2.5 Reine und gemischte Zustände

Sei $\hat{A}$ ein Operator, der für den Zustand $|\psi\rangle$ den Erwartungswert a hat:

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = a$$

Im Allgemeinen ist a der Mittelwert vieler Messergebnisse, die jedoch im einzelnen von a abweichen können.

Frage: Wie muss $|\psi\rangle$ beschaffen sein, damit die Messung <u>mit Sicherheit</u> das Ergebnis a liefert?

(Wir wissen bereits, dass solche Zustände existieren: stationäre Zustände haben eine schwankungsfreie Energie, s. S. 30.)

$$\rightarrow (\Delta a)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | (\hat{A} - a)^2 \psi \rangle$$

$$\overset{\hat{A}\text{ herm.}}{=} \langle (\hat{A} - a)\psi | (\hat{A} - a)\psi \rangle \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow (\hat{A} - a)|\psi\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle}$$

$\Rightarrow$ $|\psi\rangle$ ist ein <u>Eigenzustand</u> ($\hat{=}$ Eigenvektor) des Operators $\hat{A}$ mit <u>Eigenwert a</u>!

Eigenschaften:

- Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell:

$$a\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{A}\ \text{hermitesch}}}{=} \langle\hat{A}\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle^* = a^*\langle\psi|\psi\rangle$$

- Eigenzustände mit verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal:

Seien $\hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle, \quad \hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$

$$\Rightarrow \quad a_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{A}\psi_n\rangle$$

$$= \langle\hat{A}\psi_m|\psi_n\rangle = a_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0 \quad , \text{ falls } a_m \neq a_n$$

- Besitzt $\hat{A}$ mehrere linear unabhängige Eigenzustände zum gleichen Eigenwert („entartete Zustände"),

$$\hat{A}|\psi_{n,i}\rangle = a_n|\psi_{n,i}\rangle, \qquad i = 1, \dots, N_n$$

dann gilt auch

$$\hat{A}\Big(\sum_{i=1}^{N_n} c_i|\psi_{n,i}\rangle\Big) = a_n\Big(\sum_{i=1}^{N_n} c_i|\psi_{n,i}\rangle\Big)$$

$\Rightarrow$ Man kann orthogonale Basis-Zustände finden, die den gesamten Unterraum der Eigenzustände mit Eigenwert a_n aufspannen.

- Die Gesamtheit aller orthonormierten Eigenzustände von $\hat{A}$ bildet eine vollständige Basis des Hilbert-Raums.

- Eigenzustände werden auch als <u>reine Zustände</u> bezeichnet.

- Die Menge aller Eigenwerte $\hat{A}$ („Spektrum") entspricht den möglichen Messwerten der Observablen.

- Seien $\{|\varphi_n\rangle\}$ die orthonormierten Eigenzustände von $\hat{A}$ mit
$$\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$$

2) allgemeiner Zustand:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \qquad \text{(„gemischter Zustand")}$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle$$
$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n \, a_n \underbrace{\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle}_{\delta_{mn}}$$
$$= \sum_n |c_n|^2 a_n$$

statist. Gewicht von $|\varphi_n\rangle$
≙ Wahrsch., a_n zu messen.

$$\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_m c_m \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = c_n$$

2) statist. Gewicht $|c_n|^2 = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2$

- Unmittelbar nach einer <u>Messung</u> ist die gemessene Observable mit Sicherheit bekannt.

⇒ Die Messung „zwingt" das System in einen Eigenzustand des Messoperators.

2.7 Vertauschende und nichtvertauschende Operatoren

Bei der Anwendung mehrerer Operatoren auf einen Zustand kommt es i.A. auf die Reihenfolge an, d.h.

$$\hat{A}\,\hat{B}\,|\psi\rangle \overset{\text{i.A.}}{\neq} \hat{B}\,\hat{A}\,|\psi\rangle$$

Dies ist offensichtlich, wenn man sich die Operatoren als Matrizen im Hilbert-Raum vorstellt.

2, Def.: $$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$ „Kommutator"

d.h. Operatoren sind vertauschbar, wenn $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ und nicht vertauschbar, wenn $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$.

Beispiel: Orts- und Impulsoperator in einer Dimension (in Ortsraumdarstellung)

$$\hat{x} = x \quad , \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\Rightarrow [\hat{x},\hat{p}]\,\psi(x,t) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\,\psi(x,t)$$

$$= \left(x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi(x,t)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \left(\frac{\partial x}{\partial x}\psi - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right)$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\,\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar} \neq 0 \;!$$

Betrachte nun zwei Observable A und B mit den zugehörigen Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$.
Bei einer gemeinsamen Messung von A und B gilt dann für die Unschärfe der beiden Messwerte

$$\boxed{(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right)^2}$$

(„verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation")

(Beachte: $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesch $\Rightarrow$ $i[\hat{A}, \hat{B}]$ hermitesch
(→ Übung)
$\Rightarrow \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle$ ist reell.)

Beweis:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \equiv \langle \alpha | \alpha \rangle$$

mit $|\alpha\rangle := (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle$

$(\Delta B)^2 = \langle \beta | \beta \rangle$ mit $|\beta\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$

„Schwarz'sche Ungleichung"
(→ Lineare Algebra,
klar für gewöhnliche Vektoren
$(\vec{a} \cdot \vec{b})^2 = \vec{a}^2 \vec{b}^2 \cos^2\theta \leq \vec{a}^2 \vec{b}^2$)

$$|z|^2 = (\mathrm{Re}\, z)^2 + (\mathrm{Im}\, z)^2 \geq (\mathrm{Im}\, z)^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left[\frac{1}{2i} \left(\langle \alpha | \beta \rangle - \langle \beta | \alpha \rangle \right)\right]^2$$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle \\
&\quad + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \psi | \psi \rangle \\
&= \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \hat{B} \hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2 \qquad \text{q.e.d.}$$

<u>Bemerkungen:</u>

- Wir haben gesehen: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

  3-dim.: $[\hat{x}_m, \hat{p}_n] = i\hbar \delta_{mn}$ (→ Übung)

  $$\Rightarrow \boxed{(\Delta x_m)(\Delta p_n) \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{mn}}$$

  (ursprüngliche Heisenberg'sche Unschärferelation)

- Zwei Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ besitzen genau dann eine <u>gemeinsame</u> Basis orthogonaler Eigenzustände $\{ |\varphi_n\rangle \}$ (d.h. können gleichzeitig scharf gemessen werden), wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

  (→ Übung)