

Wdh:  
Adjungierter Operator

$$\text{sei } |\phi\rangle = \hat{A} |\psi_2\rangle$$

$$\text{betrachte: } \langle \psi_1 | \phi \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle$$

Skalarprodukt      „Matrixelement“ in den Zuständen  $|\psi_2\rangle, |\psi_1\rangle$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

adjungierter Operator

Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{A} |\psi_2\rangle &= \langle \psi_1 | \hat{1} \hat{A} |\psi_2\rangle & \hat{1} &= \int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| \\ &= \int d\underline{r} \langle \psi_1 | \underline{r}\rangle \langle \underline{r} | \hat{A} |\psi_2\rangle \\ &= \int d\underline{r} \langle \psi_1 | \underline{r}\rangle \hat{A} \underbrace{\langle \underline{r} | \psi_2\rangle}_{\psi_2(\underline{r})} \end{aligned}$$

Dabei muss  $\hat{A}$  jetzt in der Ortsdarstellung benutzt werden!

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}_{\underline{r}}$$

es gilt: — Komplex-Zahl

$$\begin{aligned} (\lambda \hat{A})^\dagger &= \lambda^* \hat{A}^\dagger \\ (\hat{A} \hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \end{aligned}$$

(z.B.  $\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ )

Spezialfall: Ein selbstadjungierter (hermitescher) Operator ist definiert durch

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

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

Für ein schließlich ein:

inverser Operator:  $\hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \hat{A} = \hat{1}$

unitärer Operator:

für diesen gilt:  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$

### III.5. Matrixelemente und Erwartungswerte hermitescher Operatoren

allg.: Matrixelement:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

$|\phi\rangle$

$\hat{A}$  ist hier noch nicht notwendig hermitesch!

es gilt:  $\langle \psi_1 | \phi \rangle = \langle \phi | \psi_1 \rangle^*$  (generelle Regel für Skalarprodukt)

andererseits:  $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$

$$= \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$= \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger \psi_1 \rangle^*$$

$$= \langle \underbrace{\hat{A} \psi_2}_{|\phi\rangle} | \psi_1 \rangle^* = \langle \phi | \psi_1 \rangle^*$$

Widerspruch!

Sei nun  $\hat{A}$  hermitesch:

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

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle^* \quad (1)$$

Erwartungswert

$\hat{=}$  Matrixelement eines Operators zwischen zwei gleichen Zuständen (entw. ergänzt um Normierungsfaktor)

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Erinnerung:} \\ \langle \psi | \psi \rangle = |\psi|^2 \end{array} \right.$$

meist betrachtet man normierte Zustände:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

alternativ:  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | \psi \rangle$

Sei speziell  $\hat{A}$  hermitisch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \psi | \psi \rangle \stackrel{(1)}{=} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \hat{A} \rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle \text{ ist reell !!}$$

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind immer reell !!

Auch die Erwartungswerte quantenmechanischer Observablen (Energie, Impuls, Ort...) müssen reell sein!

⇒ quantenmechanische Observablen werden durch hermitesche Operatoren dargestellt!!

⇒  $\hat{H}, \hat{p}, \hat{x} \dots$  sind alle hermitisch!

### III.6. Eigenwertproblem von Operatoren, speziell hermiteschen Operatoren

gegeben: linearer Operator  $\hat{A}$

Der Zustand  $|a\rangle$  heißt Eigenzustand von  $\hat{A}$ , falls gilt:

$$\textcircled{\neq} \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad \text{mit } a \in \mathbb{C}$$

└ Eigenwert

bekannt Beispiele: •  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$

└ Zeitunabh. SG  
Energie-Eigenwert

$$\bullet \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

└ Vektoroperator

$$\Leftrightarrow \hat{p}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle$$

$x$ : Komponente des Vektors!

Folgerung aus  $(*)$  :  
 $\langle a | \hat{A} | a \rangle = a \underbrace{\langle a | a \rangle}_{\text{reell (Betragsquadrat)}}$  i.A. komplex

Spezialfall :  $\hat{A}$  hermitisch ( $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ) Skalarprodukt-Regel

$$\underbrace{\langle a | \hat{A} | a \rangle}_{a \underbrace{\langle a | a \rangle}_{\text{reell}}} = \langle \hat{A} | a \rangle = \langle a | \hat{A} | a \rangle^* = \left( a \underbrace{\langle a | a \rangle}_{\text{reell}} \right)^*$$

$\Rightarrow \boxed{a = a^*} \quad !! \quad \text{reell} !$

Theorem 1:

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell !

Theorem 2:

Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal !

Beweis (betrachte dazu diskretes Spektrum):

$$\begin{aligned} \hat{F} |n\rangle &= f_n |n\rangle \quad \textcircled{a} \\ \hat{F} |m\rangle &= f_m |m\rangle \quad \textcircled{b} \end{aligned}$$

Eigenwert

Eigenket

$$f_n \neq f_m$$

es gilt:  $\langle m | \hat{F} | n \rangle \stackrel{\textcircled{1}}{=} f_n \langle m | n \rangle$  (I)

andere Seite  $\langle m | \hat{F} | n \rangle = \langle \hat{F}^\dagger m | n \rangle = \langle n | \hat{F}^\dagger m \rangle^*$   
 $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$  (2)  $(f_m \langle n | m \rangle)^*$   
 $= f_m^* \langle n | m \rangle^*$   
 $= f_m \langle n | m \rangle^*$   
 $= f_m \langle m | n \rangle$  (II)

Eigenwerte von  $\hat{F}$   
sind reell!

(I) - (II)

$$\Rightarrow 0 = (f_n - f_m) \langle m | n \rangle$$

$$\Rightarrow \langle m | n \rangle = 0$$

da  $f_n \neq f_m$  nach  
Voraussetzung

$\Rightarrow |m\rangle, |n\rangle$  sind  
orthogonal!

Bemerkungen:

• typischerweise werden die Eigenzustände normiert

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m=n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

- Umgang mit „entarteten“ Eigenwerten (z.B. Wasserstoffatom, dreidimensionale Oszillate)

$$\hat{F} |n, \alpha_i\rangle = f_n |n, \alpha_i\rangle$$

mit  $i = 1, 2, \dots, m$

höchste Quantenzahl

Grad der Entartung

Es gibt also mehrere Eigenzustände zu einem Eigenwert  $f_n$  !!

Beachte = Die Zustände  $|n, \alpha_i\rangle$  mit verschiedenem  $i$  sind noch nicht notwendig diagonal, sie können aber diagonalisiert werden (Schmidt'sches Orthogonalisierungsverfahren)

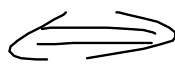
$$\Rightarrow \langle n, \alpha_i | m, \alpha_k \rangle = \delta_{nm} \delta_{ik}$$

### Theorem 3

Zwei hermitesche Operatoren  $\hat{F}$  und  $\hat{G}$  vertauschen genau dann, wenn sie ein gemeinsames System aus Eigenzustände besitzen

$$\hat{F} |n\rangle = f_n |n\rangle$$

$$\hat{G} |n\rangle = g_n |n\rangle$$



$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$$

vertauschen

d.h. die  $|n\rangle$  sind  
Eigenzustände beider  
Operatoren

Beweis siehe Übungsblatt !

(Beachte:

Theorem 3 gilt auch im Falle erweiterter Eigenwerte)

### III.7 Nichtstrenghalbbarkeit und Unschärfe

Erinnerung:

quantenmechan. Streuung im Zustand  $|\psi\rangle$

$$\Delta F^2 = \langle \psi | \frac{\hat{F}^2}{\hat{F}\hat{F}} | \psi \rangle - \underbrace{\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2}_{\langle \hat{F} \rangle^2}$$

$$= \langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 | \psi \rangle$$

immer positiv !!

denn:  $\Delta F^2 = \langle \phi | \phi \rangle$

mit  $|\phi\rangle = (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)|\psi\rangle$

$$\frac{\langle \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle | \psi \rangle \langle \psi | \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Anwendung:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

quantenmechanische Unschärfe:

$$\Delta F = \sqrt{\Delta F^2} = \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}$$

Notation:

manchmal

$$\Delta F \rightarrow \Delta \hat{F}$$

$$\Delta F^2 \rightarrow \Delta \hat{F}^2$$

Es gilt:

$$\Delta F = 0 \iff |\psi\rangle \text{ ist ein (normierter) Eigenzustand von } \hat{F}$$



Beweis setzen üben!

Folgerung:

Betrachte zwei Observable, dargestellt durch hermitesche Operatoren  $\hat{F}$  und  $\hat{G}$

i) sei  $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$  (die Operatoren vertauschen)

laut Theorem 3 in III.6.

haben  $\hat{F}$  und  $\hat{G}$  dann gemeinsame Eigenzustände

(sie haben ein gemeinsames System von Eigenzuständen)

$$\hat{F}|n\rangle = f_n |n\rangle$$

$$\hat{G}|n\rangle = g_n |n\rangle$$

$$\left( \begin{array}{l} \text{Annahme:} \\ \langle n|n\rangle = 1 \\ \langle n|m\rangle = 0 \\ \text{für } n \neq m \end{array} \right)$$

In einem dieser gemeinsamen Eigenzustände gilt:

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle n | \hat{F} | n \rangle = f_n \langle n | n \rangle = f_n$$

$$\langle \hat{G} \rangle = \dots = g_n$$

d.h. die Erwartungswerte in  $|n\rangle$   
entsprechen den Eigenwerten!

$$\Rightarrow \Delta F = \sqrt{\Delta F^2} = \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle} = \|\phi\|$$

$$\text{mit } |\phi\rangle = (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle) |n\rangle$$

$$(f_n - f_n) |n\rangle$$

s. Übung!

$$\Rightarrow \Delta F = 0$$

und analog  $\Delta G = 0$

Man sagt:

Vertauschbare Operatoren (Kommutierende Observablen)  
sind gleichzeitig "scharf messbar" in dem Sinne,  
dass die Unsicherheiten beim Streuung verschwinden!!

$$(i) [\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$$

$\Rightarrow$  keine gemeinsame Eigenzustände  
 $\Rightarrow$  nicht gleichzeitig scharf messbar!

Anmerkung:

Typischerweise kann man in einem quantenmechanischen System  
nicht <sup>alle</sup> Observablen gleichzeitig scharf messen

"Maximalmessung"  $\Leftrightarrow$  gleichzeitige Messung eines  
vollständigen Satzes vertauschbarer Observablen

Seien z.B.  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  ein solches vollständiges Satz  
 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0, [\hat{A}, \hat{C}] = 0, [\hat{B}, \hat{C}] = 0$

$$\begin{aligned}\hat{A}|n\rangle &= a_n |n\rangle \\ \hat{B}|n\rangle &= b_n |n\rangle \\ \hat{C}|n\rangle &= c_n |n\rangle\end{aligned}$$

gemeinsames System von  
Eigenzuständen

"vollständig"  $\hat{=}$  es können keine weiteren (unabhängigen)  
Observablen gefunden werden, die mit  
 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  vertauschen!

Die gemeinsamen Eigenzustände des vollständigen Satzes  
Kommutierender Observablen bilden eine  
Basis des Hilbertraums (des Systems)

## III.8. Messprozesse

a) Ausgang von Messungen:

Betrachte ein System im bekannten Zustand  $|\psi\rangle$   
und messe die Observable  $A$  (dargestellt durch einen  
hermiteschen Operator  $\hat{A}$ )  
 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

im allg. ist die Messung nicht streufrei,

$$\text{d.h. } \Delta A^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 > 0$$

(Streuung)

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

$$\text{mit } \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Mittelwert über sehr viele Messungen  
mit identisch präparierten Ausgangszustände  $|\psi\rangle$

Sei nun speziell  $\Delta A^2 = \Delta A = 0 \stackrel{!}{=} \text{alle Messungen ergeben genau dasselbe Ergebnis}$   
(Unschärfe)

$\Leftrightarrow$  Zustand vor der Messung war ein Eigenzustand  
von  $\hat{A}$

$$\text{und es gilt } \langle \hat{A} \rangle = a_\psi$$

(Eigenwert von  $\hat{A}$   
zum Zustand  $|\psi\rangle$  !)