

## 4. Die Meßgrößen in der QT = Observablen

• Mechanik:  $A(\underline{r}, \underline{p}, t)$  Bsp: Energie  $A = H = \frac{p^2}{2m} + U(\underline{r})$

QT:  $A(\dots) \rightarrow$  Operator

• hier: (i) Operatoren einführen

(ii) Erwartungswerte physikal. Größen

„Was beobachtet man im Mittel im Experiment“

(iii) mathematische Details

• eigentlicher Meßprozess: s. Kap. 6

$\rightarrow$  Was wird gemessen im Einzelerperiment?

### 4.1 Skalarprodukt & Operatoren

• vgl. Vektoren  $\in V$  mit  $\dim V < \infty$  & Tensoren

• hier: Funktionen  $\in V$  mit  $\dim V = \infty$  & Operatoren

• Funktionenraum:

$$(i) \psi(\underline{r}) \in L^2, \text{ d.h. } \int d^3r |\psi(\underline{r})|^2 < \infty \quad (4.1)$$

... „quadratintegrale Fktn“

(ii) zusätzlich:

$$\text{ebene Wellen: } \psi_p(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}} \quad (4.2)$$

and wichtig für FT!

a) Skalarprodukt: (genauer: hermitesches S.)

Def:  $\varphi, \psi \in L^2$ :  $\langle \varphi | \psi \rangle := \int d^3r \varphi^*(\underline{r}) \psi(\underline{r})$  (4.3)  
 Bra(ket)-Schreibweise (Dirac)  
 (s. Teil II)

[vgl:  $\underline{a} \cdot \underline{b} = a_i b_i$ ;  $\underline{a}, \underline{b} \in V$  mit  $\dim V = n$ ]

• Eigenschaften:

(i)  $\langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle$   
 (ii) Sesquilinearität:  $a, b \in \mathbb{C}$   
 $\langle \varphi | a\psi_1 + b\psi_2 \rangle = a \langle \varphi | \psi_1 \rangle + b \langle \varphi | \psi_2 \rangle$  ... linear  
 $\langle a\psi_1 + b\psi_2 | \varphi \rangle = a^* \langle \psi_1 | \varphi \rangle + b^* \langle \psi_2 | \varphi \rangle$  ... semi-linear  
 (iii) positiv definite Norm:  
 $\langle \psi | \psi \rangle > 0 \quad \forall \psi \neq 0$   
 $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \iff \psi = 0$  (4.4)

(4.3) erfüllt (4.4), Übungen

• Funktionen „ausmessen“!

orthogonale Fktn:  $\langle \psi | \varphi \rangle = 0$   
 normierte " :  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  (4.5)

• Bemerkungen.

(i) Verallgemeinerung für ebene Wellen:

$\langle \psi_{\underline{p}} | \psi_{\underline{p}'} \rangle \stackrel{(4.2)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}') \cdot \underline{r}}$  (4.6)  
 $= \delta(\underline{p}-\underline{p}')$

mit  $\underline{r} \rightarrow \frac{\underline{r}}{\hbar}$

(ii)  $\langle \varphi | \psi \rangle$  auch für endliches Volumen

• Schwarz'sche Ungleichung:

(4.4)  $\rightarrow$   $|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$  (4.6a)

- Bem: (i) " $=$ " für  $\psi = a\varphi$   
(ii)  $\langle \varphi | \varphi \rangle$  endlich, falls  $\varphi, \varphi \in L^2$

b) Operatoren:

- Def: (beschränkter) Operator  $\hat{A}$ , falls  $\hat{A}\varphi(r) = \varphi(r)$  mit  $\varphi, \varphi \in L^2$  (4.7)

(i) ... "Abbildung" in  $L^2$

(ii) .. Anwendung auf ebene Wellen

• im folgenden

Def: Lineare Operatoren:  $\hat{A}(a\varphi_1 + b\varphi_2) = a\hat{A}\varphi_1 + b\hat{A}\varphi_2$  (4.8)

NB: vgl. Tensor  $\underline{I} = \underline{1}$ , Bsp:  $\underline{L} = \underline{0} \omega$

Bsp:  $\hat{x}_i = x_i$ ,  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ ,  $\frac{\partial}{\partial t}$

• Lineare Operatoren aus linearen  $\hat{A}, \hat{B}$ :

(i) Multiplikation mit  $a \in \mathbb{C}$ :  $a\hat{A}$ ,  $(a\hat{A})\varphi := a(\hat{A}\varphi)$   
(ii) Summe:  $\hat{A} + \hat{B}$ ,  $(\hat{A} + \hat{B})\varphi := \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi$   
(iii) Produkt:  $\hat{A}\hat{B}$ ,  $(\hat{A}\hat{B})\varphi := \hat{A}(\hat{B}\varphi)$  (4.9)

Beweis:  $\rightarrow$  Übungen

• spezielle lineare Operatoren: (kein  $\wedge$ )

(i) Einsoperator:  $1$ ,  $1\varphi = \varphi$ ,  $\hat{A}1 = 1\hat{A} = \hat{A}$  (4.10)  
(ii) Nulloperator:  $0$ ,  $0\varphi = 0$ ,  $0\hat{A} = \hat{A}0 = 0$

c) Kommutatoren = Vertauschungsrelation (VR)

• i.a.  $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

$\rightarrow$  Def: Kommutator von  $\hat{A}, \hat{B}$ :  $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  (4.11)  
 $= -[\hat{B}, \hat{A}]$

(i) kennzeichnend für Operatoren

(ii)  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \dots \hat{A}, \hat{B}$  kommutieren / vertauschen!

(iii) vgl. Mechanik:  $\{A, B\}$  .. Poisson-Klammer! (Kap. 14.3)

• Bsp: (i) 1D:  $\boxed{\hat{x} = x, \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar}$  (4.12)

Beweis:  $[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}(\hat{x}f(x))$

$$= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x f(x)) = -\frac{\hbar}{i} f(x) \quad \text{qed}$$

$f(x) + x \frac{\partial}{\partial x} f(x)$

(ii) 3D:

$$\boxed{[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0} \quad (4.13)$$

„kanonische Vertauschungsrelation“

vgl. Mechanik:  $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ !

(iii)  $\boxed{[f(x), \hat{p}_j] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x_j} \quad (4.14)}$   
 $\boxed{[g(\hat{p}), x_j] = -i\hbar \frac{\partial g}{\partial \hat{p}_j}}$

Beweis: (ii), (iii)  $\rightarrow$  Übungen

• Regeln:

$$(i) [\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (4.15)$$

$$(ii) [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (4.16)$$

$$(iii) [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (4.17)$$

(iv) Jacobi-Identität

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (4.18)$$

Beweis. nachrechnen (i)-(iii)

(iv) aufwändig

• mit Hilfe Identitäten:

(i) Baker-Hausdorff-Identität:

$$\text{mit } e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n \text{ folgt} \quad (4.19)$$

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (4.20)$$

(ii) Für  $[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}]$  gilt

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]} \quad (4.21)$$

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2} \quad (4.22)$$

Beis: [Schwab]

d) hermitesche Operatoren: spezielle lineare (beschränkte) Operatoren

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

(4.24)

• Def:  $\hat{A}^+$  ist adjungierter Operator zu  $\hat{A}$ , wenn

$$\langle \psi | \hat{A} \chi \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi | \chi \rangle \Leftrightarrow \int d^3r \psi^* \hat{A} \chi = \int d^3r (\hat{A}^+ \psi)^* \chi$$

• Def: hermitesche Operatoren.  
(= selbstadjungiert)

$$\hat{A}^+ = \hat{A} \quad (4.25)$$

vgl. symmetrische Tensoren:  $\underline{a} \cdot \underline{I} \underline{b} = (\underline{I} \underline{a}) \cdot \underline{b}$

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

Beweis: (i) für  $\hat{r}$  ✓

(ii) für  $\hat{p}$  (10)

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p} \chi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int dx \psi^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \chi \right) \stackrel{\text{part. Integ}}{=} \frac{\hbar}{i} \int dx \left[ \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \chi) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \chi \right] \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int dx \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi \right)^* \chi \quad \underbrace{\psi^* \chi \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0}_{\in L^2} \\ &= \int dx \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right)^* \chi = \langle \hat{p} \psi | \chi \rangle \quad \text{qed} \end{aligned}$$

• weitere Relationen:

$$(i) \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (4.27)$$

$$(ii) \quad [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \quad (4.28)$$

Beweis: s. Übungen

• Hamilton-Operator:  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) = \hat{H}^\dagger \quad (4.29)$

Beweis: s. Übungen