

• Skalarprodukt: $\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r \psi^*(\underline{r}) \psi(\underline{r})$

• adjungierter Operator: $\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi | \psi \rangle$
 $= \int d^3r (\hat{A}^+ \psi)^* \psi$

• 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 $f(\underline{r})$:

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

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

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

· Bsp: mittlerer Ort $\langle \underline{r} \rangle$
 Ortsunschärfe Δr mit $(\Delta r)^2 := \langle (\underline{r} - \langle \underline{r} \rangle)^2 \rangle$
 $= \langle r^2 \rangle - \langle \underline{r} \rangle^2$ } (4.31) [s. Kap. 3.1d]

b) Im Impulsraum

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

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

· QT: $\langle f(\underline{p}) \rangle = \int d^3 p |\bar{\varphi}(\underline{p}, t)|^2 f(\underline{p}) = \langle \bar{\varphi} | f(\underline{p}) | \bar{\varphi} \rangle$ (4.33)

· Bsp: mittlerer Impuls $\langle \underline{p} \rangle$
 Impulsunschärfe Δp mit $(\Delta p)^2 := \langle (\underline{p} - \langle \underline{p} \rangle)^2 \rangle$
 $= \langle p^2 \rangle - \langle \underline{p} \rangle^2$ } (4.34) (s. Kap. 3.1d)

Frage:

Berechnung von $\langle p \rangle$ mit $\psi(x)$, also im Ortsraum? (10)

$\langle p \rangle = \int dp p \underbrace{|\bar{\varphi}(\underline{p}, t)|^2}_{\varphi^*(\underline{p}, t) \varphi(\underline{p}, t)}$ mit $\bar{\varphi}(\underline{p}, t) \stackrel{(34)}{=} \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{x}}$

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

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

part. Integr. in x'
 $= \int dx \psi^*(x, t) \left[\underbrace{\text{it} \psi(x', t) \delta(x-x')}_{=0} \Big|_{x'=-\infty}^{\infty} - \text{it} \int dx' \delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x', t) \right]$
 $= \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)$

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

$$\rightarrow \langle p \rangle = \int dx \psi^*(x,t) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}}_{= \hat{p} \dots (3.29) \dots \text{vgl. Einheitsimpulsoperator}} \psi(x,t) = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$$

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

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

Verallgemeinerung: $f(\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{p}^n \rightarrow \langle f(\hat{p}) \rangle = \langle \psi | f(\hat{p}) | \psi \rangle$
 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 $A(x, p, t)$

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

Bsp: Ort x , Impuls \hat{p} , Hamiltonoperator \hat{A} (Energie)

(4.38)

2. Erwartungswerte = Mittelwerte der Observable

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

\uparrow
repräsentiert
Zustand

2 Möglichkeiten:

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

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

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

(4.40)

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

Beweis: $\hat{r} = \dots$ s. Übungen

• Forderung: reeller Erwartungswert einer Observable \hat{A} (4.41)
 $\rightarrow \hat{A}$ hermitesch

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

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

• Übersetzungsversucht in (4.38) nicht eindeutig:

Bsp: $x, p \rightarrow \begin{cases} \hat{x}, \hat{p} \\ \hat{p}, \hat{x} \end{cases} \left. \vphantom{\begin{matrix} \hat{x}, \hat{p} \\ \hat{p}, \hat{x} \end{matrix}} \right\} \text{ nicht hermitesch}$
 $\rightarrow \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \left. \vphantom{\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})} \right\} \text{ hermitesch}$

Beweis: s. Übungen

\rightarrow Hermitizität & „Empirie“ helfen bei Zweifelsfälle

4.3 Ehrenfest'sches Theorem

• Theorem: Mittelwerte $\langle \hat{A} \rangle$ gehorchen (fast) Bewegungsgln. der klass. Mechanik

• linearer Operator \hat{A} :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{d}{dt} \left[\int d^3r \psi^*(r,t) \hat{A}(\hat{r}, \hat{p}, t) \psi(r,t) \right] \\ &= \int d^3r \left[\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right)}_{\text{SG}^*: \frac{i}{\hbar} \hat{A} \psi^*} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \underbrace{\psi^* \hat{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right)}_{\text{SG}: -\frac{i}{\hbar} \hat{A} \psi} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \psi^* [\hat{A}, \hat{A}] \psi \end{aligned}$$

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

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

"fast": $\{H, A\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [A, \langle A \rangle]$

$$\rightarrow \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$

Anwendung auf \hat{r}, \hat{p} :

$$(i) \frac{\partial \hat{r}}{\partial t} = 0, [A, \hat{r}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{r} \right] \stackrel{(4.13)}{\stackrel{(4.17)}}{=} \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}}{m} \quad (4.44)$$

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

$$\overline{\text{in (4.43)}} \left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= - \underbrace{\langle \nabla U(\underline{r}) \rangle}_{\text{Kraft}} \end{aligned} \right\} m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = - \langle \nabla U(\underline{r}) \rangle \quad (4.46)$$

... Ehrenfest'sches Theorem für $\langle \hat{r} \rangle$

... $\langle \hat{r} \rangle$ genügt fast Newtonscher Bew. gl.

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

$$\rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = -k \langle \hat{r} \rangle \quad \checkmark$$

• Korrespondenzprinzip (Bohr):

Im makroskop. Grenzfall gilt die klass. Mechanik (4.47)

wichtig: prüfe Konsistenz von QT

(i) große Quantenzahlen

(ii) makroskop. Längenskala