VII Diracformulierung der Quantentheorie

Paul Dirac (1926): Quantenmechanik als Vektorraumdynamik der Wellenfunktion:

- Vektor: $\sum_i v_i(t)\,\vec{e}_i \longrightarrow \vec{v}(t)$
- in Analogie: WF $\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\varphi_n(\vec{r}) \longrightarrow |\psi(t)\rangle$ „ket"

a) Wellenfunktion: $\psi(\vec{r},t)$, $\psi(\vec{p},t)$, $\sum_n \varphi_n(\vec{r})\,c_n(t)$ $\hat{=}$ verschiedene Darstellungen

Analogie $\mathbb{R}^4$ (Vektorraum) $\longrightarrow$ $\mathcal{H}$ (Hilbertraum)

Darstellg. $\vec{v} \,\hat{=} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$ in Koordinaten $\longrightarrow$ $|\psi\rangle \,\hat{=}\, \psi(\vec{r},t)$ in Orts/Impulsdarstellung

Skalarprodukt $(\vec{v}^1, \vec{v}^2) \,\hat{=}\, \underbrace{(v_1^1, v_2^1, v_3^1)^*}_{\text{adjungierte Vektor}} \cdot \begin{pmatrix} v_1^2 \\ v_2^2 \\ v_3^2 \end{pmatrix} \longrightarrow \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \,\hat{=}\, \int d^3r\, \psi_1^*(\vec{r},t)\,\psi_2(\vec{r},t)$

„bra ket" $\hat{=}$ braket-Schreibweise

(orthonormierbare) Basis: $\vec{v} = \sum_n v_n \vec{e}_n \longrightarrow |\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$

Bsp. kartesisch $\vec{e}_n : \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$

Bsp. Raum d. quadratintegrablen Funktionen

$\vec{v} = v_1\vec{e}_1 + v_2\vec{e}_2 + v_3\vec{e}_3$

$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\, \varphi_n(\vec{r})$

b) Vollständigkeitsrelation

$$\vec{v} = \sum_n (\vec{e}_n, \vec{v})\,\vec{e}_n = \sum_n \vec{e}_n^{\,T} \cdot \vec{v}\,\vec{e}_n = \sum_n \vec{e}_n\, \vec{e}_n^{\,T} \cdot \vec{v} = \underline{1}\,\vec{v}$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle$$

Vollständigkeitsrelation im Hilbertraum: $\sum_n |n\rangle\langle n| = \underline{1}$ f. diskrete Basis

$\int dn\, |n\rangle\langle n| = \underline{1}$ f. kontinuierliche Basis

c/ Darstellung d. Zustandsvektors

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle\, |n\rangle = \sum_n c_n\, |n\rangle$$

woher kommen die $|n\rangle$'s: $\underline{\vec{r}}\,|r\rangle = \vec{r}\,|r\rangle$, $\underline{\vec{p}}\,|p\rangle = \vec{p}\,|p\rangle$

diese abstrakten Eigenwertproblem sind auf Basis v. gegebenen Kommutatorrelation lösbar

<u>wissen:</u> $\langle r|\psi\rangle = \psi(\vec{r},t)$

$\langle p|\psi\rangle = \psi(\vec{p},t)$

denn diese Koeffizienten haben wir berechnet (VL zu Eigenwertproblem)

$\langle r|p\rangle$ ist damit bestimmbar über Identität: $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$

$$\underbrace{\langle r|\psi\rangle}_{\psi(\vec{r})} = \int d^3p\, \langle r|p\rangle \underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\psi(\vec{p})} \implies \text{Zshg. ist gegeben über Fouriertransformation}$$

$$\overset{?}{\Downarrow} \quad \langle r|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

<u>d/ Skalarproduktkonsistenz:</u>

$$\int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) = \underline{\int d^3r}\, \langle\varphi\underline{|r\rangle\langle r|}\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle \quad \checkmark$$

e/ <u>Hilbertraum</u>:

bekannt: Vektorraum mit Axiomen (Bsp. R^n)

- Abgeschlossenheit (Operationen Addition / Multiplikation führt auf Element d. Raums)
- Skalarprodukt (Eigenschaften !) im Sinn der Quantentheorie
- Basis (Dimension „n")

Schrödinger theorie beruht auf Vektorraum d. quadratintegrable Funktionen mit $n \to \infty$ (Dimension ∞)

Hilbertraum = Vektorraum mit dim ∞, Parameter t (Zeit)

unproblematisch $\quad \psi(\vec{r}) = \sum_n a_n \, \varphi_n(\vec{r})$

a_n für $n \to \infty$, $a_n \to 0$

für praktische Anwendungen wird immer endliche Dimension verwendet

f/ Observable

Sind beobachtbare Größen mit reelle Eigenwerte als Messwerten

i/ Observable werden durch lineare, selbstadjungierte Operatoren beschrieben:

$\underline{L} = \underline{L}^+ \quad$ mit $\quad \underline{L} |e\rangle = e |e\rangle$, e : reell, $|e\rangle$: Basis

ii/ Spektraldarstellung: $\quad \underline{L} = \sum_e |e\rangle\langle e| \, \underline{L} \, \sum_{e'} |e'\rangle\langle e'|$

$$= \sum_{e,e'} |e\rangle\langle e'| \, \langle e|\underline{L}|e'\rangle$$

mit $\underline{L} |e'\rangle = e' |e'\rangle$

$$= \sum_{e,e'} |e\rangle\langle e'| \underbrace{\langle e|e'\rangle}_{\delta_{ee'}} e'$$

$\underline{L} = \sum_e e |e\rangle\langle e|$, $\quad |e\rangle\langle e| \hat{=}$ Operator
e Eigenwert

iii) Erwartungswerte:

$$\langle \underline{L} \rangle = \langle \psi | \underline{L} | \psi \rangle$$

zur Beachtung: Konsistenz v. Observablen mit Schrödingertheorie: $\vec{p} \to \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r$ (g)

Dynamik v. $|\psi(t)\rangle$: aus Schrödingergl. $\to$ Gl. f. $|\psi(t)\rangle = ?$ (h)

g) Observable in Ortsdarstellung

$\underline{A}$ wirkt auf $|\psi\rangle$: $|\Psi\rangle = \underline{A}\, |\psi\rangle$ $\quad \sum_{r'} \hat{=} \int d^3 r'$

$$\langle r | \Psi \rangle = \langle r | \underline{A} | \psi \rangle = \sum_{r'} \langle \vec{r} | \underline{A} | \vec{r}\,' \rangle \langle \vec{r}\,' | \psi \rangle \;\hat{=}\; \text{Wirkung eines Operators } \vec{A} \text{ im Ortsraum } \langle r | \psi \rangle$$

$\langle \vec{r} | \underline{A} | \vec{r}\,' \rangle \;\hat{=}$ Ortsdarstellung v. Operator $\underline{A}$, teste f. $\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}$

1) Ort $\underline{A} = \underline{\vec{r}}$

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \sum_{r'} \langle \vec{r} | \underline{\vec{r}} | \vec{r}\,' \rangle \langle \vec{r}\,' | \psi \rangle$$

$$= \sum_{r'} \langle \vec{r} | \vec{r}\,' \rangle \vec{r}\,' \langle \vec{r}\,' | \psi \rangle$$

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\Psi(\vec{r}) = \vec{r}\, \psi(\vec{r}) \;\hat{=}\; \text{Schrödingertheorie} \;\checkmark$$

2) Impuls $\vec{\underline{A}} = \underline{\vec{p}}$

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \sum_{r'} \langle \vec{r} | \underline{\vec{p}} | \vec{r}\,' \rangle \langle \vec{r}\,' | \psi \rangle$$

$$= \sum_{r'p} \underbrace{\langle \vec{r} | \underline{\vec{p}} | \vec{p} \rangle}_{\vec{p}\, | \vec{p} \rangle} \underbrace{\langle \vec{p} | \vec{r}\,' \rangle}_{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}\,'}{\hbar}}} \langle \vec{r}\,' | \psi \rangle$$

$$= \sum_{r'p} \vec{p} \, \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle p | \vec{r}\,' \rangle \, \psi(\vec{r}\,')$$

$$= \sum_{r'p} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \right) \langle \vec{p} | \vec{r}\,' \rangle \, \psi(\vec{r}\,')$$

$$= \sum_{r'} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle}_{\delta_{r,r'}} \psi(\vec{r}')$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \psi(\vec{r}) \quad \checkmark$$

b) Ableitung einer Zustandsgleichung

Start v. Schrödingergleichung: $\psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$, $\sum_p \hat{=} \int d^3p$

$$\underline{H}\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r\right) \langle r | \psi(t) \rangle = i\hbar \, \partial_t \langle r | \psi(t) \rangle$$

linke Seite:

$$\sum_p \underline{H}\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r\right) \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_p \underline{H}\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}} \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_p \underline{H}(\vec{r}, \vec{p}) \langle \hat{r} | \hat{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_p \langle \vec{r} | \underline{H}(\vec{r}, \vec{p}) | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_p \langle \vec{r} | \underline{H}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle r | \underline{H}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) | \psi(t) \rangle$$

vgl. mit rechter Seite: $i\hbar \, \partial_t \langle r | \psi(t) \rangle$

$$\Longrightarrow \boxed{i\hbar \, \partial_t | \psi(t) \rangle = \underline{H}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) | \psi(t) \rangle}$$

Schrödingergleichung in Dirac notation

stationär: Ansatz $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle$

$$\boxed{H(\vec{r}, \vec{p}) \, |E\rangle = E \, |E\rangle}$$

stationäre Schrödingergleichung in Dirac notation

i) Vertauschungsrelationen

müssen formuliert werden um die Theorie abzuschließen damit Eigenwerte bestimmt werden können

- Mechanik: konjugierte Variablen $\rightarrow$ $[x_i, p_j] = \delta_{ij} \hbar$

- Experiment: neue Variablen $\rightarrow$ $[s_i, s_{i+1}] = i\hbar \, s_{i+2}$

ohne klassisches Analogon

aufgrund der Vertauschungsrelationen können Eigenwerte bestimmt werden ohne in eine Darstellung zu gehen.