- Skalarprodukt: $\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3r\ \varphi^*(\underline{r})\,\psi(\underline{r})$
- adjungierter Operator: $\langle \varphi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle$

$$= \int d^3r\ (\hat{A}^+\varphi)^*\,\psi$$

- hermitescher = selbstadjungierter Operator: $\hat{A}^+ = \hat{A}$

4.2 Erwartungswerte = Mittelwerte von Observablen

- zunächst: Observablen = physikal. Größen

a) Im Ortsraum

- physikal. Größen: $f(\underline{r})$ Bsp.: Ort $\underline{r}$, pot. Energie $U(\underline{r})$

- QT: Erwartungswert = Mittelwert von $f(\underline{r})$:

$$\langle f(\underline{r}) \rangle = \int \underbrace{d^3r\ |\psi(\underline{r})|^2}_{\substack{\text{Wahrscheinl.} \\ \text{für Ort } \underline{r}}}\ \underbrace{f(\underline{r})}_{\substack{\text{physikal.} \\ \text{Größe am Ort } \underline{r}}} = \int d^3r\ \psi^*(\underline{r},t)\,f(\underline{r})\,\psi(\underline{r},t)$$

$$= \langle \psi | f(\underline{r}) | \psi \rangle$$

... „Wert von $f(\underline{r})$ bei Messungen an Ensemble von vielen identischen Systemen"

· Bsp: mittlerer Ort $<\underline{r}>$

Ortsunschärfe Δr mit $\left.\begin{aligned}(\Delta r)^2 &:= <(\underline{r}-<\underline{r}>)^2> \\ &= <\underline{r}^2> - <\underline{r}>^2\end{aligned}\right\}$ (4.31) [s. Kap. 3.1d]

b) <u>Im Impulsraum</u>

· Fourier-Entw.: $\psi(\underline{r},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \bar{\psi}(\underline{p},t)\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ (4.32)

mit $|\bar{\psi}(\underline{p},t)|^2 d^3p$ ... Wahrscheinlichkeit für Impuls $\underline{p}$ in d^3p

· physikal. Größen: $f(\underline{p})$ Bsp: Impuls $\underline{p}$, kinet. Energie $\frac{\underline{p}^2}{2m}$

· QT: $<f(\underline{p})> = \int d^3p\, |\bar{\psi}(\underline{p},t)|^2 f(\underline{p}) = <\bar{\psi}|f(\underline{p})|\bar{\psi}>$ (4.33)

· Bsp: mittlerer Impuls $<\underline{p}>$

Impulsunschärfe Δp mit $\left.\begin{aligned}(\Delta p)^2 &:= <(\underline{p}-<\underline{p}>)^2> \\ &= <\underline{p}^2> - <\underline{p}>^2\end{aligned}\right\}$ (4.34) (s. Kap. 3.1d)

· <u>Frage:</u>

Berechnung von $<p>$ mit $\psi(x)$, also im Ortsraum? (1D)

$$<p> = \int dp\, p\, \underbrace{|\bar{\psi}(p,t)|^2}_{\psi^*(p,t)\psi(p,t)} \quad \text{mit} \quad \bar{\psi}(p,t) \overset{(34)}{=} \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

$$= \int \frac{dx\,dx'}{2\pi\hbar} \psi^*(x,t)\psi(x',t) \int dp\, \underbrace{p\, e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}_{i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}$$

$$\longrightarrow \delta(x-x')$$

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

part. Integr. in x'

$$= \int dx\, \psi^*(x,t) \Big[\underbrace{i\hbar\, \psi(x',t)\,\delta(x-x')\Big|_{x'=-\infty}^{\infty}}_{=0} - i\hbar \underbrace{\int dx'\, \delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'}\psi(x',t)}_{=\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)} \Big]$$

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

$$\longrightarrow \langle p \rangle = \int dx\, \psi^*(x,t) \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{=\hat{p}} \psi(x,t) = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$$

$= \hat{p}$ ... (3.29) ... vgl. Einführung Impuls-operator

(i) $\langle p \rangle$ auf 2 Wege berechenbar

(ii) $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ ... sinnvoll

Verallgemeinerung (1D): $f(\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{p}^n \longrightarrow \langle f(\hat{p}) \rangle = \langle \psi | f(\hat{p}) | \psi \rangle$

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. physikal. Größen $A(\underline{r}, \underline{p}, t)$

$\longrightarrow$ QT: hermitesche Operatoren = Observablen: $\hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t)$

Bsp: Ort $\underline{r}$, Impuls $\hat{\underline{p}}$, Hamiltonoperator $\hat{H}$ (Energie)

2. Erwartungswerte = Mittelwerte der Observablen (4.38)

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

repräsentiert Zustand

2 Möglichkeiten:

(i) Ortsdarstellung: $\hat{\underline{r}} = \underline{r}$, $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$

$$\longrightarrow \langle \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\underline{r},t)\, \hat{A}(\underline{r}, \hat{\underline{p}}, t)\, \psi(\underline{r},t) \quad (4.39)$$

(ii) Impulsdarstellung: $\hat{\underline{p}} = \underline{p}$, $\hat{\underline{r}} = i\hbar \underline{\nabla}_{p}$

$$\longrightarrow \langle \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \rangle = \int d^3p\, \overline{\psi}^*(\underline{p},t)\, \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \underline{p}, t)\, \overline{\psi}(\underline{p},t) \quad (4.40)$$

Beweis: $\hat{\underline{r}} = \ldots$ s. Übungen

- $\boxed{\text{Forderung: reeller Erwartungswert einer Observablen } \hat{A} \longrightarrow \hat{A} \text{ hermitesch}}$ (4.41)

Beweis: $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \overset{(4.4)}{=} \langle \hat{A}\psi | \psi \rangle^* \underset{\text{reell}}{=} \langle \hat{A}\psi | \psi \rangle$

$$\longrightarrow \hat{A}^+ = \hat{A} \quad \text{qed}$$

- Übersetzungsvorschrift in (4.38) nicht eindeutig:

Bsp:

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

$$x p \to \tfrac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \ \Big\} \text{ hermitesch}$$

Beweis: s. Übungen

$\longrightarrow$ Hermitizität & „Empirie" helfen bei Zweifelsfälle

4.3 Ehrenfestsches Theorem

- <u>Theorem</u>: $\boxed{\text{Mittelwerte } \langle \hat{A} \rangle \text{ gehorchen (fast) Bewegungsgln. der klass. Mechanik}}$

- linearer Operator $\hat{A}$:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt}\left[\int d^3r \ \psi^*(\underline{r},t)\, \hat{A}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t)\, \psi(\underline{r},t)\right]$$

$$= \int d^3r \left[\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)}_{SG^*:\ \frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*} \underline{\hat{A}\psi} + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi + \underline{\psi^* \hat{A}} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)}_{SG:\ -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi} \right]$$

hermitesch

$$= \frac{i}{\hbar}\psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \psi$$

$$\longrightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle} \quad (4.43)$$

vgl. klass. Mechanik: $\frac{dA}{dt} = \{H, A\} + \frac{\partial A}{\partial t}$!!

"fast": $\{H, A\} \not\rightarrow \cancel{\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, <A>]}$

$$\longrightarrow \frac{i}{\hbar} <[\hat{H}, \hat{A}]>$$

· Anwendung auf $\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}$:

(i) $\frac{\partial \hat{\underline{r}}}{\partial t} = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\underline{r}}] = [\frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m}, \hat{\underline{r}}] \underset{(4.17)}{\overset{(4.13)}{=}} \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{\underline{p}}}{m}$ (4.44)

(ii) $\frac{\partial \hat{\underline{p}}}{\partial t} = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\underline{p}}] = [U(\hat{\underline{r}}), \hat{\underline{p}}] \underset{(4.14)}{=} i\hbar \underline{\nabla} U(\underline{r})$ (4.45)

$\xrightarrow{\text{in (4.43)}}$

$$\boxed{\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt} <\hat{\underline{r}}> &= \frac{1}{m} <\hat{p}> \\ \frac{d}{dt} <\hat{\underline{p}}> &= - <\underbrace{\underline{\nabla} U(\underline{r})}_{\text{„Kraft"}}> \end{aligned}\right\} \quad m \frac{d^2}{dt^2} <\hat{\underline{r}}> = - <\underline{\nabla} U(\underline{r})>} \quad (4.46)$$

... Ehrenfestsches Theorem für $<\hat{\underline{r}}>$

... $<\hat{\underline{r}}>$ genügt fast Newtonscher Bew. gl.

NB: $-\nabla U(\hat{\underline{r}}) = -k \hat{\underline{r}}$ ... harmonische Kraft

$$\longrightarrow m \frac{d^2}{dt^2} <\hat{r}> = -k <\hat{\underline{r}}> \checkmark$$

• Korrespondenzprinzip (Bohr):

$\boxed{\text{Im makroskop. Grenzfall gilt die klass. Mechanik}}$ (4.47)

wichtig: prüfe Konsistenz von QT

(i) große Quantenzahlen

(ii) makroskop. Längenskala