d) hermitesche Operatoren: spezielle Operatoren

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

Def: $\hat{A}^+$ ist adjungiert zu $\hat{A}$, wenn

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

Def: hermitesche Operatoren: (selbstadjungiert)

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

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

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

Beweis: i) $\hat{r}$ ✓

ii) für $\hat{p}$ (1D)

part. Integration

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

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

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

weitere Relationen:

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{i)} & (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ \\ \text{ii)} & [\hat{A},\hat{B}]^+ = [\hat{B}^+,\hat{A}^+] \end{array}}$$

(4.27)

(4.28)

Hamilton-Operator:

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

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: mittlerer 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 3.1 d)

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

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

<u>Bsp</u>: mittlerer Impuls $\langle p \rangle$

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

<u>Frage</u>: 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.

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

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

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

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

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

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): $\hat{A}(\hat{r}, \hat{p}, t)$

2) Erwartungswert = Mittelwert der Observablen

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

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

$\boxed{\text{Forderung: reeller Erwartungswert einer Observablen} \Rightarrow \hat{A} \text{ ist hermitesch!}}$ 4.4.1

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

$\underset{\text{reell}}{=} \langle\hat{A}\psi|\psi\rangle$

$\underset{4.24}{\Rightarrow} \hat{A}^{+} = \hat{A}$ $\boxed{B}$

- Übersetzungsvorschrift (4.38) ist nicht eindeutig

$$xp \to \begin{cases} \hat{x}\hat{p} \\ \hat{p}\hat{x} \end{cases} \text{nicht hermitesch}$$

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

$\longrightarrow$ Hermitezität & Empirie helfen bei Zweifelsfällen