zur bequemen Verallgemeinerung des bisherigen benötigen wir:

Observable, Operator, hermitescher Operator

Observable = observierbare Variable
= physikalische Messgröße

im SG-Experiment beispielsweise Observable μ_z:

1. mögliche Messwerte:

$$-\mu_0 \;,\; +\mu_0$$

2. entsprechende orthogonale Zustände

$$|\psi_-\rangle \;,\; |\psi_+\rangle$$

(P2) → 3. Messwahrscheinlichkeiten bei System im Zust. $|\psi\rangle$:

$$p_- = |\langle\psi_-|\psi\rangle|^2 \;,\quad p_+ = |\langle\psi_+|\psi\rangle|^2 \;,$$

der Erwartungswert der Observablen μ_z im Systemzustand $|\psi\rangle$ ist demnach:

$$\langle\mu_z\rangle_{|\psi\rangle} := (-\mu_z)\, p_- + (+\mu_z)\, p_+$$
$$= (-\mu_z)\, |\langle\psi_-|\psi\rangle|^2 + \mu_z\, |\langle\psi_+|\psi\rangle|^2$$

Verallgemeinerung:

eine Observable A eines q.-m. Systems ist gegeben durch:

1. mögliche Messwerte

$$a_1, a_2, \ldots, a_n \in \mathbb{R}$$

2. entsprechende orthogonale Zustände ("Eigenzustände")

$$|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_n\rangle$$

(oft mit $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \ldots, |a_n\rangle$ bezeichnet)

(P2) $\rightarrow$ 3. <u>Messwahrscheinlichkeit</u> von a_i im Zust. $|\psi\rangle$:

$$p_i = |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2$$

<u>Erwartungswert</u> von A im Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \sum_{i=1}^{m} a_i\, p_i = \sum_{i=1}^{m} a_i |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 .$$

Handhabe von Observablen <u>wesentlich</u> erleichtert durch Verwendung <u>hermitescher Operatoren</u> $\rightarrow$

<u>Operator</u> $\hat{A}$ $\equiv$ <u>lineare</u> Abbildung $\hat{A}: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle \longmapsto \hat{A}|\psi\rangle$$

d.h.: $\hat{A}(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{A}|\varphi\rangle$

$\hat{A}(\lambda|\psi\rangle) = \lambda\hat{A}|\psi\rangle$

Operatoren lassen sich addieren, mit einem <u>Skalar</u> $\lambda \in \mathbb{C}$ multiplizieren und miteinander multiplizieren:

$\hat{A}+\hat{B}$: $\quad (\hat{A}+\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$

$\lambda\hat{A}$: $\quad (\lambda\hat{A})|\psi\rangle = \lambda\hat{A}|\psi\rangle \qquad (\lambda\hat{A} \equiv \hat{A}\lambda)$

$\hat{A}\hat{B}$: $\quad (\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) \equiv \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$

<u>Vorsicht</u>: i.d.R. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$!

<u>Beispiele für Operatoren in Dirac-Notation</u>

$\mathcal{H}$, n-dimensional mit ONB $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_n\rangle$

1) $\hat{P}_1 := |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|$,

wirkt gemäß $\hat{P}_1|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle\overbrace{\langle\varphi_1|\psi\rangle}^{\in\mathbb{C}} = \langle\varphi_1|\psi\rangle|\varphi_1\rangle$

damit also $\hat{P}_1 |\varphi_1\rangle = |\varphi_1\rangle$,

$\hat{P}_1 |\varphi_2\rangle = 0 \quad , \; \ldots , \quad P_1 |\varphi_n\rangle = 0$;

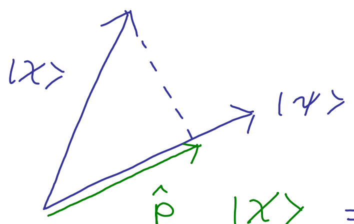
d.h. $\hat{P}_1$ ist <u>Projektion auf $|\varphi_1\rangle$</u> ;

allg.: $\hat{P}_i := |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$: Projektion auf $|\varphi_i\rangle$

$\hat{P}_{|\psi\rangle} := |\psi\rangle\langle\psi|$: Projektion auf $|\psi\rangle$

$(\|\psi\| = 1)$

„geometrisch":



$\hat{P}_{|\psi\rangle} |\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle\, |\psi\rangle$

2) „<u>Zerlegung der Eins</u>": ("Eins" = Identitätsabb. $\mathbb{1} : |\psi\rangle \mapsto |\psi\rangle$)

$$\hat{\mathbb{1}} \overset{!}{=} \sum_i \hat{P}_i = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

denn für bel. $|\psi\rangle = \sum_\ell a_\ell |\varphi_\ell\rangle$ ist

$$\Big(\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Big)|\psi\rangle = \sum_i \big(|\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}_{a_i}\big) = \sum_i a_i |\varphi_i\rangle$$

$$= |\psi\rangle \quad \checkmark$$

3) für $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{C}$ sei Operator $\hat{A}$ def. durch

$$\hat{A} := \sum_i a_i \hat{P}_i = \sum_i a_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \,, \qquad (*)$$

$\longrightarrow \quad \hat{A}|\varphi_\ell\rangle = a_\ell |\varphi_\ell\rangle$,

d.h. a_ℓ ist Eigenwert von $\hat{A}$ mit Eigenvektor $|\varphi_\ell\rangle$,

(*) ist sog. "Spektraldarstellung" (Eigenwertdarst.) von $\hat{A}$.

($\Rightarrow$ Spektrum = Menge aller Eigenwerte)

4) $\hat{E}_{ij} := |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \quad \ldots$

Basisdarstellung von Zuständen und Operatoren:

$|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ ONB von $\mathcal{H}$

(i) $$|b\rangle = \mathbb{1}\,|b\rangle \underset{\text{„Zerl. d. } \mathbb{1}\text{"}}{=} \Big(\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Big)|b\rangle$$

$$= \sum_i \underbrace{\langle\varphi_i|b\rangle}_{=:\, b_i} |\varphi_i\rangle = \sum_i b_i\,|\varphi_i\rangle \overset{\text{Def.}}{\equiv} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

(ii) $$\hat{A} = \mathbb{1}\,\hat{A}\,\mathbb{1} = \Big(\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Big)\hat{A}\Big(\sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\Big)$$

$$= \sum_{ij} |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\hat{A}|\varphi_j\rangle}_{=:\, A_{ij}} \langle\varphi_j|$$

$$= \sum_{ij} A_{ij}\,|\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \overset{\text{Def.}}{\equiv} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

„Matrixdarst. von $\hat{A}$ bzgl. $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \dots$"

folglich:

$$|c\rangle := \hat{A}\,|b\rangle = \sum_{ij} A_{ij}\,|\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_j|b\rangle}_{= b_j} = \sum_{ij} A_{ij}\,b_j\,|\varphi_i\rangle$$

$$= \sum_i \overbrace{\Big(\sum_j A_{ij}\,b_j\Big)}^{= c_i} |\varphi_i\rangle \quad ; \quad \text{d.h.} \quad c_i = \sum_j A_{ij}\,b_j$$

$$\overset{\text{Def}}{\equiv} \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

Hermitesche Adjunktion

Der zu $\hat{A}$ hermitesch adjungierte Operator $\hat{A}^\dagger$ erfüllt per def.

$$\boxed{\langle \psi, \hat{A}\varphi\rangle = \langle \hat{A}^\dagger\psi, \varphi\rangle}$$

für alle ψ, φ.

$$\rightarrow \quad \langle \psi|\hat{A}|\varphi\rangle \equiv \langle \psi, \hat{A}\varphi\rangle = \langle \hat{A}^\dagger\psi, \varphi\rangle = \langle \varphi, \hat{A}^\dagger\psi\rangle^*$$

also $$\boxed{\langle \psi|\hat{A}|\varphi\rangle^* = \langle \varphi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle}$$

es gilt:

(i) $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

(ii) $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$

(iii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$!

Beispiele:

1) $$E_{ij}^\dagger = (|\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|)^\dagger \overset{!}{=} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_i| = E_{ji}$$

2) $$\hat{A} = \sum_i a_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \longrightarrow \hat{A}^\dagger = \sum_i a_i^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

3) $$\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \longrightarrow \hat{A}^\dagger = \sum_{ij} A_{ji}^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

Hermitescher Operator

$\hat{A}$ hermitesch (selbstadjungiert) g.d.w. $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

Satz

$\hat{A}$ hermitesch $\iff$ es gibt orthonormale Eigenbasis $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_n\rangle$ und reelle Eigenwerte $a_1, a_2, \ldots, a_n$ derart, dass

$$\hat{A} \overset{!}{=} \sum_i a_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

$\rightarrow$ die Observablen eines q.m Systems mit HR $\mathcal{H}$ entsprechen genau den hermiteschen Operatoren auf $\mathcal{H}$:

mögliche Messwerte $\hat{=}$ Eigenwerte $a_1, \ldots, a_n$

orthogonale Zustände $\hat{=}$ Eigenvektoren $|\varphi_1\rangle, \ldots, |\varphi_2\rangle$

ab sofort:

Observable A $\equiv$ herm. Operator $\hat{A}$

dann gilt für den Erwartungswert:

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} \overset{(P2)}{=} \sum_i a_i \underbrace{|\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2}_{p_i} = \sum_i a_i \langle\psi|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi| \underbrace{\Big(\sum_i a_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Big)}_{=\hat{A}} |\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

d.h.

$$\boxed{\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$