6.4 1D harmonic oscillator revisited

- **Was wir schon wissen** (Kap. 4, Mechanik Kap. 1.4.9)

Motivation:

→ Atom- und Molekülspektren

→ Gitterschwingungen → Normlkoordinaten → ungekoppelte HO $\xrightarrow{\text{QM}}$ Phononen;

Wärmekapazität von Festkörpern bei niedrigen Temperaturen $c(T \to 0) \sim T^3$ (Debey)

→ "Quantisierung" des elektromagnetischen Feldes → Hohlraumstrahlung (Planck, 1900)

klassische Beschreibung:

Teilchen oszilliert, $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$, $\omega^2 = \frac{k}{m}$,

Energie $E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + U(x) = ... = \frac{m}{2}\omega^2 A^2$ zwischen $0 \le E < \infty$, kontinuierlich

quantenmechanische Beschreibung: (Kap. 4)

<u>Ohne Rechnung</u>:

→ da Potenzial U(x) zeitunabhängig, folgt $\tilde{\psi}(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$.

→ da U(x) = U(-x) sind alle WF $\psi(x)$ gerade oder ungerade.

→ da wir das eindimensionale Problem behandeln und $U(x \to \pm\infty) = \infty$, erwarten wir für die untersuchte gebundene Bewegung ein diskretes, nichtentartetes Energiespektrum.

<u>Mit Rechnung</u>:

In Kap. 4 haben wir mit der Sommerfeld´sche Polynommethode die stationäre Schrödinger-Gleichung in (wie wir jetzt wissen) Ortsdarstellung gelöst, um $\psi(x)$ und E_n zu bestimmen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\,\psi(x) = E\,\psi(x) \xrightarrow{y=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,\ \alpha=\frac{2E}{\hbar\omega}} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + (\alpha - y^2)\,\psi(y) = 0 \ .$$

$\rightarrow$ Asymptotik: $\psi(y) \sim e^{-\frac{y^2}{2}} \leftrightarrow$ Normierbarkeit

$\rightarrow$ Asymptote abspalten, Potenzreihenansatz für den "Rest", Rekursionsformel

$$\overbrace{\psi(y) = f(y)e^{-\frac{y^2}{2}}}^{\uparrow} \quad , \quad \overbrace{f(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k}^{\uparrow} \quad , \quad \overbrace{a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k}^{\uparrow} .$$

$\rightarrow$ Normierbarkeit sichern

$$\alpha = 2n+1,\ n = 0,1,2,\ldots \text{ sowie } \begin{cases} a_1 = 0, \text{ wenn } n \text{ ungerade} \\ \\ a_0 = 0, \text{ wenn } n \text{ gerade} \end{cases}$$

$\rightarrow$ ergibt $E = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega,\ n = 0,1,2....$ äquidistantes nichtentartetes

Energiespektrum mit den dazugehörigen Eigenzuständen/EF

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right),$$

wobei $H_n(z) := (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$ die hermiteschen Polynome sind.

Diese lösen die ODE $\frac{d^2}{dy^2} - 2y\frac{d}{dy} + 2n) H_n(y) = 0.$

$\rightarrow$ für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte fanden wir

$$\lim_{n\to\infty} \left| \psi_n(x) \right|^2 = w_{kl}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}, & |x| < A \\ \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} .$$

- **Dirac: Darstellungsunabhängige, algebraische Lösung des EWP für den Hamilton-Operator des HO**

ausschließlich unter Verwendung der darstellungsinvarianten (warum?) Vertauschungs-relation zwischen Orts- und Impulsoperator $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$ $\rightarrow$ Operator-Methode oder Besetzungszahldarstellung $\leftrightarrow$ II. Quantisierung (s.u.)

$$H(p_x,x)=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2 \xrightarrow{\text{Korrespondenzprinzip}} \hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad \text{mit } [\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar\,. \tag{H1}$$

Dirac führt den Operator $\hat{a}$ und seinen adjungierten $\hat{a}^+$ ein

$$\begin{aligned}\hat{a}&:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}+\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x\\ \hat{a}^+&:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}-\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x\end{aligned} \quad\leftrightarrow\quad \begin{aligned}\hat{x}&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^++\hat{a}\right)\\ \hat{p}_x&=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^+-\hat{a}\right)\end{aligned}\quad. \tag{H2}$$

Offensichtlich sind weder $\hat{a}$ noch $\hat{a}^+$ selbstadjungiert. Sie genügen der Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{a},\hat{a}^+\right]=1,\ \text{bzw.}\ \hat{a}\hat{a}^+=1+\hat{a}^+\hat{a} \tag{H3}$$

denn

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}+\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x\,,\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}-\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x\right]=-\frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}_x]}_{i\hbar}+\frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{p}_x,\hat{x}]}_{-i\hbar}=\frac{i}{2\hbar}(-i\hbar+i\hbar)=1\,.$$

Wegen $\quad \hat{a}^+\hat{a}=\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2+\frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_x^2+\frac{i}{2\hbar}\underbrace{\left(\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}\right)}_{1/2}=\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2+\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right)-\frac{1}{2}$ $\quad$ folgt

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right). \tag{H4}$$

Damit ist das Eigenwertproblem (EWP) für den Hamilton-Operator $\hat{H}$ auf das des Operators

$$\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a} \tag{H5}$$

zurückgeführt. Wir bezeichnen die EF des Operators $\hat{N}$ mit $|n\rangle$, die entsprechenden EW mit n und lösen die Gleichung

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \ . \tag{H6}$$

- **Eigenwerte von** $\hat{H}$

(i) Der Operator $\hat{N}$ ist hermitesch, denn $\hat{N}^{+} = \left(\hat{a}^{+}\hat{a}\right)^{+} = \hat{a}^{+}\hat{a}^{++} = \hat{a}^{+}\hat{a} = \hat{N}$. Also sind die EW n reell.

(ii) Die EW von $\hat{N}$ sind nicht negativ, denn $n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \langle \hat{a}\, n|\hat{a}\, n\rangle \geq 0$. Damit ist das Spektrum von $\hat{N}$ nach unten beschränkt.

(iii) Aus $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ folgt $\hat{N}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$.

Das bedeutet: Wenn $|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n ist, dann ist $\hat{a}|n\rangle$ ebenfalls EF von $\hat{N}$, allerdings zum EW (n-1). Beweis:

$$\hat{N}\,\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}^{+}\hat{a})\,\hat{a}|n\rangle \overset{(H3)}{=} (\hat{a}\hat{a}^{+}-1)\,\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\,(\hat{a}^{+}\hat{a}-1)|n\rangle = \hat{a}\,\hat{N}|n\rangle - \hat{a}|n\rangle = \hat{a}\,n|n\rangle - \hat{a}|n\rangle = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$$

Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die EW von $\hat{N}$ (wie die von $\hat{H}$) nicht entartet sind[1)], folgt $\hat{a}|n\rangle = \mathrm{const}|n-1\rangle$ wegen $\hat{N}|n-1\rangle = (n-1)|n-1\rangle$ (H6). Im Gegensatz zu $|n\rangle$ ist $\hat{a}|n\rangle$ noch nicht normiert. Wir finden $\langle \hat{a}\, n|\hat{a}\, n\rangle = \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$, damit ist

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \ . \tag{H7}$$

(iv) Analog wird die Gültigkeit der Relation $\hat{N}\left(\hat{a}^{+}|n\rangle\right) = (n+1)\left(\hat{a}^{+}|n\rangle\right)$ bewiesen:

$$\hat{N}\hat{a}^{+}|n\rangle = \hat{a}^{+}(\hat{a}\hat{a}^{+})|n\rangle \overset{(H3)}{=} \hat{a}^{+}(\hat{a}^{+}\hat{a}+1)|n\rangle = \hat{a}^{+}\hat{N}|n\rangle + \hat{a}^{+}|n\rangle = \hat{a}^{+}n|n\rangle + \hat{a}^{+}|n\rangle = (n+1)\left(\hat{a}^{+}|n\rangle\right).$$

Also ist $\hat{a}^{+}|n\rangle = \text{const}\,|n+1\rangle$; Normierung ergibt

$\left|\hat{a}^{+}|n\rangle\right|^{2} = \langle \hat{a}^{+}n|\hat{a}^{+}n\rangle = \langle n|\hat{a}\hat{a}^{+}|n\rangle = \langle n|1+\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = (1+n)\langle n|n\rangle = 1+n$,d.h.

$$\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \ . \qquad \text{(H8)}$$

Zwischenbilanz: Ist $|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n ist, dann ist $\hat{a}|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n - 1 und $\hat{a}^{+}|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n + 1: Damit gilt z.B.

$(\hat{a}^{+})^{2}|n\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2}\;|n+2\rangle$ oder $(\hat{a})^{3}|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\;|n-3\rangle$ usw.

(v) Bei wiederholter Anwendung von $\hat{a}$ auf $|n\rangle$ könnten im Widerspruch zu **(ii)** negative EW auftreten. Folglich muss ein Grundzustand → Vakuumzustand $|n_0\rangle$ mit $\hat{a}|n_0\rangle = 0$ existieren. Wegen $\hat{N}|n_0\rangle = \hat{a}^{+}\hat{a}|n_0\rangle = \hat{a}^{+}\,0 = 0$ ist der EW von $\hat{N}$ zum Grundzustand $|n_0\rangle$ gleich Null. Entsprechen der in (H6) vereinbarten Notation schreiben wir deshalb den Grundzustand als $|0\rangle$ anstelle von $|n_0\rangle$; allerdings ist $|0\rangle$ nicht der Nullvektor, denn $\langle 0|0\rangle = 1$.

(vi) Das Spektrum von $\hat{N}$ ist nach oben unbeschränkt.
Zum Beweis nehmen wir das Gegenteil an. Sei n_{max} der größte EW von $\hat{N}$, d.h. $\hat{a}^{+}|n_{max}\rangle = 0$. Dann wäre

$$0 = \left|\hat{a}^{+}|n_{max}\rangle\right|^{2} = \langle \hat{a}^{+}n_{max}|\hat{a}^{+}n_{max}\rangle = \langle n_{max}|\hat{a}\hat{a}^{+}|n_{max}\rangle = \langle n_{max}|(\hat{N}+1)|n_{max}\rangle = n_{max}+1 \ ,$$

also n_{max} im Widerspruch zu (ii) negativ.

Fazit aus (i) – (vi): EW des Operators $\hat{N}$ sind n = 0, 1, 2, … . Wegen (H4) ,
$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$, ergibt sich daraus sofort das schon bekannte Energiespektrum des 1D HO

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \; n = 0,1,2... \qquad \text{(H9)}$$

mit seine diskreten, äquidistanten, nicht entarteten Energieniveaus.

Wir wollen (H7-9) folgendermaßen **interpretieren**: Der n-te angeregte Zustand $|n\rangle$ des HO ist mit n Schwingungsquanten der Energie $\hbar\omega$ besetzt.

$\hat{N}$ gemäß $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ $\rightarrow$ **Besetzungszahloperator** (Operator zur Observable: Anzahl der Schwingungsquanten in $|n\rangle$)

$\hat{a}$ gemäß $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ $\rightarrow$ **Vernichtungsoperator**: Anwendung von $\hat{a}$ auf $|n\rangle$ vernichtet ein Schwingungsquant

$\hat{a}^{+}$ gemäß $\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ $\rightarrow$ **Erzeugungsoperator**: Anwendung … erzeugt … .

Bemerkungen:

1. zweite Quantisierung

Offensichtlich lassen sich die Operatoren von Observablen, die nach dem Korrespondenzprinzip $Q(\underline{p},\underline{r}) \rightarrow \hat{Q} = Q(\hat{\underline{p}},\hat{\underline{r}})$ aus den entsprechenden Phasenraumvariablen gebildet werden können, als Produkte der Operatoren $\hat{a}$ und $\hat{a}^{+}$ darstellen. Zu berücksichtigen ist allerdings, dass es nicht für alle Operatoren klassische Analoga gibt, z.B. nicht für den Spin- oder für den Paritätsoperator.

Die Darstellung aller Operatoren von Observablen durch Kombinationen aus Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wird als zweite Quantisierung bezeichnet und ausführlich im Kurs ThPh V, QM II behandelt. Sie ist von grundlegender Bedeutung für die quantenmechanische Behandlung von Vielteilchensystemen.

2. Glauber-Zustände

Obwohl $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$ als nichthermitesche Operatoren zu keiner Observablen korrespondieren, sind ihre EF $|\alpha\rangle$ gemäß

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle,\ \alpha \in C \text{ komplex}$$

physikalisch relevant. Diese quasiklassischen/kohärenten/Glauber-Zustände haben interessante Eigenschaften, von denen einige ohne Beweis aufgeführt seien

- $\langle \Delta x \rangle_{|\alpha\rangle} \langle \Delta p_x \rangle_{|\alpha\rangle} \overset{!}{=} \frac{\hbar}{2}$ $\rightarrow$ "minimale Wellenpakete"
- $\langle x \rangle_{|\alpha\rangle}$ und $\langle p_x \rangle_{|\alpha\rangle}$ genügen den klassischen Bewegungsgleichungen (oszillieren mit Frequenz ω, wohingegen $\langle x \rangle_{|n\rangle} = \langle p_x \rangle_{|n\rangle} = 0$.

- **Eigenfunktionen von $\hat{H}$**

$\hat{H}$ und $\hat{N}$ haben gemeinsame EF. Diese lassen sich durch aufeinanderfolgende Anwendung von $\hat{a}^+$ aus dem Grundzustand $|0\rangle$ gewinnen:

$\hat{a}^+|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle \to |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^+|0\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle \to |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1\cdot 2}}(\hat{a}^+)^2|0\rangle$

also

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle,\ n = 0,1,2,... \tag{H10}$$

- **EF von $\hat{H}$ in Ortsdarstellung**

Grundzustand: Wir projezieren $\hat{a}|0\rangle = 0$ auf $|x\rangle$ und erhalten

$$0 = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\underbrace{\langle x|\hat{x}|0\rangle}_{x\langle x|0\rangle = x\psi_0(x)} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\underbrace{\langle x|\hat{p}_x|0\rangle}_{-i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle = -i\hbar\frac{d\psi_0(x)}{dx}} =$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\psi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d\psi_0(x)}{dx} \quad \text{(H11).}$$

Diese ODE für die Grundzustandwellenfunktion lässt sich durch Trennung der Variablen lösen ($\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}\frac{2m\omega}{\hbar}}x\,dx = \frac{d\psi_0}{\psi_0}$). Nach Normierung folgt das bereits in Kap. 4 gefundene Ergebnis

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{H12}$$

Angeregte Zustände: Sukzessive können die Wellenfunktionen der angeregten Zustände gewonnen werden, z.B.

$$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\,\psi_0(x) \qquad \text{(H13)}$$

denn mit (H11) $\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}\psi_0$ ist $-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,x\frac{d\psi_0}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x\,\psi_0$.

Bemerkung: Die Substitution $q := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$ mit $\frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dq}$ in $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$ vereinfacht die Ausdrücke erheblich, denn nun ist

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{d}{dq}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)$$

also

$$\psi_n(q) := \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle q|(\hat{a}^+)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n \psi_0(q)\,. \qquad \text{(H14)}$$

Zeigen Sie, dass daraus folgt

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(q)\, e^{-\frac{q^2}{2}}, \quad n = 0,1,2,\ldots$$

wobei $H_n(q) = (-1)^n e^{q^2}\frac{d^n}{dq^n}e^{-q^2}$ die Hermiteschen Polynome sind. Die $H_n(q)$ sind Lösungen der linearen[1)] homogenen ODE 2. Ordnung $\left(\frac{d^2}{dq^2} - 2q\frac{d}{dq} + 2n\right)H_n(q) = 0$ ist (zeigen!, vgl. Nolting, 4.170, S. 288 oder Fließbach, S. 232).

Damit ist der Anschluss an die Behandlung des 1D HO nach der Sommerfeld´schen Polynommethode im Kap. 4 vollzogen.

7. Der Messprozess in der QM

Beteiligte: Messobjekt ($\rightarrow$ MO)
Messapparatur ($\rightarrow$ MA)
Beobachter (B)

Messung: Wechselwirkung ($\rightarrow$ WW) zwischen MO, MA und B

klassische Physik: Diese WW/wechselseitige Beeinflussung ist vernachlässigbar.

Quantenmechanik: WW zwischen MO und MA ist nicht vernachlässigbar. Das Einschalten der (makroskopischen) MA führt in der Regel zur unkontrollierten Störung des (mikroskopischen) MO. Die Messung ändert den Zustand des MO (Zustandsreduktion, vgl. 3. Postulat), d.h. bei unmittelbar anschließender zweiter Messung befindet sich das MO in der Regel in einem anderen Zustand als vor der Messung.

- **Kombinierte Messung zweier Observablen A und B**

Sei $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ und $\hat{B}|\phi_n\rangle = b_n|\phi_n\rangle$. Wir unterscheiden folgende beide Fälle:

<u>1. Fall:</u>
Die beiden zugeordneten Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ sind vertauschbar ($\rightarrow$ kompatible Observable): $[\hat{A},\hat{B}] = 0$. Dann besitzen sie einen gemeinsamen VONS, $\{|\psi_n\rangle\}$.

Eine A-Messung im Zustand $|\psi\rangle$ ergibt den Messwert a_n mit Prob($a = a_n$) $= |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$ und reduziert $|\psi\rangle$ auf $|\psi_n\rangle$.
Eine sofort anschließende B-Messung ergibt mit Sicherheit den Wert b_n, denn
Prob($b = b_n$ | $a = a_n$) $= |\langle\psi_n|\psi_n\rangle|^2 = 1$.

2. Fall:

$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$, d.h. $\hat{A}$ und $\hat{B}$ besitzen unterschiedliche VONS, $\{|\psi_n\rangle\}$ bzw. $\{|\phi_n\rangle\}$.

Nach der A-Messung befindet sich das MO/qmS nicht in einem Eigenzustand von $\hat{B}$.

Deshalb ist Prob(b = b_n | a = a_n) $= \left|\langle\phi_n|\psi_n\rangle\right|^2 \neq 1$.

Fazit: Werden in der QM zwei verschiedene Observable zeitnah in unterschiedlicher Reihenfolge gemessen, kann das Ergebnis unterschiedlich sein. Manche Observable sind in der QM nicht gleichzeitig scharf messbar.

Die Behauptung/Feststellung, A und B seien/sind nicht gleichzeitig scharf messbar, wenn die zugeordneten Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ nicht kommutieren, wird durch die Angabe der folgenden objektiven unteren Schranke für die Streuung / die mittleren quadratischen Schwankungen der Messwerte um den qmEWW quantifiziert:

$\underline{\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|}$ $\rightarrow$ verallgemeinerte **Heisenberg´sche Unschärferelation**,

wobei die Streuung über die qm EWW im Zustand $|\psi\rangle$ wie folgt definiert ist:

$$\Delta A = \sqrt{\left\langle\left(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\right)^2\right\rangle} = \sqrt{\langle\psi|\left(\hat{A}-\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right)^2|\psi\rangle} = \sqrt{\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle-\left(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right)^2} \ .$$

Der Beweis dieses Satzes fußt wesentlich darauf, dass $\hat{A}$ und $\hat{B}$ hermitesche Operatoren sind. Mit $\hat{A}$ und $\hat{B}$ sind auch $\Delta\hat{A} = \hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$ und $\Delta\hat{B} = \hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$ hermitesch. Wir führen den (nichthermiteschen!) Operator $\hat{Q} := \Delta\hat{A} - i\lambda\,\Delta\hat{B}$, λ reell, und betrachten die nichtnegative Funktion

$$f(\lambda) = \left\langle\hat{Q}^+\middle|\hat{Q}\right\rangle = \langle\psi|\hat{Q}^+\hat{Q}|\psi\rangle = \left\langle\hat{Q}\psi\middle|\hat{Q}\psi\right\rangle \geq 0 \text{ für alle } \lambda \ .$$

Es ist

$$f(\lambda) = \left\langle \left(\Delta\hat{A} + i\lambda\,\Delta\hat{B}\right)\left(\Delta\hat{A} - i\lambda\,\Delta\hat{B}\right)\right\rangle = \underbrace{\left\langle \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \right\rangle}_{\alpha} + i\lambda \underbrace{\left\langle \Delta\hat{B}\,\Delta\hat{A} - \Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} \right\rangle}_{\beta} + \lambda^2 \underbrace{\left\langle \left(\Delta\hat{B}\right)^2 \right\rangle}_{\gamma} = \alpha - i\beta\lambda + \gamma\lambda^2.$$

α und γ sind positiv, denn für jeden hermiteschen Operator $\hat{F}$ gilt

$$\left\langle \hat{F}^2 \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{F}\hat{F} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \hat{F}^+\psi \middle| \hat{F}\psi \right\rangle = \left\langle \hat{F}\psi \middle| \hat{F}\psi \right\rangle \geq 0\,.$$

Wir berechnen β^2

$$\beta^2 = \left\langle \left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] \right\rangle^2 = \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle^2 = -\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle \left\langle \left[\hat{B}, \hat{A}\right] \right\rangle = -\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle^* = -\left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle \right|^2$$

denn für hermitesche $\hat{A}$ und $\hat{B}$ gilt

$$\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle^* = \left\langle \left[\hat{B}, \hat{A}\right] \right\rangle = \left\langle \hat{B}\hat{A} \right\rangle - \left\langle \hat{A}\hat{B} \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{B}\hat{A} \middle| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \middle| \hat{A}\hat{B} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\,\hat{B}\,\psi \middle| \psi \right\rangle - \left\langle \hat{B}\,\hat{A}\,\psi \middle| \psi \right\rangle =$$
$$= \left\langle \psi \middle| \hat{A}\,\hat{B}\,\psi \right\rangle^* - \left\langle \psi \middle| \hat{B}\,\hat{A}\,\psi \right\rangle^* = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle^*.$$

Damit ist β rein imaginär.

Beachte: Wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ hermitesch sind, dann ist $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^+ = \left[\hat{B}, \hat{A}\right] = -\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$. Statt $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ ist $i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ hermitesch; der qmEWW $\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle$ ist also i.a. nicht reell.

Bei $\lambda = \dfrac{i\beta}{2\gamma}$ besitzt die positiv definite quadratische Funktion $f(\lambda) = \alpha - i\beta\lambda + \gamma\lambda^2$ ein lokales Minimum $\left(f'(\lambda) = 2\gamma\lambda - i\beta = 0,\ f''\big|_{\frac{i\beta}{2\gamma}} = 2\gamma > 0 \right)$, der entsprechende Funktionswert

$$f\left(\frac{i\beta}{2\gamma}\right) = \alpha - i\beta\frac{i\beta}{2\gamma} + \gamma\left(\frac{i\beta}{2\gamma}\right)^2 = \alpha + \frac{\beta^2}{4\gamma} > 0$$

ist positiv. Daraus folgt nach Multiplikation mit $\gamma > 0$ schließlich $\alpha\gamma > -\frac{\beta^2}{4}$, also

$\left\langle (\Delta\hat{A})^2 \right\rangle \cdot \left\langle (\Delta\hat{B})^2 \right\rangle \geq -\frac{1}{4}\left(-\left|\left\langle \left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|\right)$ bzw. $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|$ für

$\hat{A} = \hat{A}^+,\ \hat{B} = \hat{B}^+$.

- **Energie-Zeit-Unschärfe**

Die Zeit ist in der QM ein Parameter, der nicht als EW eines Operators $\hat{t}$ aufgefasst werden kann.
Es gibt verschieden Möglichkeiten der Herleitung der Energie-Zeit-Unschärfe $\Delta E\,\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

A: Formale Vorgehensweise: Angenommen, $\hat{A}$ und $\hat{H}$ sind nicht explizit zeitabhängig. Dann ist (vgl. Ehrenfest´sche Sätze $\rightarrow$ Übung oder Poissson-Klammern und Integrale der Bewegung in der KM)

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

Aus der verallgemeinerten UR folgt

$$\Delta A \cdot \Delta H \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle\right| \quad \text{bzw.} \quad \Delta H \cdot \frac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle\right|} \geq \frac{\hbar}{2}\ .$$

Wir führen das Zeitintervall Δt_A ein, indem sich der qmEWW $\left\langle\hat{A}\right\rangle$ gerade um die mittlere quadratische Schwankung ΔA verschiebt

$$\Delta t_A := \frac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle\right|}.$$

Ein solches charakteristisches Zeitintervall, das für eine nennenswerte Veränderung der statistischen Verteilung der Messwerte von A mindestens erforderlich ist, kann für alle Observable definiert werden. Da $\hat{H}$ die Energie E repräsentiert, "folgt" $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$.

Befindet sich ein qmS im EZ des zeitunabhängigen $\hat{H}$ ($\rightarrow$ stationärer Zustand), dann ist $\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = 0$ und Δt divergiert. Das ist nicht im Widerspruch zu $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$, da in diesem Zustand E scharf, also $\Delta E = 0$ ist.

B: Beschreibe qmT durch einen Wellenzug/Wellenpaket der Länge Δx. Für die Strecke Δx benötigt das Teilchen die Zeit $\Delta t \sim \frac{\Delta x}{\langle p \rangle / m}$ ("Zeitintervall des Vorbeiflugs"). Die Energieunschärfe ΔE ist wegen $E \sim \frac{p^2}{2m}$ etwa $\Delta E \sim \frac{\langle p \rangle \Delta p}{m}$. Das ergibt dann

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \frac{\langle p \rangle \Delta p}{m} \cdot \frac{\Delta x}{\langle p \rangle / m} = \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Bei der Verschiebung eines Wellenpaketes wird aus $\Delta x \rightarrow \Delta t$, aus $\Delta p \rightarrow \Delta E$ und aus $\Delta x \cdot \Delta p \rightarrow \Delta t \cdot \Delta E$