Wh:
Adjungierter Operator

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

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

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

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle \overset{!}{=} \langle\hat{A}^+\psi_1|\psi_2\rangle$$

adjungierter Operator

Ortsdarstellung:

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{1}\hat{A}|\psi_2\rangle \qquad \hat{1} = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$$

$$= \int d\underline{r}\, \langle\psi_1|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\hat{A}|\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r}\, \langle\psi_1|\underline{r}\rangle\, \hat{A}\, \underbrace{\langle\underline{r}|\psi_2\rangle}_{\psi_2(\underline{r})}$$

Dabei muß $\hat{A}$ jetzt in der Ortsdarstellung benutzt werden!
$\hat{A} \rightarrow \hat{A}_{\underline{r}}$

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

es gilt: komplexe Zahl

$$(\lambda\hat{A})^+ = \lambda^*\hat{A}^+$$

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$$

Spezialfall: Ein selbstadjungierter (hermitescher) Operator ist definiert durch

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

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

Führen schließlich ein:

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

unitärer Operator:

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

## III.5. Matrixelemente und Erwartungswerte hermitescher Operatoren

allg.: Matrixelement:

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

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

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

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

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

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

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

Konsistent!

Sei nun $\hat{A}$ hermitesch: $\hat{A}^+ = \hat{A}$

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

Erwartungswert

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

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

Erinnerung: $\langle \psi | \psi \rangle = |\psi|^2$

meist betrachtet man normierte Zustände.

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

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

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

Sei speziell $\hat{A}$ hermitesch:

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

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

Erwartungswerte hermitescher Operatoren sind immer reell !!

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

$\Longrightarrow$ quantenmechanische Observablen werden durch hermitesche Operatoren dargestellt!!

$\Rightarrow \hat{H}, \hat{p}, \hat{\underline{r}}$ .... sind alle hermitesch!

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

gegeben: linearer Operator $\hat{A}$

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

$$(*) \qquad \hat{A}\,|a\rangle = \underbrace{a}_{\text{Eigenwert}}\,|a\rangle \qquad \text{mit } a \in \mathbb{C}$$

bereits bekannte Beispiele: • $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$ zeitunabh. SG

Energie-Eigenwert

• $\hat{\underline{p}}\,|\underline{p}\rangle = \underline{p}\,|\underline{p}\rangle$

$\Longleftrightarrow \hat{p}_\alpha\,|p_\alpha\rangle = p_\alpha\,|p_\alpha\rangle$

Vektoroperator

$\alpha$: Komponente des Vektors!

Folgerung aus (*) :

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle \overset{\downarrow}{=} a \underbrace{\langle a|a\rangle}_{\text{reell (Betragsquadrat)}}$$

i.A. komplex

Spezialfall : $\hat{A}$ hermitesch $(\hat{A}^\dagger = \hat{A})$

Skalarprodukt-Regel

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

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

Theorem 1 :

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell !

Theorem 2 :

Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal !

Beweis (betrachte dazu diskretes Spektrum):

sei $\hat{F}|n\rangle = \underbrace{f_n}_{\text{Eigenwert}} |n\rangle$ (a)

$\hat{F}|m\rangle = f_m |m\rangle$ (b)

Eigenket

$f_n \neq f_m$

es gilt: $\langle m|\hat{F}|n\rangle \overset{a}{=} f_n \langle m|n\rangle$ $\quad$ I

andererseits $\langle m|\hat{F}|n\rangle = \langle \hat{F}m|n\rangle = \langle n|\hat{F}m\rangle^*$

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

$\overset{2}{=} (f_m \langle n|m\rangle)^*$

$= f_m^* \langle n|m\rangle^*$

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

$= f_m \langle n|m\rangle^*$

$= f_m \langle m|n\rangle$ $\quad$ II

I − II

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

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

da $f_n \neq f_m$ nach Voraussetzung $\quad \Rightarrow |m\rangle, |n\rangle$ 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, dreidimensionaler Oszillator)

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

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

weitere Quantenzahl — Grad der Entartung

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

Bemerkung: 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 Eigenzuständen besitzen

$$\begin{aligned}\hat{F}|n\rangle &= f_n|n\rangle\\ \hat{G}|n\rangle &= g_n|n\rangle\end{aligned} \iff \underbrace{[\hat{F},\hat{G}]}_{\text{Kommutator}} = 0$$

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

Beweis siehe Übungszettel!

(Beachte:
Theorem 3 gilt auch im Falle entarteter Eigenwerte)

# III.7 Nichtvertauschbarkeit und Unschärfe

Erinnerung:

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

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

$$\boxed{\text{Annahme: } \langle\psi|\psi\rangle = 1}$$

$$= \langle(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2\rangle = \Big(\underbrace{\underbrace{\langle\psi|(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle)^2|\psi\rangle}_{\langle(\hat{F}^+ - \langle\hat{F}\rangle)\psi|\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle|\psi\rangle}}_{\langle\phi|\phi\rangle}\Big)$$

immer positiv !!

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

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

quantenmechanische Unschärfe:

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

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Notation: manchmal} \\ \Delta F \to \Delta\hat{F} \\ \Delta F^2 \to \Delta\hat{F}^2\end{array}}$$

Es gilt:

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

Beweis siehe Übung!

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")

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

(Annahme: $\langle n|n\rangle = 1$, $\langle n|m\rangle = 0$ für $n \neq m$)

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!

$$\Rightarrow \Delta F = \sqrt{\overline{\Delta F^2}} = \sqrt{\langle \phi|\phi\rangle} = \underbrace{\|\phi\|}_{\text{Norm}}$$

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 Unschärfe bzw. Streuung verschwinden!!

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

$\Rightarrow$ keine gemeinsame Eigenzustände

$\Rightarrow$ nicht gleichzeitig scharf messbar!!

Anmerkung:

Typischerweise kann man in einem quantenmechanische System nicht alle Observablen gleichzeitig scharf messen

„Maximalmessung" $\Longleftrightarrow$ gleichzeitige Messung eines vollständigen Satzes vertauschbarer Observable

Seien z.B. $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ ein solcher vollständiger Satz

$$[\hat{A},\hat{B}]=0,\quad [\hat{A},\hat{C}]=0,\quad [\hat{B},\hat{C}]=0$$

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$$
$$\hat{B}|n\rangle = b_n|n\rangle$$
$$\hat{C}|n\rangle = c_n|n\rangle$$

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

<u>Basis des Hilbertraums</u> (des Systems)

## II.8. Messprozesse

a) Ausgang von Messungen.

Betrachte ein System mit bekanntem Zustand $|\psi\rangle$ und messe die Observable $A$ (dargestellt durch einen hermitischen Operator $\hat{A}$)

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

im allg. ist die Messung nicht streuungsfrei,

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

(Streuung)

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

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

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

Sei nun speziell $\Delta A^2 = \Delta A = 0$ $\hat{=}$ alle Messungen ergeben genau dasselbe Ergebnis

(Unschärfe)

$\Longleftrightarrow$ Zustand <u>vor</u> der Messung war ein <u>Eigenzustand</u> von $\hat{A}$.

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

Eigenwert von $\hat{A}$ zum Zustand $\psi$ !