d) <u>hermitesche Operatoren</u>: spezielle Operatoren

Sei: $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \int d^3r\, \varphi^*(r)\, \hat{A}\, \psi(r)$ (4.23)

<u>Def</u>: $\hat{A}^+$ ist adjungiert zu $\hat{A}$, wenn

$$\boxed{\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle \leftrightarrow \int d^3r\, \varphi^* \hat{A} \psi = \int d^3r\, (\hat{A}^+ \varphi)^* \psi} \quad (4.25)$$

<u>Def</u>: hermitesche Operatoren: (selbstadjungiert)

$$\hat{A}^+ = \hat{A}$$

vergl. symmetrische Tensoren $\underline{a} \cdot \underline{\underline{T}}\, \underline{b} = (\underline{\underline{T}}\, \underline{a}) \cdot \underline{b}$

<u>Bsp</u>: $\boxed{\hat{\underline{r}} = \hat{\underline{r}}^+ , \quad \hat{\underline{p}} = \hat{\underline{p}}^+}$ (4.26)

Beweis: i) $\hat{\underline{r}}$ ✓

ii) für $\hat{p}$ (1D)

Part. Integration

$$\langle \varphi | \hat{p} \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \doteq \frac{\hbar}{i} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} (\varphi^* \psi)}_{\varphi^* \psi |_{-\infty}^{\infty} = 0}$$

$$- \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \psi$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi \right)^* \psi = \langle \hat{p} \varphi | \psi \rangle$$

weitere Relationen:

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{i)} \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger && (4.27) \\ &\text{ii)} \quad [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] && (4.28) \end{aligned}}$$

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r}) = \hat{H}^\dagger$$

4.2 Erwartungswerte = Mittelwerte von Observablen

- Observablen = phys. Größen

a) Im Ortsraum:

- physikalische Größen: $f(\underline{r})$ Bsp: $\underline{r}$, $U(\underline{r})$
- QT: Erwartungswerte = Mittelwert von $f(\underline{r})$

$$\langle f(\underline{r}) \rangle = \int d^3r \, |\Psi(\underline{r},t)|^2 f(\underline{r})$$

$$= \int d^3r \, \Psi^*(\underline{r},t) \, f(\underline{r}) \, \Psi(\underline{r},t)$$

$$= \langle \Psi | f(\underline{r}) | \Psi \rangle$$

↑ neu

Bsp: mittlere Ort $\langle \underline{r} \rangle$

Ortsunschärfe Δr mit

$$(\Delta r)^2 := \langle (\underline{r} - \langle \underline{r} \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle \underline{r}^2 \rangle - \langle \underline{r} \rangle^2 \qquad (4.31)$$

(Kap 3.1d)

b) Impulsraum:

- Fourier-Entw. $$\Psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \, \overline{\Psi}(\underline{p},t) \, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

(4.32) mit $|\overline{\Psi}(\underline{p},t)|^2 d^3p$ Wahrscheinlichkeitsdichte für den Impuls

- phys. Größe $f(\underline{p})$ Bsp: $\underline{p}$, $\frac{\underline{p}^2}{2m}$
- QT: $$\langle f(\underline{p}) \rangle = \int d^3p \, |\overline{\Psi}(\underline{p},t)|^2 f(\underline{p})$$

$$= \langle \bar{\Psi} | f(p) | \bar{\Psi} \rangle \quad (4.33)$$

Bsp: mittlerer Impuls $\langle p \rangle$

Impulsunschärfe Δp mit $(\Delta p)^2 := \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ (4.34)

Frage: Berechnung $\langle p \rangle$ mit $\Psi(x)$ (Ortsraum) (1D)

$$\langle p \rangle = \int dp \; p \left| \bar{\Psi}(p,t) \right|^2, \quad \bar{\Psi}(p,t) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Psi(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

$$= \int \frac{dx\,dx'}{2\pi\hbar} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x',t) \underbrace{\int dp \; p\, e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}$$

$$= \int dp \; i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \underbrace{\int dp \; e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}$$

$$2\pi\hbar\,\delta(x-x')$$

$$= \int dx\,dx'\, \psi^*(x,t)\,\psi(x',t)\, i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x')$$

$$= \int dx\, \psi^*(x,t) \underbrace{\left[i\hbar\, \psi(x',t)\,\delta(x-x') \right]\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0}$$

Part. Integr.

$$- i\hbar \int dx'\,dx\, \psi^*(x,t)\,\delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'}\psi(x',t)$$

$$= -i\hbar \int dx\, \psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$$

$$= \int dx\, \psi^*(x,t) \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{p}\psi(x,t)$$

$$= \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle \qquad (4.36)$$

$$\boxed{\text{NB} \quad \int f(x') \frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x')\,dx = \frac{\partial}{\partial x} f(x)} \qquad (4.35)$$

i) $\langle p \rangle$ auf 2 Wege berechenbar

ii) $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ sinnvoll

Verallgemeinerung: $f(\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{p}^n$

$$\Rightarrow \langle f(\hat{p}) \rangle = \langle \psi | f(\hat{p}) | \psi \rangle$$

mit $\langle \hat{p}^n \rangle = \int dx\, \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x)$

c) Jordansche Regeln:

1) Klass. phys. Größen $A(\underline{r}, \underline{p}, t)$

$\rightarrow$ QT: hermitische Operatoren (Observablen): $\hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t)$

2) Erwartungswert = Mittelwert der Observablen

(4.38) $$\langle \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \rangle = \langle \psi | \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) | \psi \rangle$$

2 Möglichkeiten:

(i) Ortsdarstellung: $\hat{\underline{r}} = \underline{r}$ $\quad \hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}$

(4.39) $$\rightarrow \langle \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\underline{r}, t)\, \hat{A}(\underline{r}, \hat{\underline{p}}, t)\, \psi(\underline{r}, t)$$

ii) Impulsdarstellung: $\hat{\underline{p}} = \underline{p}$ $\quad \hat{\underline{r}} = i\hbar \underline{\nabla}_p$

(4.40) $$\rightarrow \langle \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \rangle = \int d^3p\, \overline{\psi}^*(\underline{p}, t)\, \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \underline{p}, t)\, \overline{\psi}(\underline{p}, t)$$

$\boxed{\text{Forderung: reeller Erwartungswert einer Observablen} \Rightarrow \hat{A} \text{ ist hermitesch!}}$ 4.41

Beweis: $$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \overset{4.4}{=} \langle \hat{A}\psi | \psi \rangle^* \underset{\text{reell}}{=} \langle \hat{A}\psi | \psi \rangle$$

$$\underset{4.24}{\Rightarrow} \quad \hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

- Übersetzungsvorschrift (4.38) ist nicht eindeutig

$$xp \to \left.\begin{array}{l} \hat{x}\hat{p} \\ \hat{p}\hat{x} \end{array}\right\} \text{nicht hermitesch}$$

$$xp \to \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \quad \text{hermitesch}$$

$\longrightarrow$ Hermitezität & Empirie helfen bei Zweifelsfällen