)$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_V \psi^*(\mathbf{x}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = \\ &= \int_V \psi^*(\mathbf{x}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t} d^3\mathbf{x} = \\ &= \int_V \psi^*(\mathbf{x}, t) \sum_n E_n c_n \psi_n(\mathbf{x}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t} d^3\mathbf{x} = \\ &= \sum_n E_n |c_n|^2 \end{aligned}$$

1.2 Beispiele zur Schrödingergleichung

1.2.1 Das freie Teilchen

Zunächst schauen wir den einfachsten Fall an, indem ein Teilchen sich frei im Vakuum bewegen kann, also kein äußeres Potential wirkt ($V(\mathbf{x}) = 0$) Dann lautet die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$

Sobald sich ein Teilchen in einem konstanten (d.h. ortsunabhängigen) Potential befindet (z.B. $V = 0$) setzt man als Lösung die bekannte Wellenfunktion an: $\psi(\mathbf{x}) = Ae^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$. Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so ergibt sich eine Bedingung, nämlich: $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = E$ was einfach die *nicht-relativistischen* Energie -Impuls-Beziehung ist. Dies ist unsere einzige Bedingung an die Lösungen. Im Allgemeinen wird es noch Randbedingungen geben, die uns zum Beispiel die \mathbf{k} -Werte diskretisieren. Hier kann \mathbf{k} alle Werte zwischen $-\infty$ und ∞ annehmen. Damit ist das Problem eigentlich schon gelöst, allerdings ist das Ergebnis unbefriedigend, weil unanschaulich. Zum einen kann man eine komplexe Exponentialfunktion schlecht über den ganzen Raum normieren

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (Ae^{i\mathbf{k}\mathbf{x}})^* Ae^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d^3\mathbf{x} = |A|^2 V \Rightarrow \\ &\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{V}} \end{aligned}$$

Wobei V das Volumen ist, indem sich das Teilchen aufhalten kann. Für unseren Fall wird V unendlich und damit A Null. D.h. das Teilchen wird sich überall mit der Wahrscheinlichkeit 0 aufhalten. Wir schauen uns nun einen realistischeren Fall an, indem wir zunächst der Einfachheit halber das Teilchen nur in x -Richtung bewegen lassen ($y = z = 0$) und außerdem viele Lösungen der obigen Form überlagern. Wir wissen nun, dass $k_x = k$ kontinuierlich ist. Also schreiben wir:

$$\psi(x, t) = \sum_k c_k e^{ikx - i\frac{E}{\hbar}t} = \int_{-\infty}^{\infty} dp c(p) e^{i\frac{px}{\hbar} - i\frac{p^2}{2m\hbar}t}$$

Dies ist nichts anderes als die Fouriertransformierte von $c(p)e^{-i\frac{\hbar p^2}{2m\hbar}t}$. Nehmen wir für $c(p)$ eine gaußförmige Verteilung der Form

$$c(p) = A e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p-p_0}{\Delta p}\right)^2}$$

so ergibt sich für $|\psi(x, t)|^2$ folgende Verteilung. (Die genaue Rechnung dazu habt ihr in der Übung beim Herrn Schirmmacher gemacht und liefert wenige zusätzliche Erkenntnisse):

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta x(t)} \exp\left(-\left(\frac{x - v_0}{\Delta x(t)}\right)^2\right)$$

wobei:

$$v_0 = \frac{p_0}{m} \text{ und } \Delta x(t) = \frac{\hbar}{\Delta p} \sqrt{1 + \left(\frac{(\Delta p)^2 t}{m\hbar}\right)^2}$$

Diese Funktion ist und bleibt normiert. Außerdem gilt: $\Delta x(t)\Delta p \geq \hbar$ was der Heisenbergschen Unschärferelation entspricht. Dies kann durch einfaches Nachrechnen gezeigt werden.

Mittelwert von x :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x, t)|^2 \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} (x - v_0 t) |\psi(x, t)|^2}_{=0} + \int_{-\infty}^{\infty} v_0 |\psi(x, t)|^2 = v_0 t \end{aligned}$$

1.2.2 Ein Teilchen im endlich hohem Potentialkasten

Wir betrachten einen Potentialtopf mit:

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \text{ für } x < -a \\ V(x) &= -V_0 \text{ für } -a < x < a \\ V(x) &= 0 \text{ für } x > a \end{aligned}$$

Nehmen wir an, dass $E < 0$ gilt, dann ergibt die Schrödingergleichung für $|x| > a$ unter Verwendung des Ansatzes $\psi_A(x) = e^{i\alpha x}$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} = E &\Rightarrow \alpha = i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} := \kappa \\ \Rightarrow \psi_A(x) &= e^{\pm \kappa x} \end{aligned}$$

Die Lösungen sollen aber außerhalb des Potentialtopfes nicht divergieren und deshalb gilt:

$$\psi_A(x) = C_1 e^{\kappa x} \quad \text{für } x < -a$$

$$\psi_A(x) = C_2 e^{-\kappa x} \quad \text{für } x > a$$

Dieses exponentielle Verhalten folgt aus der Tatsache, dass im Außenraum die Teilchen negative kinetische Energie haben. Dies ist klassisch gar nicht möglich, und wird in der QM durch den Abfall bewältigt.

Im Innenraum könnten wir auch wieder komplexe Exponentialfunktionen ansetzen, es erweist sich aber als günstiger gleich mit reellen symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen zu arbeiten.

Also:

$\psi_I(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ womit durch Einsetzen in die Schrödingergleichung folgt:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E + V_0 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)^2}{\hbar}}$$

was jetzt zu tun bleibt, sind die oben erwähnten Randbedingungen auszuwerten. Die Lösung muss auch an der Potentialgrenze stetig und stetig differenzierbar sein. Dies können wir schreiben als:

$$\left. \frac{1}{\psi_I(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_I(x) \right|_{\pm a} = \left. \frac{1}{\psi_A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_A(x) \right|_{\pm a}$$

Unser gesamtes Problem ist spiegelsymmetrisch bzgl. $P : x \rightarrow -x$. Deshalb können wir auch unsere Lösungen separieren in symmetrische und antisymmetrische Lösungen.

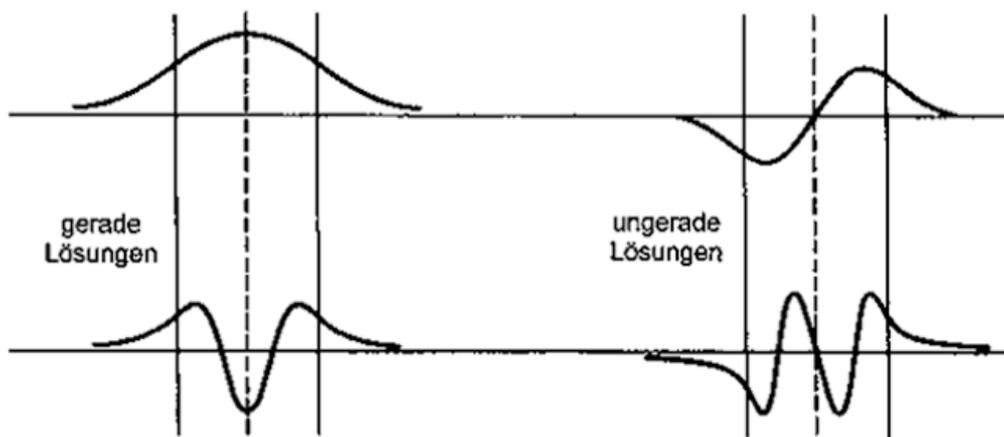


Abbildung 1.1: Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion

1. Für die symmetrische Lösung muss gelten: $C_1 = C_2$ und die Kosinusfunktion beschreibt den Innenraum. Dann ergibt unsere Randbeingung:

$$-\kappa = -k \frac{\sin(ka)}{\cos(ka)} \Rightarrow \kappa = k \cdot \tan(ka)$$

Führen wir nun die Beziehung $\lambda = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$ und $y = ka$ ein so ergibt sich die Bedingung

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan(y)$$

Diese Gleichung können wir graphisch lösen (s. Abbildung 1.2)

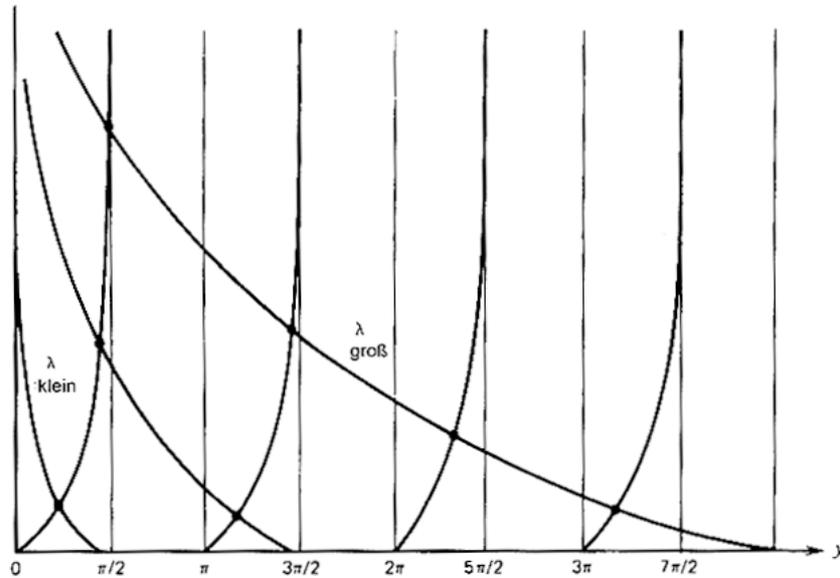


Abbildung 1.2: Graphische Lösung für den symmetrischen Fall

Die Schnittpunkte sind die richtigen Lösungen für das Problem. $|E| = -V_0 \left(1 - \frac{y^2}{\lambda}\right)$ Man sieht, dass es nur diskrete Energien gibt. Dies liegt daran, dass wir unser Teilchen durch die Bedingung $E < 0$ im Potentialtopf eingesperrt haben. Auffällig ist auch, dass je Größer λ ist, desto mehr Schnittpunkte gibt es. Je tiefer wir also den Topf machen oder je breiter wir ihn machen, desto mehr Bindungsenergien erhalten wir. Auffällig ist auch, dass es, egal wie der Topf aussieht, immer mindestens einen gebundenen Zustand gibt. Dies gilt allerdings nicht unbedingt in höheren Dimensionen.

Nimmt man nun an, dass das Potential sehr klein ist und auch die Breite des Topfes klein ist, so gibt es nur einen gebundenen Zustand mit sehr kleiner Bindungsenergie. Man kann dann näherungsweise schreiben: $\tan(y) \approx y$ und E berechnen.

2. Für die antisymmetrische Lösung muss gelten: $C_1 = -C_2$ und die Sinusfunktion beschreibt den Innenraum. Dann ergibt unsere Randbedingung:

$$-\kappa = k \frac{\cos(ka)}{\sin(ka)} \Rightarrow \kappa = -k \cdot \cot(ka)$$

Mit genau der gleichen Vorgehensweise wie im symmetrischen Fall erhält man den Graphen 1.3.

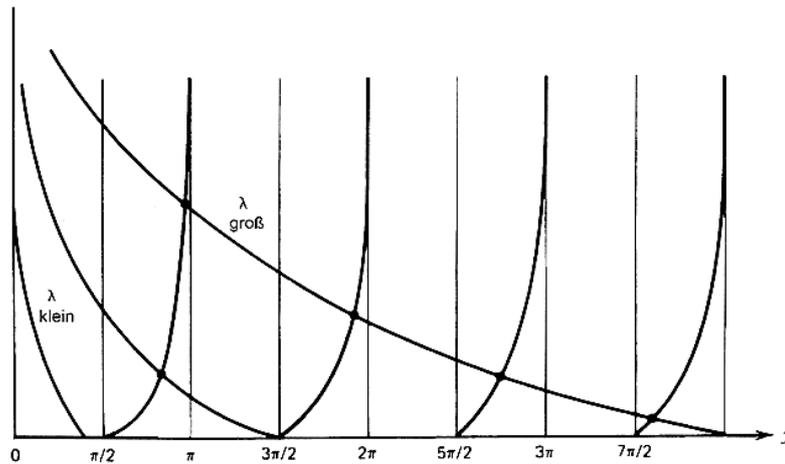


Abbildung 1.3: Graphische Lösung für den antisymmetrischen Fall

Hier gibt es nicht unbedingt einen Schnittpunkt, sondern nur wenn:

$$\sqrt{\lambda - \pi^2/4} > 0 \Rightarrow \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

Durch Zusammenbringen der beiden Lösungen erhalten wir also alle möglichen Bindungsenergien und die dazugehörigen Wellenfunktionen. Für $E > 0$ ist das Problem natürlich auch lösbar, allerdings finden wir dann durch die Randbedingung keine Quantisierungsbedingung, denn das Teilchen ist ja frei.

1.3 Die Potentialbarriere und das Tunnelphänomen

Wir betrachten nun ein Potential der Form:

$$V(x) = V_0\Theta(a - |x|) \text{ mit } V_0 > 0$$

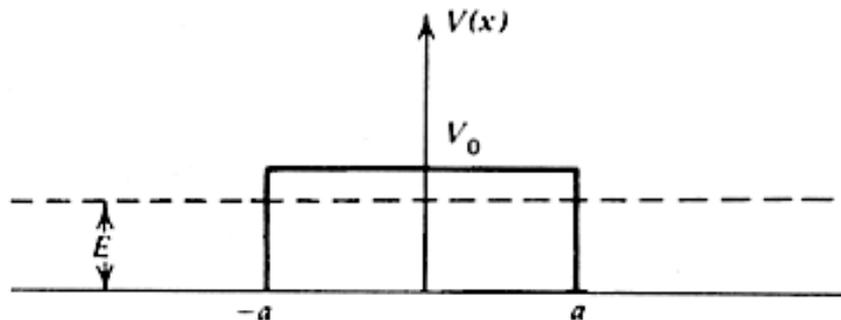


Abbildung 1.4: kastenförmige Potentialbarriere

Außerdem soll $0 < E < V_0$ gelten. Klassisch kann ein Teilchen, das von links auf die Barriere trifft, diese nicht überwinden, quantenmechanisch funktioniert das aber schon. Wir setzen einfach wieder Exponentialfunktionen für den Außen- und Innenraum an:

$$\begin{aligned}\psi_{A1}(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_I(x) &= Ce^{\kappa kx} + De^{-\kappa kx} \\ \psi_{A2}(x) &= Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}\end{aligned}$$

wobei wieder gilt:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{und} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

Nun müssen wieder die Randbedingungen bei a und $-a$ angesetzt werden. Daraus ergeben sich vier Gleichungen. A setzen wir als bekannt an. Außerdem muss $G = 0$ gelten, denn im Unendlichen wird die Welle nicht reflektiert. Jetzt kann das Gleichungssystem gelöst werden, wobei wir uns diese Rechnung ersparen, da sie etwas mühselig ist. Am Ende interessiert nur, was durch die Barriere durchkommt, und was reflektiert wird:

$$\begin{aligned}A &= F \left(\cosh(2\kappa a) + \frac{i}{2} \epsilon \sinh(2\kappa a) \right) e^{2ika} \\ B &= F \left(-\frac{i}{2} \epsilon \sinh(2\kappa a) \right) \\ \epsilon &= \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)\end{aligned}$$

Wir definieren nun den *Transmissions-Koeffizienten* T und *Reflexions-Koeffizienten* R :

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right) \sinh^2(2\kappa a)} \quad (1.19)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (1.20)$$

Er gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen die Potentialbarriere überwindet. Um das Vorgehen noch besser zu beschreiben führen wir den quantenmechanischen Strom \mathbf{j} ein. Er ist definiert als:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = -i \frac{\hbar}{2m} (\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t)) \quad (1.21)$$

Da $-i\hbar\nabla = \mathbf{p}$ gilt sowie $\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)$ (Wahrscheinlichkeitsdichte) ist der Strom definiert als:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}\rho(\mathbf{r}, t) \quad (1.22)$$

Wobei \mathbf{v} die Teilchengeschwindigkeit ist. Außerdem gilt hier die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\dot{\rho}(\mathbf{x}, t) + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.23)$$

Mit diesen Erkenntnissen können wir jetzt wieder in unser Problem der Potentialbarriere einsteigen. Der Strom auf der linken Seite der Barriere ($x < -a$) setzt sich zusammen aus der einlaufenden und reflektierten Lösung (Koeffizienten A und B). Der Strom auf der rechten Seite ($x > a$) ergibt sich aus der transmittierten Wellenfunktion (Koeffizient F):

$$\begin{aligned}
 j_l(x, t) &= -i \frac{\hbar}{m} (|A|^2 - |B|^2) \\
 j_r(x, t) &= -i \frac{\hbar}{m} |F|^2
 \end{aligned}
 \tag{1.24}$$

Wir haben es hier mit einem stationären Problem zu tun. $\dot{\rho}(x, t) = 0$ wie einfach gezeigt werden kann. Folglich gilt, dass j konstant sein muss. Damit gilt $j_l(x, t) = j_r(x, t)$. Dividieren wir beide Seiten durch $|A|^2$ ergibt sich die wohl schon bekannte Relation

$$R = 1 - T \tag{1.25}$$

In der Natur hat man es selten mit einer so einfachen Potentialbarriere zu tun, sondern vielmehr mit irgendwelchen Funktionen $V(x)$. Hier ist das Tunnelproblem nicht exakt lösbar. Wir können aber 1.19 nähern, indem wir hohe ($V_0 \gg E$) und breite ($\kappa a \gg 1$) annehmen. Dann können wir $\sinh^2(2\kappa a)$ durch $\frac{1}{4}e^{4\kappa a} \gg 1$ annähern und erhalten für T:

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \exp\left(-\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \tag{1.26}$$

dann gilt mit $V_0 \gg E$:

$$\begin{aligned}
 \ln(T) &\approx -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \\
 \Rightarrow \ln(T) &\approx -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(V(x) - E)}
 \end{aligned}
 \tag{1.27}$$

wobei $2a$ durch dx ersetzt wurde und x_1 bzw. x_2 die Schnittpunkte der Energie E des Teilchens mit $V(x)$ sind.

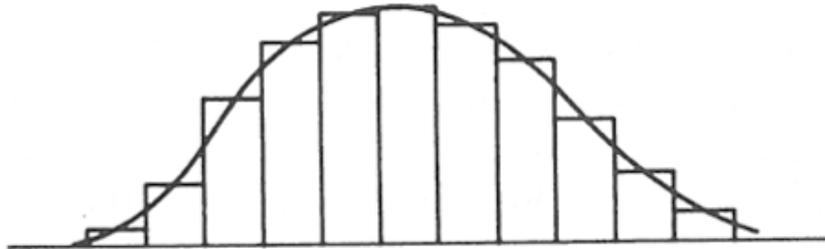


Abbildung 1.5: beliebige Potentialbarriere

1.4 Der eindimensionale harmonische Oszillator

Wir betrachten nun das Problem des harmonischen Oszillators. Dabei werden wir explizit nach einer Lösung für $\psi(x)$ suchen. Man kann das ganze Problem auch eleganter angehen, indem man den Oszillator algebraisch löst. Dies wird in der Übung behandelt. Wir haben also einen Hamiltonoperator analog zur klassischen Mechanik:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (1.28)$$

Wir behandeln das Problem im Ortsraum (im Impulsraum ist dies auch möglich) wodurch die Operatoren folgende Gestalt annehmen: $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ und $\hat{x} = x$ Wir haben also eine Schrödingergleichung der Form:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.29)$$

Durch eine Variablentransformation, so dass $z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$, lautet die neue Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 + \epsilon\right)\psi(z) = 0 \quad (1.30)$$

Was passiert für große z ($z \rightarrow \infty$). Dann können wir sicherlich ϵ in 1.30 vernachlässigen. D.h. für $\psi(z)$ muss dann gelten:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\right)\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{-\frac{z^2}{2}} \quad (1.31)$$

Als exakten Lösungsansatz verwenden wir weiterhin: $\psi(z) = h(z)e^{-\frac{z^2}{2}}$

Schreiben $h(z)$ als Potenzreihe: $h(z) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m z^m$

Und setzen $\psi(z) = h(z)e^{-\frac{z^2}{2}}$ in die Differentialgleichung ein. Nach der etwas anstrengenden zweifachen Differentiation kommt man auf folgenden Ausdruck:

$$\sum_{m=2}^{\infty} a_m m(m-1)z^{m-2} - \sum_{m=0}^{\infty} a_m z^m (2m - \epsilon + 1) = 0 \quad (1.32)$$

Diese Gleichung muss für jedes z erfüllt sein, also für jede Potenz von z separat. Ein Koeffizientenvergleich ergibt dann:

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \epsilon + 1)a_m \quad (1.33)$$

Dies ist eine Rekursionsformel für a_m , d.h. aus a_0 ergeben sich a_2, a_4, a_6, \dots und aus a_1 ergeben sich a_3, a_5, a_7, \dots

$\psi(x)$ muss normierbar sein, dann muss gelten: $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)| = endlich \Rightarrow h(z)$ muss endliche Potenzreihe sein.

Beweis: angenommen $h(z)$ sei unendliche Potenzreihe: dann gilt für $m \rightarrow \infty$ $m^2 a_{m+2} = 2m a_m \Rightarrow \frac{a_{m+2}}{a_m} = \frac{2}{m}$ weiterhin gilt

$$e^{z^2} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{z^{2\nu}}{\nu!} = 1 + \dots + \frac{z^{2\nu}}{\nu!} + \frac{z^{2\nu+2}}{(\nu+1)!} \quad (1.34)$$

Setzt man nun $m = 2\nu$ dann gilt: $(\nu+1)! = (\nu+1)\nu! = \left(\frac{m}{2} + 1\right)\nu! \approx \nu! \frac{m}{2}$. D.h.:

$$e^{z^2} \approx 1 + \dots + \frac{z^{2\nu}}{\nu!} + \frac{z^{2\nu+2}}{\nu!} \frac{2}{m} + \dots \propto h(z) \quad (1.35)$$

denn man kann z.B. $a_1 = 0 = a_3 = a_5 = \dots$ setzen. Dann ist $h(z)$ sicher eine Lösung der Differentialgleichung. Und für $\psi(z)$ gilt:

$$\psi(z) \propto e^{z^2} e^{-\frac{z^2}{2}} = e^{\frac{z^2}{2}} \quad (1.36)$$

Dies ist nicht normierbar, und damit ist die Behauptung, dass $h(z)$ eine endliche Potenzreihe sein muss gezeigt.

Wir geben nun ein maximales m ($m_{max} = n$) vor, so dass $a_{n+2} = 0$ gilt und die Potenzreihe abbricht. Mit 1.33 gilt: $\epsilon = 2n + 1 = \frac{2E_n}{\hbar\omega}$. Das wichtige Endergebnis lautet:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.37)$$

Die Energien sind wie erwartet quantisiert (Teilchen ist in einem parabelförmigen Potenzial eingeschlossen), und außerdem ist die minimale Energie nicht Null sondern $\frac{1}{2}\hbar\omega$

Die normierten Eigenfunktionen sind wie folgt:

$$\psi_n(x) = h_n(x)e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad h_n(\alpha x) = \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right]^{\frac{1}{2}} H_n(\alpha x) \quad (1.38)$$

Die $H_n(y)$ sind die Hermitepolynome und haben folgende Gestalt:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^2} e^{-y^2}$$

$$H_0(y) = 1; \quad H_1(y) = 2y; \quad H_2(y) = 4y^2 - 1$$

Für die $\psi_n(x)$ gelten natürlich wieder Orthonormalität und Vollständigkeit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n(x) = \delta_{m,n} \quad \text{und} \quad \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(y) = \delta(x-y) \quad (1.39)$$

Kapitel 2

Mathematische Struktur

2.1 Überblick

Die Quantenmechanik geht allgemein davon aus, dass alle Information über physikalisch messbaren Größen in der Wellenfunktion ψ eines quantenmechanischen Zustands befindet. Diese Information erhält man durch Anwendung verschiedener mathematischer Operationen auf ψ . ψ sei dabei eine Lösung der Schrödingergleichung (Formel 2.1) mit dem Hamiltonoperator H .

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad (2.1)$$

Diese Gleichung erhält man wenn man einfach die Gesamtenergie eines Systems bildet: $E = T + V$ mit der kinetischen Energie T und der potentiellen Energie V . Dann führt man die kanonische Quantisierung durch d.h. wir malen auf jeden Buchstaben ein Dach und definieren die Größe als quantenmechanischen Operator. Wichtig sind hierbei v.a. Impuls und Energie (Drehimpuls, ... später):

$$E \mapsto \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \mathbf{p} \mapsto \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig, können wir für ψ einen Produktansatz wählen mit einer konstanten Energie E als Ergebnis bei Anwendung des Energieoperators $\hat{E}\psi_i = E_i\psi_i = \hat{H}\psi_i$. Aus der linearen Algebra erkennen wir, dass eine solche Operation eine Eigenwertgleichung darstellt. D.h. dass die Anwendung eines Operators (= Operator ist eine Abbildung) auf ein Objekt das gleiche Objekt reproduziert, bis auf eine multiplikative Konstante. Ein fundamentales Axiom der Quantenmechanik ist, dass der Wert von Observablen, also messbare Größen, immer nur der Eigenwert zu einem entsprechenden Operator ist. Da messbare Größen reell sein müssen, kommen nur sog. hermitesche Operatoren in Frage.

2.2 Vektorräume und Operatoren

Eigenwertgleichungen kennt man aus der linearen Algebra. Wir haben außerdem in vorherigen Betrachtungen schon gesehen, dass z.B. die Überlagerung (Addition) von Wellenfunktionen (Wellenpakete) wiederum eine Wellenfunktion darstellen. Insgesamt kann man Betrachtungen anstellen, dass der Funktionenraum der möglichen Lösungen ψ der SG ein Vektorraum ist. Dieser Raum von Funktionen erfüllt also die Vektorraumeigenschaften. Genauer gesagt es ist ein Hilbertraum (vollständiger Vektorraum mit Skalarprodukt). Das Skalarprodukt für $\psi(\mathbf{x})$ und $\phi(\mathbf{x})$ ist definiert als

$$(\phi, \psi) := \int d^3x \phi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad (2.2)$$

(Ist eine allgemeine Definition eines Skalarprodukts für Funktionenräume, hat die Eigenschaften eines Skalarprodukts, $\phi^*(\mathbf{x})$ ist komplex konjugiert) In einem Hilbertraum können Operatoren \hat{O} definiert werden, die einen Vektor auf einen anderen abbilden. Lineare Operatoren haben die Eigenschaft

$$\hat{O}\left(\sum_i \lambda_i \psi_i\right) = \sum_i \lambda_i \hat{O}\psi_i$$

Zu Operatoren der QM kann man die konjugierten Operatoren einführen \hat{O}^+ . Diese besitzen folgende Eigenschaft:

$$(\phi, \hat{O}^+ \psi) = \int d^3x \phi^*(\mathbf{x}) \hat{O}^+ \psi(\mathbf{x}) = \int d^3x (\hat{O}\phi(\mathbf{x}))^* \psi(\mathbf{x}) = (\hat{O}\phi, \psi)$$

Da in der QM nur reelle Erwartungswerte von Operatoren Sinn machen können wir schreiben.

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \langle \hat{O} \rangle^* = (\psi, \hat{O}\psi)^* = \left(\int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \hat{O}\psi(\mathbf{x}) \right)^* = \\ &= \int d^3x (\hat{O}\psi(\mathbf{x}))^* \psi(\mathbf{x}) = (\hat{O}\psi, \psi) = (\psi, \hat{O}\psi) \end{aligned}$$

Wir sehen also $\hat{O}^+ = \hat{O}$. Ein hermitescher Operator ist also gleich sein konjugierter. Hermitesche Operatoren \hat{A} haben folgende Eigenschaften:

- $(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\phi, \psi)$
- Normierte Eigenfunktionen ψ_i zu hermiteschen Operatoren sind orthogonal: $(\psi_i, \psi_j) = \delta_{i,j}$
- Die Eigenfunktionen bilden eine vollständige Basis für den Hilbertraum
- Für hermitesche Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ gilt: $(\hat{A}\hat{B}\hat{C} \dots)^+ = \dots \hat{C}^+ \hat{B}^+ \hat{A}^+$
- Wenn verschiedenen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ miteinander kommutieren d.h. $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, usw. (denke dir immer die Anwendung auf einen Zustand dahinter), so existiert eine gemeinsame Basis des Hilbertraums, dessen Elemente simultane Eigenfunktionen zu den Operatoren sind.

2.3 Zeitabhängigkeit von Operatoren in der QM

Wir wollen nun gleich eine Anwendung von Operatoren betrachten: die zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten.

$$\langle \hat{A} \rangle_t = (\phi(\mathbf{x}, t), \hat{A}\psi(\mathbf{x}, t)) := \int d^3x \phi^*(\mathbf{x}, t) \hat{A}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.3)$$

dann ist

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{d}{dt} (\psi, \hat{A} \psi) = \\
& = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi, \hat{A} \psi \right) + (\psi, \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) \psi) + (\psi, \hat{A} \frac{\partial}{\partial t} \psi) = \\
& = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t + \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi, \hat{A} \psi \right) + (\psi, \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi) = \\
& = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi, \hat{A} \psi) - \frac{i}{\hbar} (\psi, \hat{A} \hat{H} \psi) = \\
& = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} (\psi, \hat{H} \hat{A} \psi) - \frac{i}{\hbar} (\psi, \hat{A} \hat{H} \psi) = \\
& = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t
\end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\tag{2.5}$$

Falls \hat{A} also zeitunabhängig ist, ist die zeitliche Änderung also nur durch den Kommutator von \hat{A} und \hat{H} gegeben. Falls \hat{A} mit \hat{H} kommutiert ist die Observable also eine Erhaltungsgröße.

Kapitel 3

Abstraktere Formulierung der QM

3.1 Dirac Notation

Wie im vorherigen Abschnitt gesehen, können wir Aussagen in der QM treffen, ohne jeweils die explizite Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ im Ortsraum zu betrachten. Wir haben gesehen, dass der Zustand ψ eigtl. ein Vektor in einem Hilbertraum ist. Also ist die explizite Darstellung ψ von der gewählten Basis abhängig, wir können sie z.B. auch im Impulsraum vonehmen. Zustände ψ wollen wir im Folgenden nur noch mit $|\psi\rangle$ bezeichnen (Ket). Außerdem noch das umgedrehte Bra $\langle\psi|$. Das Skalarprodukt (ψ_n, ψ_m) der orthogonalen Eigenzustände des Hamiltonoperators zu den Energieeigenwerten E_n und E_m wird dann zu einem einfachen aneinanderhängen von Bra und Ket (\leftrightarrow Bra-(c)ket):

$$\langle m|n\rangle := \int d^3x \psi_m^*(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}) = \delta_{m,n} \quad \text{allg.} \quad (\phi, \psi) \rightarrow \langle\phi|\psi\rangle \quad (3.1)$$

Zustände ψ_i werden außerdem abgekürzt durch die Quantenzahl i . Im Prinzip ändern wir nur die Schreibweise des Skalarprodukts ein wenig ab. Operatoren werden einfach in die Mitte geschrieben (Wirkung auf den Ket) oder in den jeweiligen Bra bzw. Ket. Man kann zeigen, dass für gebundene Systeme immer abzählbar unendlich viele diskrete Eigenzustände $|n\rangle$ des Hamiltonoperators existieren. Für nicht gebundene sind die Eigenwerte kontinuierlich. Im Folgenden beschränken wir uns auf gebundene Zustände. Die Eigenzustände sind orthogonal (vgl. 3.1) und vollständig. D.h. wir können jeden Zustand $|\psi\rangle$ als Linearkombination der Basiszustände $|n\rangle$ schreiben, anders ausgedrückt wir entwickeln den Vektor $|\psi\rangle$ nach einer vollständigen Orthogonalbasis $\{|n\rangle\}$ des entsprechenden Vektorraums.

Betrachte

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle \quad (3.2)$$

$$\langle m|\psi\rangle = \sum_n C_n \langle m|n\rangle \quad \underbrace{\quad}_{(3.1)} \quad C_n \quad \underbrace{\quad}_{(3.2)}$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad (3.3)$$

$$(3.4)$$

Dies muss für jedes $|\psi\rangle$ gelten und deshalb ist

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1} \quad (3.5)$$

$\mathbf{1}$ ist hierbei die Identität. Diese kann überall eingeschoben werden, ohne dass etwas verändert wird. Formel (3.5) nennt man Vollständigkeitsrelation. In einer Basis, die nicht abzählbar viele Basisvektoren besitzt (z.B. Impulseigenzustände) wird (3.5) zu

$$\int dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1} \quad (3.6)$$

Betrachten wir noch die Eigenschaft des Projektionsoperators P_n

$$P_n := |n\rangle \langle n|$$

$P_n |\psi\rangle$ projiziert eine Wellenfunktion $|\psi\rangle$ mit einer Wahrscheinlichkeit $|\langle n|\psi\rangle|^2$ auf den Zustand $|n\rangle$. Dies ist doch eine sehr nützliche Erkenntnis, da wir wissen, dass eine Messung ein System in einen Eigenzustand projiziert. Und dies mit eben dieser Wahrscheinlichkeit. Wir können den Hamiltonoperator auch als eine Summe aus Projektionsoperatoren schreiben. Nach Gleichung 3.5 können wir auf beide Seiten des Hamiltonoperators einfach eine $\mathbf{1}$ schreiben. Es gilt:

$$\hat{H} = \sum_{m,n} |m\rangle \langle m| \hat{H} |n\rangle \langle n| = \sum_{m,n} E_n \delta_{mn} |m\rangle \langle n| = \sum_n E_n |n\rangle \langle n| = \sum_n E_n P_n \quad (3.7)$$

3.2 Vergleich mit Matrizen

Um uns ein besseres Bild machen zu können, betrachten wir normalen Vektorraum aus unendlich dimensionalen Vektoren, bei dem wir Spalten- und Zeilenvektoren unterscheiden. Ein Spaltenvektor \mathbf{a} habe folgende Darstellung:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Entsprechend die komplex konjugierten Zeilenvektor als \mathbf{a}^+

$$\mathbf{a}^+ = (a_1^*, a_2^*, a_3^*, \dots) \quad (3.9)$$

Wir erkennen leicht die Vektorraumeigenschaften Linearität usw. Man kann ein positiv definites Skalarprodukt definieren:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) := \sum_n a_n^* b_n = \mathbf{a}^+ \mathbf{b} \quad (3.10)$$

Wir sehen außerdem, wie wir eine orthonormierte Basis \mathbf{e}^n wählen können z.B.

$$\mathbf{e}^n := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Mit dem Wert 1 in der n-ten Komponente. Analog für den Raum der Zeilenvektoren. Bei diesen Betrachtungen sollte auffallen, dass diese ganzen Eigenschaften genau gleich sind, wie bei den Kets ($\hat{=}\mathbf{a}$) und Bras ($\hat{=}\mathbf{a}^+$). Die Basis ($\{\mathbf{e}^n\}$) entspricht der Basis ($\{|n\rangle\}$). Aus der Linearen Algebra weiß man, dass lineare Abbildungen als Matrix dargestellt werden können. Da in der Quantenmechanik alle Operatoren linear sind, können wir also analog folgern, dass diese Operatoren nun als Matrizen dargestellt werden können.

Wir können noch ein bisschen weiter gehen und uns die Ket- und Bra-Zustände nun nicht mehr nur als Vektoren vorstellen, sondern ebenfalls das Bild der Matrizen wählen. Ein Spaltenvektor (Ket) ist nun einfach als Matrix mit nur einer Spalte zu betrachten. Ein Zeilenvektor (Bra) als Matrix mit nur einer Zeile. In diesem Bild müssen wir auch nicht mehr ein Skalarprodukt definieren, sondern wenden einfach die Rechenregeln für Matrizen an. Eine Matrix \mathbf{M} kann durch ihre Einträge $M_{m,n}$ dargestellt werden mit der Zeile m und Spalte n. Matrixmultiplikation ist definiert als:

$$(\mathbf{A} \mathbf{B})_{m,n} = \sum_k A_{m,k} B_{k,n} \quad (3.11)$$

Wir werden darauf noch näher in den Übungen und bei der Behandlung des Spins eingehen.