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: $A(\ldots) \longrightarrow$ Operator

- hier: (i) Operatoren einführen
  (ii) Erwartungswerte physikal. Größen
  „Was beobachtet man im Mittel im Experiment"

  (iii) mathematische Details

- eigentlicher Meßprozeß: s. Kap. 6
  $\longrightarrow$ Was wird gemessen im Einzelexperiment?

4.1 Skalarprodukt & Operatoren

- vgl. Vektoren $\in V$ mit $\dim V < \infty$ & Tensoren
- hier: Funktionen $\in V$ mit $\dim V$ "$= \infty$" & Operatoren

- Funktionenraum:

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

  ... „quadratintegrable Fktn"

  (ii) zusätzlich:

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

  auch wichtig für FT!

a) Skalarprodukt: (genauer: hermitesches S.)

· Def.: $\boxed{\varphi, \psi \in L^2: \quad \underbrace{\langle \varphi | \psi \rangle}_{} := \int d^3r \; \varphi^*(\underline{r}) \psi(\underline{r})}$ (4.3)

Bra(c)-ket-Schreibweise (Dirac)
(s. Teil II)

[vgl.: $\underline{a} \cdot \underline{b} = a_i b_i \quad \underline{a}, \underline{b} \in V$ 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

$\langle a\varphi_1 + b\varphi_2 | \psi \rangle = a^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + b^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$ ... semi-linear

(iii) positiv definite Norm: (4.4)

$\langle \psi | \psi \rangle > 0 \quad \forall \psi \neq 0$

$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \longleftrightarrow \psi = 0$

(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:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \psi_{\underline{p}} | \psi_{\underline{p}'} \rangle &\underset{(4.2)}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \; e^{-\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot \underline{r}} \\ &= \delta(\underline{p}-\underline{p}') \end{aligned}} \quad (4.6)$$

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

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

· Schwarzsche Ungleichung:

$(4.4) \longrightarrow \quad \boxed{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle}$ (4.4a)

Bem: (i) "=" für $\psi = a\varphi$

(ii) $\langle \varphi | \psi \rangle$ endlich, falls $\varphi, \psi \in L^2$

b) Operatoren:

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

(i) … „Abbildung" in L^2

(ii) .. Anwendung auch auf ebene Wellen

- im folgenden

Def: $\boxed{\text{lineare Operatoren: } \hat{A}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{A}\psi_1 + b\hat{A}\psi_2}$ (4.8)

NB: vgl. Tensor $\underline{\underline{T}}\,\underline{a} = \underline{b}$, Bsp: $\underline{L} = \underline{\underline{\Theta}}\,\underline{\omega}$

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

- lineare Operatoren aus linearen $\hat{A}$, $\hat{B}$:

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{(i) Multiplikation mit } a \in \mathbb{C}: & a\hat{A}, \quad (a\hat{A})\psi := a(\hat{A}\psi) \\ \text{(ii) Summe:} & \hat{A} + \hat{B}, \quad (\hat{A} + \hat{B})\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \\ \text{(iii) Produkt:} & \hat{A}\hat{B}, \quad (\hat{A}\hat{B})\psi := \hat{A}(\hat{B}\psi) \end{array}} \quad (4.9)$$

Beweis: $\longrightarrow$ Übungen

- spezielle lineare Operatoren: (kein ^)

$$\boxed{\begin{array}{llll} \text{(i) Einsoperator:} & 1, & 1\psi = \psi, & \hat{A}1 = 1\hat{A} = \hat{A} \\ \text{(ii) Nulloperator:} & 0, & 0\psi = 0, & 0\hat{A} = \hat{A}0 = 0 \end{array}} \quad (4.10)$$

c) Kommutatoren = Vertauschungsrelation (VR)

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

$\longrightarrow$ Def: $\boxed{\begin{array}{l} \text{Kommutator von } \hat{A}, \hat{B}: \ [\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = -[\hat{B}, \hat{A}] \end{array}}$ (4.11)

(i) kennzeichnend für Operatoren

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

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

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

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

$$= \cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(x)} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{(xf(x))}_{f(x)+\cancel{x\frac{\partial}{\partial x}f(x)}} = -\frac{\hbar}{i}f(x)$$

ged

(ii) 3D:

$$\boxed{\underbrace{[\hat{x}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\,\delta_{ij}}_{\text{„kanonische Vertauschungsrelation"}},\quad [\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,\quad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0} \quad (4.13)$$

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

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

Beweis: (ii), (iii) → Übungen

· Regeln:

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

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

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

· nützliche Identitäten:

(i) Baker-Hausdorff-Identität:

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

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

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

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

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

Beweis: [Schwabl]

d) hermitesche Operatoren: spezielle lineare (beschränkte) Operatoren

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

- Def: (4.24)

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{A}^+ \text{ ist adjungierter Operator zu } \hat{A}, \text{ wenn} \\ \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle \Longleftrightarrow \int d^3r \; \varphi^* \hat{A} \psi = \int d^3r \, (\hat{A}^+ \varphi)^* \psi \end{array}}$$

- Def:

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{hermitesche Operatoren} & \\ (= \text{selbstadjungiert}) & \hat{A}^+ = \hat{A} \end{array}} \quad (4.25)$$

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

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

Beweis: (i) für $\hat{\underline{r}}$ ✓

(ii) für $\hat{p}$ (1D)

$$\langle \varphi | \hat{p} \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int dx \; \varphi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \overset{\text{part. Integ.}}{=} \frac{\hbar}{i} \int dx \Big[\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (\varphi^* \psi)}_{\underbrace{\varphi^* \psi}_{\in L^2} \big|_{-\infty}^{\infty} = 0} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \psi \Big]$$

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

$$= \int dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi \right)^* \psi = \langle \hat{p} \varphi | \psi \rangle \quad \text{qed}$$

- weitere Relationen:

(i) $$\boxed{(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+} \qquad (4.27)$$

(ii) $$\boxed{[\hat{A},\hat{B}]^+ = [\hat{B}^+, \hat{A}^+]} \qquad (4.28)$$

Beweis: s. Übungen

- Hamilton-Operator: $$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r}) = \hat{H}^+} \qquad (4.29)$$

Beweis: s. Übungen