

**week3: Orts- und Impulsraum, Teil2 und
 Tensorprodukt von Hilberträumen**

Orts- und Impulsraum, d Dimensionen

Die Verallgemeinerung des eindimensionalen Setups von letzter Woche auf $d > 1$ Dimensionen ist straightforward: Ortsraum ist ein mit Gitterabstand

$$\Delta x = 1/M \tag{1}$$

diskretisierter $[-L, +L]^d$, wir schreiben

$$\Gamma_x = [-L, +L]_{\Delta x}^d := \left\{ x = (m_1, \dots, m_d)\Delta x \mid -ML \leq m_1, \dots, m_d \leq +ML \right\} \tag{2}$$

Impulsraum Γ_k ist dann eine mit

$$\Delta k = \frac{2\pi}{2L + 1/M} \tag{3}$$

diskretisierte Box $[-\pi M, +\pi M]^d$, wir schreiben

$$\Gamma_k = [-\pi M, +\pi M]_{\Delta k}^d := \left\{ k = (j_1, \dots, j_d)\Delta k \mid -ML \leq j_1, \dots, j_d \leq +ML \right\} \tag{4}$$

Es gilt

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{M} \frac{2\pi}{2L + 1/M} = \frac{2\pi}{2LM + 1} = \frac{2\pi}{\text{Anzahl Gitterpunkte pro Achse}} \tag{5}$$

oder, mit dem Phasenraum-Volumenelement $(\Delta x \Delta k)^d$,

$$(\Delta x \Delta k)^d = \frac{(2\pi)^d}{(2LM + 1)^d} = \frac{(2\pi)^d}{|\Gamma|} = \frac{(2\pi)^d}{\text{Anzahl Gitterpunkte}} \tag{6}$$

mit der Anzahl der Orts- oder Impulsraum Gitterpunkte

$$|\Gamma| := (2LM + 1)^d = |\Gamma_x| = |\Gamma_k| \tag{7}$$

Der Laplace-Operator auf Γ_x ist dann gegeben durch

$$\Delta^{\Gamma_x} f := \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right)^{\Gamma_x} f \tag{8}$$

mit den diskretisierten zweiten Ableitungen mit periodischen Randbedingungen

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)^{\Gamma_x} f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d) &:= (D_{i,pc}^2 f)(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d) \\ &= \frac{f(x_1, \dots, x_i+2\Delta x, \dots, x_d) + f(x_1, \dots, x_i-2\Delta x, \dots, x_d) - 2f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d)}{(2\Delta x)^2} \end{aligned} \quad (9)$$

Es gilt dann die folgende d-dimensionale Verallgemeinerung des Theorem 2.1 vom letzten Mal:

Theorem 2.2: Die ebenen Wellen $\{e_k\}_{k \in \Gamma_k}$ gegeben durch $e_k : \Gamma_x \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$e_k(x) := \frac{1}{|\Gamma_x|^{1/2}} e^{i k \cdot x} \quad (10)$$

sind eine ONB von

$$L^2(\Gamma_x) = \mathbb{C}^{|\Gamma_x|} \quad (11)$$

Sie sind $2L + \Delta x$ periodisch in jeder Koordinate und sie sind Eigenfunktionen zum diskreten Laplace-Operator (8,9) auf Γ_x mit periodischen Randbedingungen, es gilt

$$-\Delta^{\Gamma_x} e_k = \mu_k e_k \quad (12)$$

mit den Eigenwerten

$$\mu_k = \mu_{(k_1, \dots, k_d)} = \sum_{i=1}^d \left(\frac{\sin(k_i \Delta x)}{\Delta x}\right)^2 \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=1}^d k_i^2 = k^2 \quad (13)$$

Für den Normierungsfaktor in (10) gilt

$$\frac{1}{|\Gamma_x|} = \frac{(\Delta x \Delta k)^d}{(2\pi)^d} . \quad (14)$$

Tensorprodukt von Hilberträumen

Nach den Gesetzen der Quantenmechanik wird ein quantenmechanisches Teilchen durch einen Zustand in einem Hilbertraum \mathcal{H} beschrieben. Haben wir n Teilchen und wird das i -te Teilchen durch Elemente aus einem Hilbertraum \mathcal{H}_i beschrieben, dann ist das Gesamt-System durch einen Zustand

$$\psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n = \bigotimes_{i=1}^n \mathcal{H}_i \quad (15)$$

zu beschreiben. Dabei können die einzelnen \mathcal{H}_i gleich oder verschieden sein. In diesem Unterabschnitt wollen wir uns an die Definition von Tensorprodukt erinnern.

Im einfachsten Fall, ohne Spin, ist der Ein-Teilchen Hilbertraum

$$\mathcal{H} = L^2(\Gamma_x) \quad (16)$$

Im Fall von Elektronen müssen wir noch den Spin mit berücksichtigen. Ein einzelnes Elektron wird typischerweise beschrieben durch eine zweikomponentige Grösse

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x) \\ \psi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix} \quad (17)$$

mit $\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow} \in L^2(\Gamma_x)$. Eine äquivalente Beschreibung ist

$$\psi = \psi(\xi) = \psi(x, \sigma) \in L^2(\Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\}) \quad (18)$$

mit

$$\psi(x, \sigma) := \begin{cases} \psi_{\uparrow}(x) & \text{falls } \sigma = \uparrow \\ \psi_{\downarrow}(x) & \text{falls } \sigma = \downarrow \end{cases} \equiv \psi_{\sigma}(x) \quad (19)$$

In beiden Fällen ist der Ein-Teilchen Hilbertraum also von der Form

$$\mathcal{H} = L^2(\Gamma_s) \quad (20)$$

wobei das Γ_s gegeben durch

$$\Gamma_s := \begin{cases} \Gamma_x & \text{für Spin } s = 0 \\ \Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\} & \text{für Spin } s = 1/2 \end{cases} \quad (21)$$

und in beiden Fällen ist das also eine endliche Menge mit $(2s + 1) \times |\Gamma_x|$ Elementen.

Sei also Γ eine beliebige endliche Menge. Dann ist

$$L^2(\Gamma) = \left\{ \psi : \Gamma \rightarrow \mathbb{C}, \Gamma \ni x \rightarrow \psi(x) \in \mathbb{C} \right\} \quad (22)$$

Ist etwa $\Gamma = \{1, 2, 3\}$, dann ist ein $\psi \in L^2(\Gamma)$ durch die Angabe der drei Zahlen

$$\psi(1), \psi(2), \psi(3) \rightsquigarrow \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^3 \quad (23)$$

eindeutig festgelegt, wir können $L^2(\Gamma)$ mit einem $\mathbb{C}^{|\Gamma|}$ identifizieren. Da die Elemente eines \mathbb{C}^n typischerweise als Spaltenvektoren angegeben werden, die haben ein erstes, zweites, ... , n -tes Element, muss man für eine solche Identifikation für die Elemente von Γ offensichtlich eine Reihenfolge festlegen. Wenn wir also schreiben

$$L^2(\Gamma) = \mathbb{C}^{|\Gamma|} \quad (24)$$

wird die Auswahl einer konkreten Reihenfolge der Elemente von Γ immer stillschweigend vorausgesetzt. Genau genommen müsste man schreiben

$$L^2(\Gamma, \prec) = \mathbb{C}^{|\Gamma|} \quad (25)$$

wobei das \prec dann eine eindeutige Reihenfolge der Elemente von Γ festlegt.

Für die Definition eines Tensorproduktes von einem \mathbb{C}^n mit einem \mathbb{C}^m ist die Tatsache, dass die Koordinaten eine natürliche Reihenfolge haben, eigentlich eher hinderlich. Wir identifizieren

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^n &= \left\{ \psi : \{1, \dots, n\} \rightarrow \mathbb{C}, i \rightarrow \psi(i) \in \mathbb{C} \right\} \\ \mathbb{C}^m &= \left\{ \psi : \{1, \dots, m\} \rightarrow \mathbb{C}, j \rightarrow \psi(j) \in \mathbb{C} \right\}\end{aligned}\quad (26)$$

und definieren dann für beliebige endliche Mengen Γ_1 und Γ_2 das Tensorprodukt

$$L^2(\Gamma_1) \otimes L^2(\Gamma_2) := L^2(\Gamma_1 \times \Gamma_2) \quad (27)$$

mit dem üblichen kartesischen Produkt von zwei Mengen

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 := \left\{ (i, j) \mid i \in \Gamma_1, j \in \Gamma_2 \right\} \quad (28)$$

Das Tensorprodukt von zwei Elementen $\psi_1 \in L^2(\Gamma_1)$ und $\psi_2 \in L^2(\Gamma_2)$ ist dann definiert durch

$$\psi_1 \otimes \psi_2 : \Gamma_1 \times \Gamma_2 \rightarrow \mathbb{C} \quad (29)$$

$$(\psi_1 \otimes \psi_2)(i, j) := \psi_1(i) \psi_2(j) \quad (30)$$

Wegen

$$|\Gamma_1 \times \Gamma_2| = |\Gamma_1| \cdot |\Gamma_2| \quad (31)$$

bekommen wir dann mit der Identifikation (24)

$$\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m = L^2(\{1, \dots, n\}) \otimes L^2(\{1, \dots, m\}) \quad (32)$$

$$\stackrel{(27)}{=} L^2(\{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, m\}) \quad (33)$$

$$\stackrel{(24)}{=} \mathbb{C}^{|\{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, m\}|} = \mathbb{C}^{nm} \quad (34)$$

Was bei der ersten Begegnung mit Tensorprodukt immer ein bisschen gewöhnungsbedürftig ist, ist die Tatsache, dass es nicht Bestandteil der Definition ist, eine genaue Reihenfolge für die Elemente von $\{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, m\}$ festzulegen. Also ob man etwa

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (35)$$

mit

$$\begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \end{pmatrix} \quad (36)$$

oder mit

$$\begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_2 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_2 \end{pmatrix} \quad (37)$$

identifiziert, bleibt sozusagen dem user überlassen. In beiden Fällen ist das dieselbe Funktion, die etwa dem Element $(2, 1) \in \{1, 2\} \times \{1, 2\}$ die Zahl $a_2 b_1$ zuordnet. Solange man nur mit Funktionen rechnet und nicht etwa Matrix angewendet auf Vektor macht, muss man eine genaue Reihenfolge auch nicht wissen. Vielleicht bemerken wir dazu noch, dass das sogenannte Kroenecker-Produkt von Matrizen, das tut das Kroenecker-Produkt von Vektoren als Spezialfall mit enthalten, eine konkrete Reihenfolge der Koordinaten festlegen tut. Das Resultat von (35) wäre da (36), nicht (37).

Schliesslich wollen wir noch bemerken, dass nicht jedes Element in, sagen wir,

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \tag{38}$$

von der Form

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{39}$$

ist, sondern im Allgemeinen eine Linearkombination von

$$e_1 \otimes e_1, \quad e_1 \otimes e_2, \quad e_2 \otimes e_1, \quad e_2 \otimes e_2 \tag{40}$$

ist, wenn $e_1 = (1, 0)$ und $e_2 = (0, 1)$ die Standardbasis in \mathbb{C}^2 bezeichnet (hier für den Moment mal als Zeilenvektoren geschrieben). So lässt sich etwa der Vektor

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \end{pmatrix} \tag{41}$$

nicht als ein einzelnes Produkt schreiben, sondern nur als Linearkombination von Tensorprodukten.