7. Verträglichkeit von Operatoren, Unschärferelation, "Quantenzahlen"

Kommutatoren: bisher $[p_i, x_i] = \frac{\hbar}{i}$, $[\vec{p}, V(\vec{x})] = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} V$

$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ $\qquad [L_1, L_2] = i\hbar L_3$

$[L_i, L_k] = \dots$ → Übungen

$\mathcal{A}, \mathcal{B}$ seien Observablen, ihnen zugeordnet sein hermitesche Operatoren $A = A^+$, $B = B^+$

$$(\Delta A)^2 :\overset{\text{s.o.}}{=} \overline{(A-\bar{A})^2}$$

7.1. $\Delta A \; \Delta B \geq \left| \overline{\frac{1}{2i}[A, B]} \right|$ grundlegende Ungleichung

bzw. für $a = A - \bar{A}$, $b = B - \bar{B}$

$$\overline{a^2}\;\overline{b^2} \geq \left|\left(\overline{\frac{1}{2i}[a,b]}\right)\right|^2$$

$$\overline{a^2} = (\psi, a^2\psi) = (a\psi, a\psi)$$

$u := a\psi$

$v := b\psi$

Beweise $(u,u)(v,v) \geq \left|\left(\frac{1}{2i}(\psi, [a,b]\psi)\right)\right|^2$

mit Cauchy-Schwarzscher Ungleichung

$$(u,u)(v,v) \geq |(u,v)|^2$$

Bew $\quad v = \frac{(u,v)}{(u,u)} u + w \qquad (w,u) = 0$

$$(v,v) = \frac{|(u,v)|^2}{|(u,u)|^2}(u,u) + \underbrace{(w,w)}_{\geq 0};$$

$w = 0$ → Gleichheitszeichen $v = \alpha u$

gibt $\overline{a^2}\ \overline{b^2} \geq |(u,v)|^2 = |\underbrace{(a\psi, b\psi)}_{z}|^2$

$$= (\mathrm{Re}\, z)^2 + \underbrace{|\mathrm{Im}\, z|^2}_{\parallel} \geq (\mathrm{Im}\, z)^2$$

$$\left(\frac{1}{2i}(\psi, [a,b]\psi)\right)^2 = \left(\frac{1}{2i}\overline{[a,b]}\right)^2 !$$

Gleichheitszeichen, wenn ψ, so daß

und $\begin{cases} a\psi = \alpha b\psi \\ \mathrm{Re}\, z = 0 \end{cases} \Rightarrow (\psi, (ab+ba)\psi) = 0$

$\rightsquigarrow \alpha$ imaginär

z.B. $\boxed{\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$

<u>minimale</u> Unschärfe für Lösung von

$$(x-\bar{x})\psi(x) = -ic\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - \bar{p}\right)\psi(x)$$

$$\psi(x) = \mathrm{const}\; e^{-(x-\bar{x})^2/2\hbar c}\; e^{-i/\hbar\, \bar{p} x}$$

Gaußsches Wellenpaket!

7.2 Energie - Zeit - Unschärfe

t ist kein Operator!

Q: sei irgendeiner Observablen zugeordneter Operator, keine <u>explizite</u> Zeitabhäng.
H: Hamilton-Op.

$\overset{\text{s.o.}}{\rightarrow}$ $(\Delta H)^2\, (\Delta Q)^2 \geq \left|\frac{1}{2i}\overline{[H,Q]}\right|^2$

$\underbrace{\Delta H}_{\text{Bez. auch } \Delta E}\ \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d}{dt}\overline{Q}\right|$ nach Bew.-Gl. für Operatoren (S. 32) typische Zeitunschärfe aus

$$\frac{\Delta Q}{\left|\frac{d}{dt}\bar{Q}\right|} \sim \Delta\tau_Q \;!$$

$$\rightsquigarrow \quad \Delta E\,\Delta\tau_Q \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \forall Q$$

denn $$\boxed{\Delta E\,\Delta\tau_{Q_{\min}} \geq \frac{\hbar}{2}}$$ Energie-Zeit-Unschärfe

für ψ_E Zustand mit scharfer Energie E : $\Delta E = 0$

$$H\psi_E = E\psi_E$$

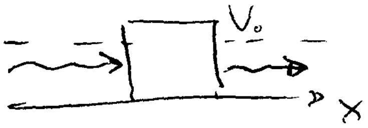
$\rightarrow$ $\Delta\tau \to \infty$, keine Änderung irgendeiner Observablen ...

$$i\hbar \frac{d}{dt}\bar{Q}^E = \overline{[H,Q]}^E = 0$$

$(\psi_E, Q\psi_E)$ ist zeitunabhängig.

Bem. (i) erinnere an 1-dim. Kastenpotential mit Tunnelvorgang

Wellenpaket ist nur endliche Zeit in "verbotenem" Bereich $\rightarrow$ Energieunschärfe



(vgl. Schwabl für etwas andere Darstellung)

(ii) Zerfall eines Teilchens

$\rightsquigarrow$ $\Delta\tau \sim \tau_{Zerfall}$ Halbwertszeit

denn $\Delta E \sim \frac{\hbar}{(2)\,\Delta\tau}$ Energieunschärfe — Linienbreite

7.3 Charakterisierung eines Zustands durch Eigenwerte eines vollständigen Satzes von Operatoren (Quantenzahlen)

Vorbem. $\langle A \rangle$, $\langle B \rangle$ seien simultan scharf, d.h. Zustandsv. ist Eigenvektor von A, B: dies ist nach obiger Unschärferelation in 7.1 nur möglich, wenn A und B vertauschen

Frage Wann legen die Eigenwerte eines Satzes von vertauschenden Operatoren den Zustand eindeutig fest?
(falls eindeutig: "vollständiger Satz" von Operatoren, z.B. p_1, p_2, p_3 ...)

! Ein beliebiger Zustandsvektor läßt sich nach solchen simultanen E.V. zerlegen

Satz: Es existieren stets simultane Eigenvektoren (-funktionen) von vertauschbaren Operatoren.

Bew. 1.) $[A, B] = 0$, $A\psi_a = a\psi_a$
ψ_a sei eindeutig durch A, a bestimmt
($\to$ 1-dim. Problem)

$$AB\psi_a = BA\psi_a = B(a\psi_a) = aB\psi_a$$

$\rightsquigarrow$ $B\psi_a$ E.V. von A mit E.W. a

Kurz. $\rightsquigarrow$ $B\psi_a = \text{const.}\ \psi_a$ ✓ o.k.

(49

2) $A\psi_{a\nu} = a\,\psi_{a\nu} \qquad \nu = 1,\dots r$

<u>Entartung</u>, z.B. 3D-Problem

Wahl! $(\psi_{a\nu}, \psi_{a\nu'}) = \delta_{\nu\nu'}$ ⊛ (→ Orthonormalisierungsverfahren)

wieder: $AB\psi_{a\nu} = a\,B\psi_{a\nu}$

(lasse a nun weg!)

→ $B\psi_{\nu} = \sum_{\nu'=1}^{r} C_{\nu\nu'}\psi_{\nu'}$ mit $C_{\nu\nu'} = (\psi_{\nu'}, B\psi_\nu)$

B hermitesch → $C^*_{\nu\nu'} = C_{\nu'\nu}$, d.h. C-Matrix hermitesch!

läßt sich <u>diagonalisieren</u> durch Einführung einer neuen Basis

$$\psi_i^{(diag)} = \sum_{\nu=1}^{r} U_{i\nu}\psi_\nu$$

(entspricht "Drehung" mit unitärer Matrix $U^+ = U^{-1}$)

dann

$$B\Big(\sum_\nu U_{i\nu}\psi_\nu\Big) = b_i\Big(\sum_\nu U_{i\nu}\psi_\nu\Big)$$

⊛ p.50

bzw. $$\boxed{\sum_\nu C_{\nu\nu'}U_{i\nu} = b_i U_{i\nu'}}$$

(nach Multipl. mit $(\psi_{\nu'}|$ und Benutzung von ⊛)

Eigenvektoren von A, B können immer noch entartet sein → dritte vertauschende Observable C scharf etc...

kann letztlich ein simultanes Eigenfunktionssystem finden, dessen Eigenwerte den Zustand charakterisieren

(Üb: n-dim. komplexer Vektorraum)

weitere Sätze (→ Schwabl)

Satz Gegeben sei ein vollständiges System von Eigenfunktionen $\psi_n(x)$, $n = 1, 2, \ldots$ zu Operatoren A, B mit Eigenwerten a_n, b_n. Dann kommutieren A und B (Umkehrung obiger Aussage)

Satz Ist O eine Funktion der Operatoren A, B eines vollständigen Satzes, so hat O die Basis des vollständigen Satzes ebenfalls als Basis

Satz Ein Operator O, der mit einem vollständigen Satz von Operatoren kommutiert, ist Funktion dieser Operatoren (Umkehrung von vorhergehendem Satz)

Bem. ⊛ p. 49

$$\sum_\nu U_{i\nu} C_{\nu\nu'} = b_i U_{i\nu'}$$

$$U\,C = C_{diag}\,U$$

$$U\,C\,\underbrace{U^{-1}}_{= U^+} = C_{diag}$$

mit unitären U:

$$(U^{-1})_{i\nu} = U^*_{\nu i}$$

$$UU^+ = U^+U = 1$$

wie bei orthogonalen Transform. (vgl. Mechanik: Trägheitstensor)

Bem. analog zu orthogonalen Transf. (→ Drehungen), die symm. reelle Matrix diagonalisieren

$$D\,M_{sym}\,D^{-1} = M_{diag} \quad \text{mit } D D^T = 1$$

$$D^{-1} = D^T$$