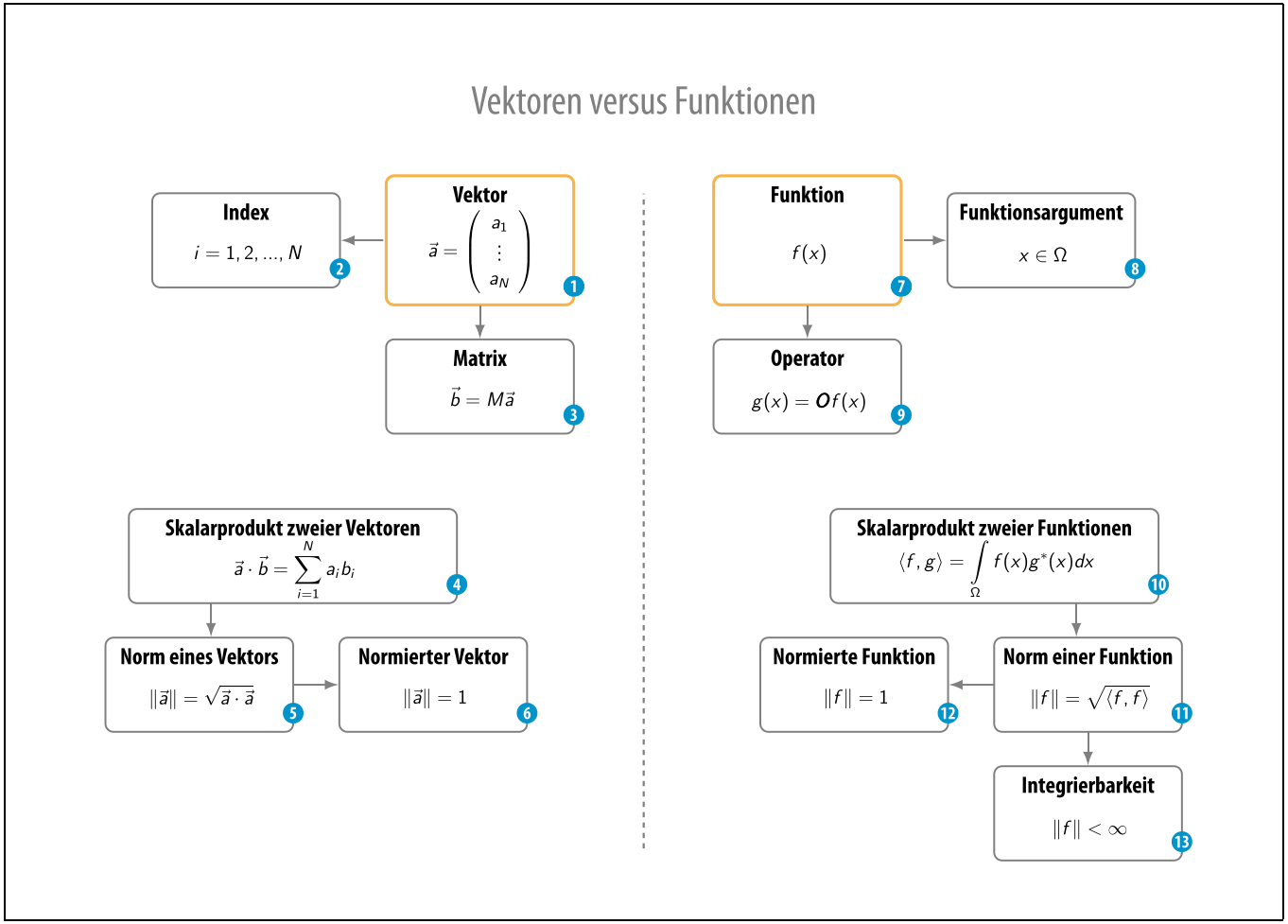
Gebrauchsanleitung



Eine Doppelseite besteht aus einer Formelseite und einer Textseite. Die Formelseite zeigt die Concept-Maps und hat eine Überschrift. Die Concept-Maps bestehen aus den Formel-Boxen und deren Verbindungen. **Boxen mit Titeln** enthalten Ausgangspunkte und Ergebnisse. Zwischenergebnisse werden in Boxen ohne Titel dargestellt. Wichtige Ausgangspunkte und Ergebnisse werden mit einem **gelben Rahmen** gekennzeichnet. Ein Pfeil zwischen zwei Boxen steht für einen Zusammenhang zwischen den Formeln, der im Text erklärt wird. Gestrichelte Linien sollen Analogien betonen. Die Lesereihenfolge wird durch die Nummerierung 3 der Boxen vorgegeben.

Mathematisch gesehen transformiert ein Operator eine Funktion in neue Funktion. Um Operatoren besser zu verstehen, fassen wir auf dieser Seite die Analogien mit Matrizen zusammen.

1. Ein Vektor ordnet jedem Index i, einer natürlichen Zahl, eine Komponente a_i zu. Hier nehmen wir an, dass die Komponenten reelle Zahlen sind.
2. Der Index i ist von 1 bis N definiert.
3. Eine Matrix M transformiert einen Vektor $\vec{a}$ in einen neuen Vektor $\vec{b}$.
4. Das Skalarprodukt für Vektoren ist eine mathematische Verknüpfung, die zwei Vektoren eine Zahl zuordnet. Hier werden paarweise die Komponenten mit gleichen Indizes multipliziert und dann aufsummiert.
5. Die Norm eines Vektors ist die Wurzel des Skalarprodukts des Vektors mit sich selbst.
6. Ein normierter Vektor hat die Norm 1.
7. Eine Funktion ordnet jedem Funktionsargument x, einer reellen oder komplexen Zahl, einen Funktionswert $f(x)$ zu.
8. Das Funktionsargument x hat einen Definitionsbereich Ω.
9. Ein Operator $\boldsymbol{O}$ transformiert eine Funktion $f(x)$ in eine neue Funktion $g(x)$. Einfache Beispiele für Operatoren sind die Ableitung d/dx oder die Multiplikation mit x.
10. Das Skalarprodukt für Funktionen ist eine mathematische Verknüpfung, die zwei Funktionen eine Zahl zuordnet. Hier werden die beiden Funktionen multipliziert, wobei eine Funktion komplex konjugiert wird. Danach folgt eine Integration über den Definitionsbereich.
11. Die Norm einer Funktion ist die Wurzel des Skalarprodukts der Funktion mit sich selbst.
12. Eine normierte Funktion hat die Norm 1.
13. Wir bezeichnen eine Funktion als quadratisch integrierbar, falls die Norm der Funktion endlich ist.

Anmerkung 1:
Das Skalarprodukt für Funktionen hat folgende Eigenschaften, die sich direkt aus seiner Definition ergeben: ✎

- $\langle f, g\rangle = \langle g, f\rangle^*$
- $\langle f, c_1 g_1 + c_2 g_2\rangle = c_1 \langle f, g_1\rangle + c_2 \langle f, g_2\rangle$
- $\langle c_1 g_1 + c_2 g_2, f\rangle = c_1^* \langle g_1, f\rangle + c_2^* \langle g_2, f\rangle$
- $\langle f, f\rangle \geq 0$

Hier sind f, g, g_1 und g_2 Funktionen. c_1 und c_2 sind im Allgemeinen komplexe Zahlen. Das Skalarprodukt für Vektoren hat analoge Eigenschaften.

Anmerkung 2:
Eine wichtige Eigenschaft des Skalarprodukts, die wir bei der Herleitung der Heisenberg-Unschärferelation nutzen werden, ist die Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$|\langle f, g\rangle|^2 \leq \|f\|^2 \|g\|^2$$

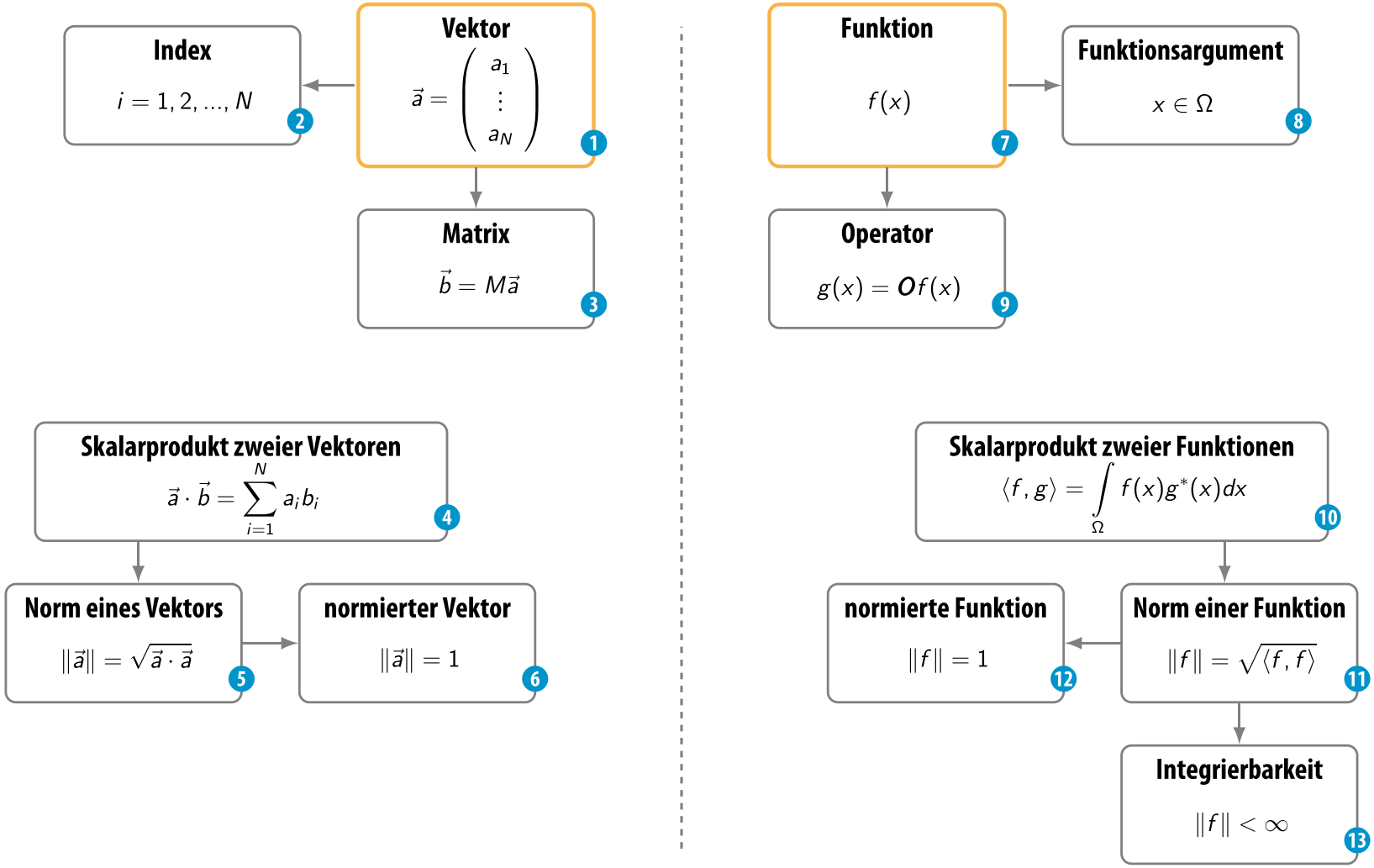
Die Textseite enthält die Erklärungen zur Formelseite. Der erste Absatz gibt einen Überblick über das Thema der Doppelseite. Die Nummerierung 3 der Formelseite wird hier aufgegriffen und der Inhalt der Box erklärt. Manche Textseiten enthalten Beispiele, **Anmerkungen** oder Diagramme, die das Thema vertiefen. Ein Bleistiftsymbol ✎ weist auf kleinere mathematische Zwischenschritte hin, die die Leserin oder der Leser als Übung in unter 5 Minuten selbst nachrechnen kann.

Liste der verwendeten Formelzeichen

h	Planck-Konstante
$\hbar$	reduzierte Planck-Konstante
i	imaginäre Einheit
$\vec{x}$	Ortsvektor in drei Raumdimensionen
$\psi(x)$	Wellenfunktion in einer Dimension
$\psi(\vec{x})$	Wellenfunktion in drei Dimensionen
$V(x)$	Potenzial in einer Dimension
$V(\vec{x})$	Potenzial in drei Dimensionen
$\boldsymbol{O}$	allgemeiner Operator
$\boldsymbol{H}$	Hamilton-Operator
$\boldsymbol{x}$	Ortsoperator in einer Dimension
$\boldsymbol{p}$	Impulsoperator in einer Dimension
$\vec{\boldsymbol{x}}$	Ortsoperator in drei Dimensionen
$\vec{\boldsymbol{p}}$	Impulsoperator in drei Dimensionen
$\vec{\boldsymbol{L}}$	Drehimpulsoperator in drei Dimensionen
$\vec{a} \cdot \vec{b}$	Skalarprodukt zweier Vektoren
$\langle f, g \rangle$	Skalarprodukt zweier Funktionen
$\lVert \vec{a} \rVert$	Norm eines Vektors $\vec{a}$
$\lVert f \rVert$	Norm einer Funktion f
$[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]$	Kommutator zweier Operatoren
$\{f, g\}$	Poisson-Klammer zweier Funktionen
$\lvert z \rvert$	Norm einer komplexen Zahl z
$\mathrm{Re}(z)$	Realteil einer komplexen Zahl z
$\mathrm{Im}(z)$	Imaginärteil einer komplexen Zahl z
$\delta(x)$	Dirac-Funktion mit dem Argument x
δ_{mn}	Kronecker-Delta
Δ	Laplace-Operator
$\lvert \psi \rangle$	Bra
$\langle \psi \rvert$	Ket
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
I	Einheitsmatrix
$A^\dagger$	hermitesch konjugierte Matrix zur Matrix A
$\boldsymbol{O}^\dagger$	hermitesch konjugierter Operator zum Operator $\boldsymbol{O}$
A^T	transponierte Matrix zur Matrix A
$\det(A)$	Determinante der Matrix A
$\mathrm{tr}(A)$	Spur der Matrix A

Kapitel 1
Mathematische Grundlagen

Vektoren versus Funktionen



Mathematisch gesehen transformiert ein Operator eine Funktion in eine neue Funktion. Um Operatoren besser zu verstehen, fassen wir auf dieser Seite die Analogien mit Matrizen zusammen.

1. Ein Vektor ordnet jedem Index i, einer natürlichen Zahl, eine Komponente a_i zu. Hier nehmen wir an, dass die Komponenten reelle Zahlen sind.
2. Der Index i ist von 1 bis N definiert.
3. Eine Matrix M transformiert einen Vektor $\vec{a}$ in einen neuen Vektor $\vec{b}$.
4. Das Skalarprodukt für Vektoren ist eine mathematische Verknüpfung, die zwei Vektoren eine Zahl zuordnet. Hier werden paarweise die Komponenten mit gleichen Indizes multipliziert und dann aufsummiert.
5. Die Norm eines Vektors ist die Wurzel des Skalarprodukts des Vektors mit sich selbst.
6. Ein normierter Vektor hat die Norm 1.
7. Eine Funktion ordnet jedem Funktionsargument x, einer reellen oder komplexen Zahl, einen Funktionswert $f(x)$ zu.
8. Das Funktionsargument x hat einen Definitionsbereich Ω.
9. Ein Operator $\boldsymbol{O}$ transformiert eine Funktion $f(x)$ in eine neue Funktion $g(x)$. Einfache Beispiele für Operatoren sind die Ableitung d/dx oder die Multiplikation mit x.
10. Das Skalarprodukt für Funktionen ist eine mathematische Verknüpfung, die zwei Funktionen eine Zahl zuordnet. Hier werden die beiden Funktionen multipliziert, wobei eine Funktion komplex konjugiert wird. Danach folgt eine Integration über den Definitionsbereich.
11. Die Norm einer Funktion ist die Wurzel des Skalarprodukts der Funktion mit sich selbst.
12. Eine normierte Funktion hat die Norm 1.
13. Wir bezeichnen eine Funktion als quadratisch integrierbar, falls die Norm der Funktion endlich ist.

Anmerkung 1:

Das Skalarprodukt für Funktionen hat folgende Eigenschaften, die sich direkt aus seiner Definition ergeben: ✎

- $\langle f, g\rangle = \langle g, f\rangle^*$
- $\langle f, c_1 g_1 + c_2 g_2\rangle = c_1 \langle f, g_1\rangle + c_2 \langle f, g_2\rangle$
- $\langle c_1 g_1 + c_2 g_2, f\rangle = c_1^* \langle g_1, f\rangle + c_2^* \langle g_2, f\rangle$
- $\langle f, f\rangle \geq 0$

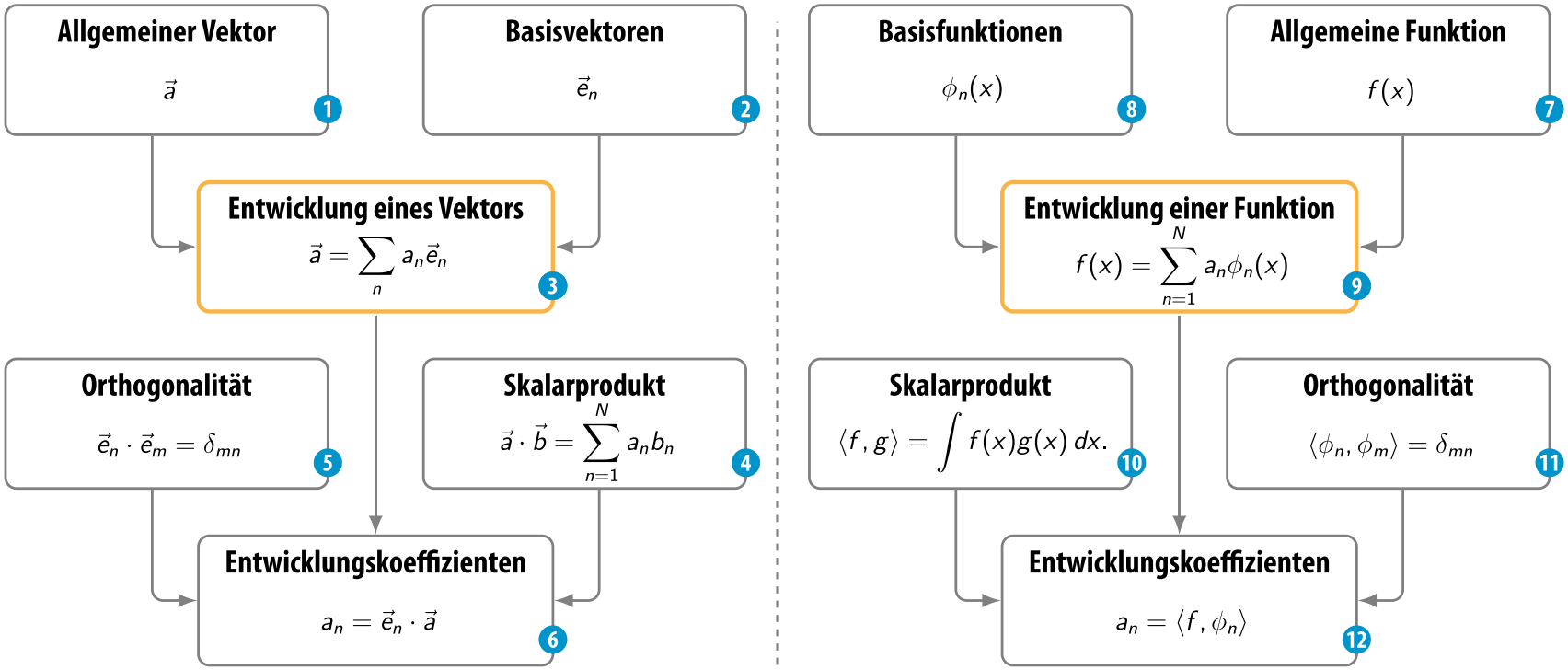
Hier sind f, g, g_1 und g_2 Funktionen. c_1 und c_2 sind im Allgemeinen komplexe Zahlen. Das Skalarprodukt für Vektoren hat analoge Eigenschaften.

Anmerkung 2:

Eine wichtige Eigenschaft des Skalarprodukts, die wir bei der Herleitung der Heisenberg-Unschärferelation nutzen werden, ist die Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$|\langle f, g\rangle|^2 \leq \|f\|^2 \|g\|^2$$

Orthogonale Vektoren versus orthogonale Funktionen



Funktionen und Vektoren können in zueinander orthogonalen Basisfunktionen und Basisvektoren entwickelt werden.

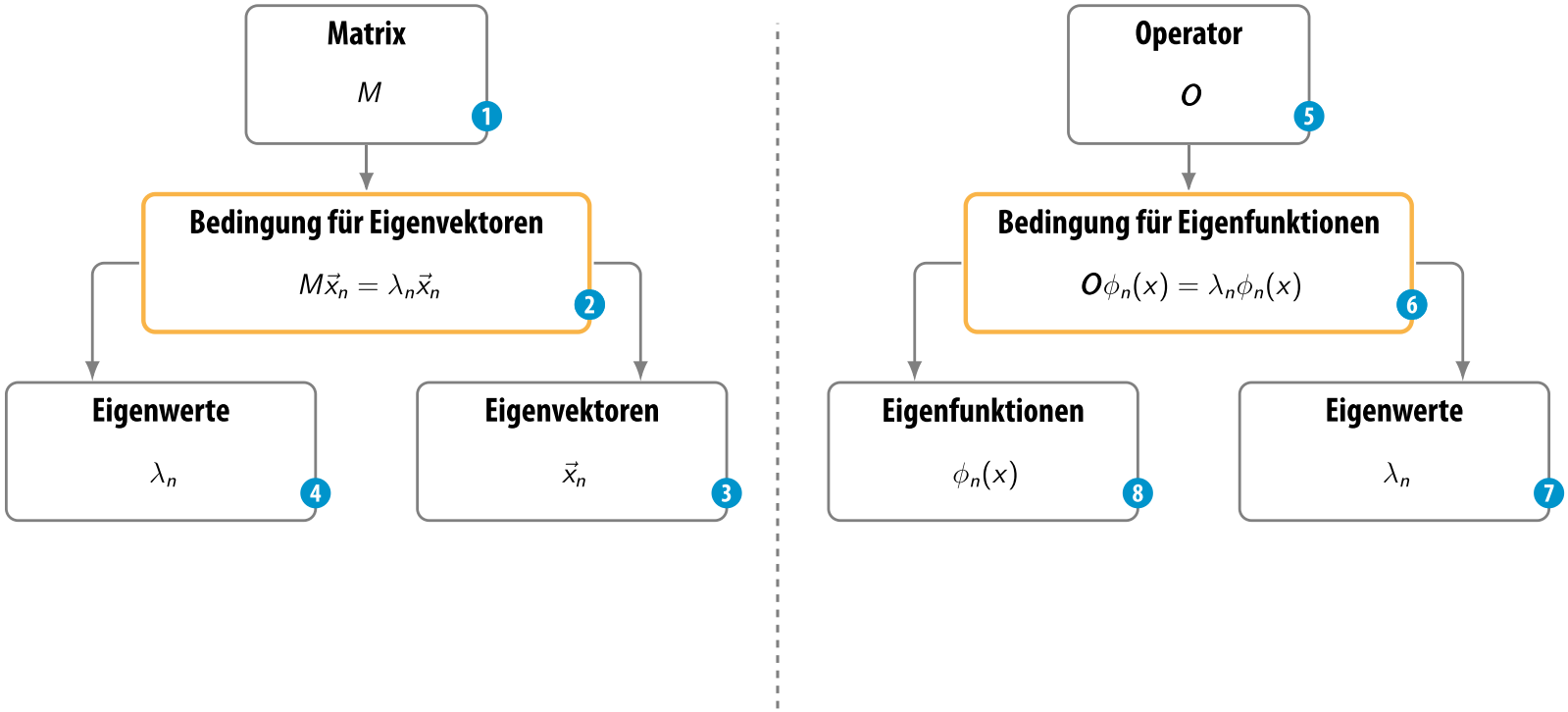
1. Wir beginnen mit einem allgemeinen Vektor $\vec{a}$ in einem N-dimensionalen Raum.
2. In diesem N-dimensionalen Raum lassen sich N Basisvektoren $\vec{e}_n$ definieren, mit deren Hilfe sich jeder Vektor in diesem Raum eindeutig als gewichtete Summe der Basisvektoren ausdrücken lässt.
3. Hier geben wir diese Summe, die auch als Entwicklung bezeichnet wird, für den Vektor $\vec{a}$ an. Die Summe läuft über $n = 1, \ldots, N$, und wir bezeichnen die Faktoren a_n als Entwicklungskoeffizienten.
4. Für den Vektorraum ist das übliche kartesische Skalarprodukt definiert.
5. Wir bezeichnen Vektoren als orthogonal zueinander, wenn ihr Skalarprodukt verschwindet. Oft werden die orthogonalen Vektoren einer Basis auch normiert, dann spricht man von orthonormalen Vektoren. Diese beiden Eigenschaften fasst man mathematisch elegant mithilfe des Kronecker-Deltas zusammen. Das Kronecker-Delta δ_{ij} ist eine Funktion zweier Variablen, i und j. Die Funktion ist 1, wenn i und j gleich sind, ansonsten ist die Funktion 0.
6. Die Entwicklungskoeffizienten a_n für einen Vektor $\vec{a}$ lassen sich mithilfe der Orthogonalität der Basisvektoren bestimmen, indem man das Skalarprodukt von $\vec{a}$ mit dem Basisvektor $\vec{e}_n$ bildet.

7 8 9 Das hier diskutierte Konzept der Orthogonalität von Vektoren lässt sich direkt auf Funktionen übertragen. An die Stelle des allgemeinen Vektors $\vec{a}$ rückt eine allgemeine Funktion $f(x)$, die in orthogonalen Basisfunktionen $\phi_n(x)$ entwickelt wird.

10 11 Wie wir auf der vorherigen Seite diskutiert haben, kann auch für Funktionen ein Skalarprodukt definiert werden und somit auch die Orthogonalität.

12. Wie bei den Vektoren ergibt sich bei den Funktionen der Entwicklungskoeffizient aus dem Skalarprodukt der jeweiligen Basisfunktion und der zu entwickelnden Funktion.

Eigenvektoren versus Eigenfunktionen



Die Grundgleichungen der Quantenmechanik führen auf sogenannte Eigenwertprobleme. Auch hier ist die Analogie zwischen Matrizen und Vektoren auf der einen Seite und Funktionen und Operatoren auf der anderen Seite eine wertvolle Hilfe.

1. Wir betrachten eine quadratische Matrix M.
2. Die Vektoren $\vec{x}_n$, die durch die Multiplikation mit der Matrix auf ein Vielfaches von sich selbst abgebildet werden, bezeichnen wir als Eigenvektoren der Matrix M. Eine Matrix mit den Dimensionen $m \times m$ hat maximal m linear unabhängige Eigenvektoren.
3. Lineare Unabhängigkeit bedeutet für eine Menge von Vektoren (und auch Funktionen), dass ein Vektor dieser Menge nicht aus einer Summe von Vielfachen der restlichen Vektoren ausgedrückt werden kann. Der Betrag der Eigenvektoren bleibt unbestimmt, deshalb sind auch Vielfache eines Eigenvektors wieder Eigenvektoren.
4. Die dazugehörigen skalaren Faktoren λ_n heißen Eigenwerte. Wir benutzen einen Index n, weil es im Allgemeinen mehrere Eigenvektor/Eigenwert-Paare gibt. Die Menge der Eigenwerte wird auch Spektrum des Operators genannt.
5. Nun betrachten wir einen Operator $\boldsymbol{O}$.
6. Analog zu den Eigenvektoren von Matrizen bezeichnen wir Funktionen, die von Operatoren auf ein Vielfaches von sich selbst abgebildet werden, als Eigenfunktionen.
7. 8. Die skalaren Faktoren λ_n werden ebenfalls als Eigenwerte bezeichnet. Besitzen zwei linear unabhängige Eigenfunktionen denselben Eigenwert, so nennen wir den Eigenwert entartet.

Beispiel 1:

Die Matrix $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ hat zwei Eigenvektoren, $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$, mit den Eigenwerten 4 und -1.

Beispiel 2:

Der Differenzialoperator $\frac{d}{dx}$ hat eine Eigenfunktion $\exp(\lambda x)$ mit dem Eigenwert λ.

https://www.springer.com/9783662594230

Quantenmechanik in Concept Maps
Wick, Michael
1. Aufl. 2019, VIII, 176 S. 88 Abb. in Farbe.
ISBN 978-3-662-59423-0