5. Dirac - Formalismus

5.1. Zustände

Anstelle von Wellenfunktionen $\psi(\vec{x})$ im Ortsraum oder $\psi(\vec{p})$ im Impulsraum werden Zustände allgemein (darstellungsunabhängig) durch Ket-Vektoren beschrieben:

$$|\psi\rangle$$

Hilbert-Raum (Vektorraum der gebundenen Zustände):

$$\mathcal{H} = \{ |\psi\rangle : |\psi\rangle \text{ ist normierbar} \}$$

Eigenschaften:

(1) Es existiert ein Skalarprodukt aus Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$: $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$

- $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$ "hermitesch"
- $\langle\psi_1|\psi_2+\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\left(|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle\right) = \langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|\psi_3\rangle$
  $\langle\psi_1|c\,\psi_2\rangle = c\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ "linear im ersten Argument"
- $\langle\psi_1+\psi_2|\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_3\rangle + \langle\psi_2|\psi_3\rangle$
  $\langle c\,\psi_1|\psi_2\rangle = c^*\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ "semilinear im zweiten Argument"
- $\langle\psi_1|\psi_1\rangle \geq 0$
  $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = 0$ nur falls $|\psi_1\rangle = 0$ (Nullvektor) "positiv definit"

Bemerkungen:

- Nullvektor: $0 \in \mathcal{H}$, nicht: $|0\rangle$ (Bezeichnung des Grundzustandes)!
- $\langle\psi|$ heißt "<u>Bra-Vektor</u>"
- $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow \langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ "<u>dualer Hilbert-Raum</u>"
- $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ "<u>orthogonal</u>"

(2) Norm eines Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \geq 0$$

ψ normiert : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

(3) <u>Basis</u> des Hilbert-Raums:

- $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}$ linear unabhängig mit $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i |\psi_i\rangle$

  ("Entwicklung in Basisvektoren")

- Orthonormalbasis: $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$, $i,j = 1,\ldots,N$
- $N = \dim \mathcal{H}$ "<u>Dimension</u> des Hilbert-Raums"
- Für viele physikalische Probleme ist $\dim \mathcal{H} = \infty$, d.h. es gibt (abzählbar) unendlich viele Basisvektoren

Dirac-Raum (Raum der gebundenen und Streuzustände):

- Zusätzliche Basisvektoren: $|\psi_p\rangle$ mit $p \in \mathbb{R}$ (kontinuierliche Quantenzahl)
- Orthonormalitätsbedingung: $\langle \psi_p | \psi_{p'} \rangle = \delta(p-p')$
- Entwicklung in Basisvektoren:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$$ für Hilbert-Vektoren (gebundene Zustände)

$$|\psi\rangle = \int dp \; c(p) |\psi_p\rangle$$ für Dirac-Vektoren (Streuzustände)

$$|\psi\rangle = \sum c_i |\psi_i\rangle + \int dp \; c(p) |\psi_p\rangle$$ allgemein

5.2. Lineare Operatoren

Linearer Operator A:

$$\hat{A}: \quad |\psi\rangle \rightarrow \hat{A}|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle$$

Matrixelemente von A:

$$\langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle & \\ \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_2 \rangle & \\ & & \ddots \end{pmatrix}_{ij}$$

mit $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots$ Basis von $\mathcal{H}$.

$\Rightarrow$ Lineare Operatoren beschreiben unendlichdimensionale Matrizen (falls $\dim \mathcal{H} = \infty$)

Adjungierter Operator $\hat{A}^\dagger$:

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle = \left(\langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle\right)^* \quad \text{für alle } |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$$

Eigenschaften:

- $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$
- $(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$
- $(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger$ für $c \in \mathbb{C}$
- $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$
- $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \Rightarrow \langle\phi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$

5.2.1. Hermitesche Operatoren

Hermitescher Operator ("Observable"):

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \left(\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle\right)^* = \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_i\rangle \quad \text{"selbstadjungiert"}$$

Die Matrixelemente von hermiteschen Operatoren bilden hermitesche Matrizen

2.12.19

Eigenwertgleichung:

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Eigenvektor } |\psi_a\rangle \equiv |a\rangle}}{\hat{A}\,|a\rangle} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Eigenwert}}}{a}\,|a\rangle$$

Eigenschaften:

(1) Alle Eigenwerte sind reell: $a \in \mathbb{R}$

Beweis: $\langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|a|a\rangle = a\langle a|a\rangle$ $\quad \hat{A}=\hat{A}^\dagger \Rightarrow a = a^*$

$\langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = (\langle a|\hat{A}|a\rangle)^* = a^* \langle a|a\rangle$

(2) Die Eigenvektoren bilden eine Orthonormalbasis (automatisch oder können so gewählt werden):

$$\boxed{\begin{array}{ll} \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} & \text{Orthonormiertheit} \\ \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \mathbb{1} & \text{Vollständigkeit} \end{array}}$$

Basisentwicklung eines Zustandes:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}\,|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\langle a_i|\psi\rangle}_{=:\,c_i \text{ Entwicklungskoeffizienten}} |a_i\rangle$$

Spektraldarstellung des Operators A:

$$\hat{A} = \hat{A}\,\mathbb{1} = \sum_i \hat{A}\,|a_i\rangle\langle a_i| = \sum_i a_i\,|a_i\rangle\langle a_i| \qquad \text{"Diagonalisierung von } \hat{A}\text{"}$$

(3) Falls $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ und $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$: $\quad [\hat{A},\hat{B}] = 0 \Leftrightarrow$ Es existiert eine gemeinsame Orthonormalbasis von gleichzeitigen Eigenzuständen von $\hat{A}$ und $\hat{B}$

Kommutierende Observable können gleichzeitig diagonalisiert werden.

(4) Erwartungswerte sind reell:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | \underbrace{\hat{A} | a_i \rangle}_{a_i | a_i \rangle} \langle a_i | \psi \rangle$$

$$= \sum_i a_i \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle$$

$$= \sum_i a_i \left| \langle a_i | \psi \rangle \right|^2 \in \mathbb{R} \qquad [a_i \in \mathbb{R}]$$

$\Rightarrow$ Hermitesche Operatoren beschreiben Messgrößen ("Observable")

Bemerkung: Für hermitesche Operatoren im Dirac-Raum gelten analoge Eigenschaften mit den Ersetzungen:

$$\delta_{ij} \mapsto \delta(p-p') \quad \text{und} \quad \sum_i \mapsto \int dp$$

Beispiele (Ortsraum):

(1) Ortsoperator: $\hat{\vec{r}}^\dagger = \hat{\vec{r}}$

- Eigenzustände: $\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{r}}} |\vec{r}\rangle = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Zahl}}}{\vec{r}} |\vec{r}\rangle$ mit $\langle \vec{r} | \vec{r}\,' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$

- Vollständigkeitsrelation: $\mathbb{1} = \int d^3\vec{r}\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|$

- Skalarprodukt:

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int d^3\vec{r}\, \underbrace{\langle \chi | \vec{r} \rangle}_{\stackrel{!}{=} \chi(\vec{r})} \underbrace{\langle \vec{r} | \psi \rangle}_{\stackrel{!}{=} \psi(\vec{r})} \stackrel{!}{=} \int d^3\vec{r}\, \chi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \qquad \text{[Kap. 3.6]}$$

- Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\psi^*(\vec{r}) = \langle \psi | \vec{r} \rangle$$

- Entwicklung:

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{r}\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r}\ \psi(\vec{r})\ |\vec{r}\rangle$$

⇒ Die Ortsraumwellenfunktion $\psi(\vec{r})$ beschreibt die <u>Entwicklungskoeffizienten</u> des Zustandes $|\psi\rangle$ in der Ortsoperatorbasis $\{|\vec{r}\rangle\}$

- Ortsoperator-Eigenzustände $|\vec{r}_0\rangle \equiv |\psi_{\vec{r}_0}\rangle$ in Ortsraumbasis:

$$\underbrace{\psi_{\vec{r}_0}}_{\text{Eigenwert}}(\overbrace{\vec{r}}^{\text{Ortskoordinate}}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}_0} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{r}_0 \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Check:

$$\hat{\vec{r}}\ \psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \vec{r}\ \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \vec{r}_0\ \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \vec{r}_0\ \psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \quad \checkmark$$

⇒ Die Eigenfunktionen des Ortsoperators sind Delta-Funktionen (im Ortsraum).

(2) Impulsoperator: $\hat{\vec{p}}^\dagger = \hat{\vec{p}}$

- Impulsoperator-Eigenzustände $|\vec{p}_0\rangle \equiv |\psi_{\vec{p}_0}\rangle$ in Ortsraumbasis:

$$\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{p}_0} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p}_0 \rangle = e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}$$

Denn:

$$\hat{\vec{p}}\ \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}}\ \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \vec{p}_0\ \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) \quad \checkmark$$

⇒ Die Eigenfunktionen des Impulsoperators sind ebene Wellen (im Ortsraum).

(3) Hamilton-Operator: $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$

- Eigenzustände $|\psi_n\rangle$:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Eigenwert} = \text{Energie}}}{E}\,|\psi_n\rangle \quad \leftarrow \text{Eigenzustand}$$

stationäre Schrödinger-Gleichung!

$\Rightarrow$ Die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung, wobei der jeweilige Eigenwert die Energie ist.

9.12.12

5.2.2. Unitäre Operatoren

Inverser Operator $\hat{A}^{-1}$:

Falls

$$\hat{A}: |\psi\rangle \mapsto \hat{A}|\psi\rangle =: |\chi\rangle$$ eineindeutig ("invertierbar")

dann ist

$$\hat{A}^{-1}: |\chi\rangle \mapsto \hat{A}^{-1}|\chi\rangle = |\psi\rangle$$

der zu A inverse Operator.

Eigenschaften:

- $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{1}$
- $(\hat{A}^\dagger)^{-1} = (\hat{A}^{-1})^\dagger$

Unitärer Operator $\hat{U}$:

$$\boxed{\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}}$$

Eigenschaften:

- $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \mathbb{1}$

- Die Eigenvektoren bilden eine Orthonormalbasis (wie hermitesche Operatoren)

- Die Eigenwerte haben Betrag eins: $u_i \in \mathbb{C}$ mit $|u_i| = 1$

  Beweis:

$$\langle u_i | u_i \rangle = \underbrace{\langle u_i | \hat{U}^{\dagger}}_{(\hat{U}|u_i\rangle)^* = \langle u_i | u_i^*} \overbrace{\hat{U} | u_i \rangle}^{u_i | u_i \rangle} = |u_i|^2 \langle u_i | u_i \rangle \Rightarrow |u_i|^2 = 1$$

  Eigenvektor von U

Unitäre Transformation ("Basiswechsel"):

$\|\psi\rangle \longmapsto \hat{U}\|\psi\rangle$		(Ket-Vektor)
$\langle\psi\| \longmapsto \langle\psi\|\hat{U}^{\dagger}$		(Bra-Vektor)
$\hat{A} \longmapsto \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{\dagger}$		(Operator)

Eigenschaften:

- $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \longmapsto \langle \psi_1 | \hat{U}^{\dagger}\hat{U} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ "erhält Skalarprodukt"

- $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle \longmapsto \|\hat{U}\psi\|^2 = \|\psi\|^2$ "erhält Norm"

- $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle \longmapsto \langle \psi_1 | \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{\dagger}\hat{U} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$ "erhält Matrixelemente"
- $\langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \longmapsto \langle \psi | \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{\dagger}\hat{U} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle_{\psi}$ "erhält Erwartungswerte"

$\Rightarrow$ Gleichzeitige unitäre Transformationen (von Zuständen und Operatoren) beschreiben Basiswechsel im Hilbert-Raum

Bemerkung ("Symmetrie"):

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Hamilton-Operator}}}{[\hat{H},\hat{U}]=0} \Rightarrow \hat{H} \mapsto \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{+} = \hat{H}$$

"$\hat{H}$ ist invariant unter der Transformation U"

$\Rightarrow$ Unitäre Operatoren, die mit dem Hamilton-Operator kommutieren, beschreiben <u>Symmetrien</u> des Systems