Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation -Herleitungen-

Im folgendem zu finden sind die mathematischen Herleitungen, welche im Laufe der Vorlesung vorkommen.

Schrödingergleichung

Wir haben: $\lambda = \frac{h}{p}$, $f = \frac{W}{h}$, $\omega = 2\pi f$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

Die Gesamtenergie eines Teilchens setzt sich aus kinetischer- und potenzieller Energiekomponente zusammen:

$$W_{ges} = W_{kin} + W_{pot}$$

Die kinetische Energie ist bestimmt durch: $\frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$. Und die potenzielle Energie wird durch eine Funktion nach Ort und Zeit beschrieben, wodurch wir folgendes erhalten:

(I) $$W_{ges} = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

Die potenzielle Energie des Teilchens beinhaltet außerdem Informationen über die Kräfte, welche auf das Teilchen wirken.

$$F(x,t) = -\frac{\delta V(x,t)}{\delta x}$$

Durch:

$W_{ges} = hf$ (Einstein Postulat)

und $p = \frac{h}{\lambda}$ (De Broglie Postulat)

Erhalten wir nach einsetzen in (I) folgendes:

$$hf = \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V(x,t)$$

Danach erhalten wir durch $f = \frac{\omega}{2\pi}$, $\lambda^2 = \frac{4\pi^2}{k^2}$ (Siehe oben)

$$\frac{h\omega}{2\pi} = \frac{h^2k^2}{2m4\pi^2} + V(x,t)$$

Durch die reduzierte Planck Konstante können wir die übrigen 2π absorbieren.

Da $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ erhält man:

(II) $$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V(x,t)$$

Nehmen wir an die Wellenfunkton mit Kreisfrequenz ω und Wellenzahl k heißt:

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t)$$

Sie beschreibt eine - sich mit der Zeit nach rechts bewegende - Welle.

Es fällt auf, dass:

$$\frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta t} = \omega \sin(kx - \omega t) \text{ und}$$

$$\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} = \frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x}\left(\frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x}\right) = \frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x}\big(-ksin(kx - \omega t)\big) = -k^2\cos(kx - \omega t)$$

Durch die Faktoren ω & $-k^2$ sehen wir eine Verbindung zur vorherigen Energiegleichung (II). Wir erhalten:

$$\text{(III)} \qquad \beta\frac{\delta\Psi(x,t)}{\delta t} = \alpha\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} + V(x,t)\Psi(x,t)$$

Die Faktoren α und β sorgen für die nötige Flexibilität.

Um zu vereinfachen, sagen wir: $V(x,t) = V_0$ und wir nehmen an: $\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t)$.

So erhalten wir durch Einsetzen in die allgemeine Form (III):

$$\beta\omega\sin(kx - \omega t) = -\alpha k^2\cos(kx - \omega t) + V_0\cos(kx - \omega t)$$

Das ist äquivalent zu:

$$\beta\omega\sin(kx - \omega t) + \alpha k^2\cos(kx - \omega t) - V_0\cos(kx - \omega t) = 0$$

$$\rightarrow \ \beta\omega\sin(kx - \omega t) + (\alpha k^2 - V_0)\cos(kx - \omega t) = 0$$

Damit die Gleichung wahr ist, muss: $\beta = 0$ & $\alpha = \frac{V_0}{k^2}$

So erhalten wir:

$$0\frac{\delta\Psi(x,t)}{\delta t} = \frac{V_0}{k^2}\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} \rightarrow \frac{V_0\lambda^2}{4\pi^2}\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} = 0$$

Das ist nicht äquivalent zu:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V(x,t) \ ↯$$

Das ist ein Widerspruch, wodurch die Annahme falsch ist.

Die Energiegleichung geht nicht aus der Differenzialgleichung hervor.

Wir müssen für eine Ausgleichung von Sinus und Kosinus Termen sorgen.

Nehmen wir also an: $\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma\sin(kx - \omega t)$

Differenzieren wir das, so erhalten wir die gewünschten Faktoren.

$$\frac{\delta\Psi(x,t)}{\delta t} = \omega\sin(kx - \omega t) - \gamma\omega\cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} = -k^2\cos(kx - \omega t) - \gamma k^2\sin(kx - \omega t)$$

Setzten wir das in die Differenzialgleichung (III) ein, so erhalten wir:

$$\beta\omega sin - \beta\gamma\omega\cos(kx - \omega t) =$$

$$-\alpha k^2\cos(kx - \omega t) - \alpha\gamma k^2\sin(kx - \omega t) + V_0\cos(kx - \omega t) + V_0\gamma\sin(kx - \omega t)$$

$$\rightarrow \frac{\beta\omega}{\gamma}[-\gamma^2\cos(kx - \omega t) + \gamma\sin(kx - \omega t)] = -\alpha k^2[\cos(kx - \omega t) - \gamma\sin(kx - \omega t)] +$$

$$V_0[\cos(kx - \omega t) + \gamma\sin(kx - \omega t)]$$

Alle blauen Terme sind einfach die angenommene Wellenfunktion.

Wir könnten drastisch vereinfachen, wenn:

$$-\gamma^2\cos(kx - \omega t) + \gamma\sin(kx - \omega t) = 1\cos(kx - \omega t) - \gamma\sin(kx - \omega t) = \Psi(x,t)$$

Dafür muss $-\gamma^2 = 1 \;\rightarrow\; \gamma = i, (i = \sqrt{-1})$

Für $\gamma = i$ erhalten wir:

$$\frac{\beta\omega}{\gamma}[\Psi(x,t)] = -\alpha k^2[\Psi(x,t)] + V_0[\Psi(x,t)]$$

$$\rightarrow \frac{\beta\omega}{i} = -\alpha k^2 + V_0$$

Vergleichen wir das mit der Energiegleichung (II), fällt eine Ähnlichkeit auf.

Damit beide äquivalent sind, muss folgendes gelten:

$\frac{\beta\omega}{i} = \hbar\omega \rightarrow \beta = i\hbar$ und $-\alpha k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}$

Durch Einsetzen in die Differenzialgleichung (III), erhalten wir die bekannte Schrödingergleichung (mit dem Hamiltonoperator):

$$\boxed{i\hbar\frac{\delta\Psi(x,t)}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\Psi(x,t)}{\delta x^2} + V(x,t)\Psi(x,t)}$$

Komplexe Zahlen

Das Betragsquadrat einer komplexen Zahl „z“ lautet:

$$z^*z = (a - bi)(a + bi) = a^2 + abi - bia - (bi)^2 = a^2 + b^2 = |z|^2$$

Orts- und Impulsoperator

Der Erwartungswert der Ortskoordinate „x“ ist so definiert:

$$\langle\hat{x}\rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$

Wir können $\langle p_x\rangle_\Psi$ herausfinden, da

$$m\langle v_x\rangle_\Psi = m\frac{d\langle x\rangle_\Psi}{dt}$$

Herleitung:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle_\Psi}{dt} = \frac{\delta}{\delta t}\int_{-\infty}^{\infty} x(\Psi^*\Psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\delta}{\delta t}(\Psi^*\Psi)dx$$

Was ist $\frac{\delta\Psi^*\Psi}{\delta t}$?

Durch die Produktregel erhält man folgendes:

$$\frac{\delta(\Psi^*\Psi)}{\delta t} = \Psi^*\frac{\delta\Psi}{\delta t} + \Psi\frac{\delta\Psi^*}{\delta t}$$

Die Schrödingergleichung sagt:

$$i\hbar\frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} + V(x,t)\Psi(x,t)$$

Das heißt, dass $\frac{\delta\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} + V(x,t)\Psi(x,t))/i\hbar$

Dadurch:

$$\frac{\delta\Psi}{\delta t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi\ und\ \frac{\delta\Psi^*}{\delta t} = \frac{-i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} - \frac{-i}{\hbar}V\Psi$$

Setzen wir das ein, erhalten wir:

$$\frac{\delta(\Psi^*\Psi)}{\delta t} = \Psi^*\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} - \cancel{\frac{i}{\hbar}V\Psi}\right] + \Psi\left[\frac{-i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*(\mathrm{x,t})}{\delta x^2} + \cancel{\frac{i}{\hbar}V\Psi}\right]$$

Wir erhalten:

$$\frac{\delta(\Psi^*\Psi)}{\delta t} = \Psi^*\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x,t})}{\delta x^2}\right] + \Psi\left[\frac{-i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*(\mathrm{x,t})}{\delta x^2}\right]$$

Nun wird bewiesen, dass $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta\Psi^*\Psi}{\delta t}dx = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta\Psi^*\Psi}{\delta t}dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\delta x^2}\right]dx - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\delta x^2}\right]dx$$

Durch partielle Integration erhalten wir:

$$\left[\Psi^*\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi}{\delta x}\right)\right]_{-\infty}^{\infty} - \cancel{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi}{\delta x}\right)}dx - \left[\Psi\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\right)\right]_{-\infty}^{\infty} - \cancel{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta\Psi}{\delta x}\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\right)}dx$$

Dann haben wir nur noch:

$$\left[\Psi^*\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi}{\delta x}\right)\right]_{-\infty}^{\infty} - \left[\Psi\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\right)\right]_{-\infty}^{\infty}$$

Wir erinnern uns an die Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx = 1$

Das impliziert, dass $\lim_{x\to\pm\infty}\Psi(x,t) = 0\ und\ \lim_{x\to\pm\infty}\Psi^*(x,t) = 0$

Dadurch erhalten wir:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta\Psi^*\Psi}{\delta t}dx = 0$$

Wir haben erfahren, dass:

$$\frac{\delta(\Psi^*\Psi)}{\delta t} = \Psi^*\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2}\right] - \Psi\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2}\right]$$

Vorher sagten wir:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle_\Psi}{dt} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x\frac{\delta}{\delta t}(\Psi^*\Psi)dx$$

Setzen wir beides zusammen, erhalten wir:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle_\Psi}{dt} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x\left[\Psi^*\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2}\right] - \Psi\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2}\right]\right]dx$$

Da $\frac{i\hbar}{2m}$ konstant ist, können wir es aus dem Integral ziehen:

$$\frac{i\hbar}{2m}\int\limits_{-\infty}^{\infty} x\left[\Psi^*\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2} - \Psi\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2}\right]dx$$

Was ist nun

$$\Psi^*\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2} - \Psi\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2}?$$

Addieren wir 0 und bauen um, so erhalten wir:

$$\Psi^*\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2} - \Psi\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2} = \Psi^*\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2} - \Psi\frac{\delta^2\Psi^*}{\delta x^2} + \frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\frac{\delta\Psi}{\delta x} - \frac{\delta\Psi^*}{\delta x}\frac{\delta\Psi}{\delta x} =$$

$$\Psi^* \frac{\delta^2 \Psi}{\delta x^2} + \frac{\delta \Psi^*}{\delta x} \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta^2 \Psi^*}{\delta x^2} - \frac{\delta \Psi^*}{\delta x} \frac{\delta \Psi}{\delta x}$$

Wir sehen durch die Produktregel, dass es Äquivalent ist zu:

$$\frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x}\right) - \frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right)$$

Wir können den Differenzialoperator herausziehen:

$$\frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right)$$

Das setzen wir wieder ein:

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle_\Psi}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right) dx$$

Durch partielle Integration, wo $u = x \; und \; v' = \frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right)$, erhalten wir:

$$\frac{i\hbar}{2m}\left[x \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right) dx - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int \frac{\delta}{\delta x}\left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right) dx\right] \frac{\delta x}{\delta x} dx\right]$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\left[\cancel{x\left[\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right]_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}\right) dx\right]$$

Wie vorher gezeigt ist das gleich null. Wir erhalten also:

$$-\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} - \underline{\Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x}}\right) dx$$

Was ist das?

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{\delta \Psi^*}{\delta x} dx = \Psi[\Psi^*]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx = 0 - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx$$

Wir erhalten:

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx - \left(0 - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx\right)\right] = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty} 2\Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx\right] = -\frac{i\hbar}{m}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx\right]$$

Wir erhalten:

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle_\Psi}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx\right]$$

Da $\langle \widehat{p_x} \rangle_\Psi = m \langle \widehat{v_x} \rangle_\Psi = m \frac{d\langle \hat{x} \rangle_\Psi}{dt}$ gilt anschließend:

$$\langle \widehat{p_x} \rangle_\Psi = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\delta \Psi}{\delta x} dx$$

Da $\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dx$:

$$\boxed{\widehat{p_x} = -i\hbar \frac{\delta}{\delta x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta x}}$$

Allg. Cauchy-Schwarzsche Ungleichung

Die Ungleichung besagt, dass:

$$\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2 \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \langle \vec{y} | \vec{y} \rangle$$

Haben wir:

$$0 \leq \langle \vec{x} - \rho \vec{y} | \vec{x} - \rho \vec{x} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle + \rho^2 \langle \vec{y} | \vec{y} \rangle - 2\rho \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$$

Und wählen ρ, sodass:

$$\rho = \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle}$$

, erhalten wir:

$$0 \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle + \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle^2} \langle \vec{y} | \vec{y} \rangle - 2 \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle} \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$$

Das ist gleich:

$$0 \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle + \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle} - 2 \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle}$$

$$\Leftrightarrow 0 \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle - \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2}{\langle \vec{y} | \vec{y} \rangle} \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \rightarrow \underline{\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle^2 \leq \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \langle \vec{y} | \vec{y} \rangle} \quad ▨$$

Allg. Unbestimmtheit

In dieser und der weiterführenden Herleitung wir die spezielle Notation des Erwartungswertes $\langle \hat{A} \rangle_\Psi$ zu $\langle \hat{A} \rangle$ vereinfacht, da hier alle Operatoren auf das System Ψ wirken.

Sagen wir die Abweichung des Operators $\hat{A}$ vom Mittelwert sei wie folgt definiert:

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$$

Ebenso gilt das für $\hat{B}$:

$$\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$$

Wir wissen, dass der Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ von $\hat{A}$ so definiert ist:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\ und\ \langle\hat{B}\rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

Wir fragen uns was der Erwartungswert der Quadratischen $\hat{A}$-Abweichung ist:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \frac{\langle\Psi|\Delta\hat{A}^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

Da

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle \rightarrow \Delta\hat{A}^2 = \left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right) =$$

$$\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2$$

Setzen wir ein, erhalten wir:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \langle\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2\rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

$$= \frac{\langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} - \frac{\langle\Psi|2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} + \frac{\langle\Psi|\langle\hat{A}\rangle^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

$$= \langle\hat{A}^2\rangle - \langle 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle\rangle + \langle\langle\hat{A}\rangle^2\rangle$$

Da $\langle\hat{A}\rangle$ konstant ist, gilt: $\langle\langle\hat{A}\rangle\rangle = \langle\hat{A}\rangle$. Das heißt:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - 2\langle\hat{A}\rangle^2 + \langle\hat{A}\rangle^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

Also ist:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

Durch eine ähnliche Logik ist auch:

$$\langle\Delta\hat{B}^2\rangle = \langle\hat{B}^2\rangle - \langle\hat{B}\rangle^2$$

Aber was ist das?

<u>Varianz:</u>

Wir sagen:

$\Delta\hat{A}$ ist die Standardabweichung $(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)$ und

$\langle\hat{A}\rangle$ ist der Erwartungswert des Operators

Durch die Stochastik wissen wir, dass der Erwartungswert einer Menge wie folgt definiert ist:

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i p_i \hat{A}_i$$

Auch wissen wir wie die Varianz definiert ist. Und die Varianz ist das Quadrat der Std. Abweichung:

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_i p_i \left(\hat{A}_i - \langle\hat{A}\rangle\right)^2$$

$$\left(\hat{A}_i - \langle\hat{A}\rangle\right)^2 = \hat{A}_i^{\ 2} - 2\hat{A}_i\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2$$

Dadurch können wir umformen:

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_i p_i\, \hat{A}_i^{\ 2} - 2\sum_i \underline{p_i \hat{A}_i \langle\hat{A}\rangle} + \sum_i p_i\, \langle\hat{A}\rangle^2$$

Das unterstrichene ist wieder $\langle\hat{A}\rangle$, wodurch:

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_i p_i\, \hat{A}_i^{\ 2} - 2\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{A}\rangle + \sum_i p_i\, \langle\hat{A}\rangle^2$$

Außerdem ist die Summe aller Wahrscheinlichkeiten eins, wodurch:

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_i \underline{p_i\, \hat{A}_i^{\ 2}} - 2\langle\hat{A}\rangle^2 + \langle\hat{A}\rangle^2$$

Das unterstrichene ist einfach $\langle\hat{A}^2\rangle$, wodurch:

$$\Delta\hat{A}^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - 2\langle\hat{A}\rangle^2 + \langle\hat{A}\rangle^2 = \boxed{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$$

Also ist $\langle\Delta\hat{A}^2\rangle$ die Varianz. Wir können sagen:

(I) $\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \sigma_A^{\ 2}$ und durch ähnliche Logik

(II) $\langle\Delta\hat{B}^2\rangle = \sigma_B^{\ 2}$

Jetzt fragen wir uns was Kommutator und Antikommutator aussagen:

$$\frac{1}{2}\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)\left(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\right) - \left(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\right)\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)\Big)$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle\right) - \left(\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle\right)\Big)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) = \frac{1}{2}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$$

$\frac{1}{2}\left\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right\}$ bleibt jedoch gleich.

Uns fällt auf, dass:

$$\frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$$
$$= \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2} - \cancel{\frac{\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2}} + \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2} + \cancel{\frac{\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2}} = \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2} + \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2}$$
$$= \Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$$

Also:

(III) $\quad \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$

Sagen wir:

$$|f\rangle \equiv \Delta\hat{A}|\Psi\rangle \; und \; |g\rangle \equiv \Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

Wir merken uns die Schwarz Ungleichung:

(IV) $\quad \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$

Was ist $\langle f|f\rangle$?

$$\langle f| = [|f\rangle]^\dagger$$

Also ist $\langle f|f\rangle = [|f\rangle]^\dagger|f\rangle$

$$= [\Delta\hat{A}|\Psi\rangle]^\dagger\Delta\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Delta\hat{A}^\dagger\Delta\hat{A}|\Psi\rangle$$

Da $\hat{A}$ hermitesch ist, gilt durch die Definition der Hermitizität: $\Delta\hat{A} = \Delta\hat{A}^\dagger$, wodurch:

$$\langle\Psi|\Delta\hat{A}^\dagger\Delta\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Delta\hat{A}^2|\Psi\rangle$$

Durch (I) sehen wir, dass $\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \sigma_A{}^2$.

Wir wissen also, dass:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \sigma_A{}^2 = \frac{\langle\Psi|\Delta\hat{A}^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \to \langle\Psi|\Delta\hat{A}^2|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\sigma_A{}^2 = \langle f|f\rangle$$

(V) $\quad \langle f|f\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\sigma_A{}^2$

Durch eine ähnliche Logik sehen wir auch, dass:

(VI) $\quad \langle g|g\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\sigma_B{}^2$

Jetzt fragen wir uns was $\langle f|g\rangle$ ist.

Wir wissen von vorher, dass:

$$\langle f| = [|f\rangle]^\dagger = [\Delta\hat{A}|\Psi\rangle]^\dagger = \langle\Psi|\Delta\hat{A}^\dagger = \langle\Psi|\Delta\hat{A} \text{ (Hermitizität)}$$

Und:

$$|g\rangle = \Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

Dadurch ist:

$$\langle f|g\rangle = \langle\Psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

Wir wissen also, dass:

$$\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle = \frac{\langle\Psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \to \langle\Psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle = \langle f|g\rangle$$

(VII) $\langle \mathrm{f}|\mathrm{g}\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Delta\hat{\mathrm{A}}\Delta\hat{\mathrm{B}}\rangle$

Setzen wir nun (V), (VI) und (VII) in die Schwarz Ungleichung (IV) ein, erhalten wir:

$$\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle{\sigma_\mathrm{A}}^2\langle\Psi|\Psi\rangle{\sigma_\mathrm{B}}^2 \geq \left|\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Delta\hat{\mathrm{A}}\Delta\hat{\mathrm{B}}\rangle\right|^2$$

$$\cancel{\langle\Psi|\Psi\rangle}{\sigma_\mathrm{A}}^2\cancel{\langle\Psi|\Psi\rangle}{\sigma_\mathrm{B}}^2 \geq \left|\cancel{\langle\Psi|\Psi\rangle}\langle\Delta\hat{\mathrm{A}}\Delta\hat{\mathrm{B}}\rangle\right|\left|\cancel{\langle\Psi|\Psi\rangle}\langle\Delta\hat{\mathrm{A}}\Delta\hat{\mathrm{B}}\rangle\right|$$

$${\sigma_A}^2{\sigma_B}^2 \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2$$

Wir wissen durch die Schwarz Ungleichung, dass:

$$\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

Es ist einfach zu sehen, dass:

$$|z|^2 \geq Im(z)^2$$

Wie berechnen $Im(z)$?

Sei $z = a + bi$, dann ist $Im(z) = b$

Schauen wir uns folgendes an:

$$z - z^* = (a + bi) - (a - bi) = a + bi - (-bi + a) = a + bi + bi - a$$
$$= 2bi$$

Daraus folgt:

$$Im(z) = \frac{z - z^*}{2i}$$

Wir haben also:

$$|z|^2 \geq \left|\frac{z - z^*}{2i}\right|^2$$

Sagen wir, dass:

$$z \equiv \langle f|g\rangle$$

Wir sehen, dass:

$$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left|\frac{\langle f|g\rangle - \langle f|g\rangle^*}{2i}\right|^2$$

Wir wissen, dass $\langle f|g\rangle^* = \langle g|f\rangle$, wodurch:

$$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left|\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right|^2$$

Wir wissen auch, dass:

$$\langle f|g\rangle = \langle \Psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

Doch was ist $\langle g|f\rangle$?

$\langle g| = [|g\rangle]^\dagger = \left[|\Delta\hat{B}\Psi\rangle\right]^\dagger = \langle\Psi|\Delta\hat{B}$ und:

$|f\rangle = |\Delta\hat{A}\Psi\rangle$, wodurch:

$$\langle g|f\rangle = \langle\Psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\Psi\rangle$$

Das merken wir uns.

Wir betrachten nun $\langle f|g\rangle$:

$$\langle f|g\rangle = \langle \Psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\Psi\rangle = \langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle$$

$$= \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)\rangle$$

$$= \langle\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle\rangle$$

$$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\langle\hat{B}\rangle\rangle - \langle\langle\hat{A}\rangle\hat{B}\rangle + \langle\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle\rangle$$

$$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle$$

Wir haben also:

$$\langle f|g\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle$$

Durch ähnliche Logik erhalten wir auch:

$$\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle$$

Das können wir in die Ungleichung einsetzen.

Wir sagten:

$$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left|\frac{1}{2i}\underline{(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)}\right|^2$$

Berechnen wir nun das unterstrichene:

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \left(\langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle\right) - \left(\langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle\right)$$

$$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle - \left(-\langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{B}\hat{A}\rangle\right)$$

$$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle = \langle\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\rangle$$

$$= \langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

Also ist:

$$\sigma_A{}^2\sigma_B{}^2 \geq |\langle f|g\rangle|^2 \geq \left|\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2$$

Und durch die Transitivität ($x \geq y \geq z \to x \geq z$) gilt auch:

$$\sigma_A{}^2\sigma_B{}^2 \geq \left|\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2 = \left|-\frac{1}{4}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2\right| = \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2$$

Und somit:

$$\boxed{\therefore\ \sigma_A\sigma_B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|}$$

Das ist die allgemeine Unbestimmtheitsrelation.

Beide Operatoren stellen physikalische – beobachtbare – Größen dar.

<u>Ort-Impuls Unbestimmtheit</u>

Bei der Ort-Impuls Unbestimmtheit wird der Orts-, sowie der Impulsoperator $\hat{x}$ und $\widehat{p_x}$ betrachtet.

Um die Unbestimmtheit beider Operatoren zu erfahren, müssen wir nur noch beide Operatoren in die allgemeine Unbestimmtheit einsetzen. Wir erhalten folgendes:

$$\sigma_x\sigma_{p_x} \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{x},\widehat{p_x}]\rangle|$$

Nun müssen wir den Kommutator beider Operatoren bestimmen:

Um vereinfachende Regeln (Produktregel) anwenden zu können, lassen wir den Kommutator auf eine Dummy-Funktion "f" wirken:

$$[\hat{x},\widehat{p_x}]f = (\hat{x}\widehat{p_x} - \widehat{p_x}\hat{x})f$$
$$= \hat{x}\widehat{p_x}f - \widehat{p_x}\hat{x}f$$

Hierbei ist zu beachten, dass jeweils der anliegende Operator auf die Dummy-Funktion "f" wirkt, wodurch:

$$\hat{x}(\widehat{p_x}f) - \widehat{p_x}(\hat{x}f)$$

Nun setzen wir die vorher hergeleiteten Operatoren ein, wobei:

$$\hat{x} = x \text{ und } \widehat{p_x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta x}$$

Wir erhalten:

$$x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta x}f\right) - \frac{\hbar}{i}\underline{\frac{\delta}{\delta x}(xf)}$$

Hierauf können wir die Produktregel anwenden:

$$x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\delta f}{\delta x}\right) - \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\delta f}{\delta x} + f\frac{\delta x}{\delta x}\right)$$

Weiterhin können wir vereinfachen:

$$\cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\delta f}{\delta x}} - \cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\delta f}{\delta x}} - \frac{\hbar}{i}f$$

Dadurch haben wir:

$$[\hat{x}, \widehat{p_x}]f = -\frac{\hbar}{i}f = i\hbar f$$

Nun können wir die Dummy-Funktion entfernen - indem wir durch diese Teilen - und erhalten anschließend:

$$[\hat{x}, \widehat{p_x}] = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar$$

Wir haben die Unbestimmtheit:

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{x}, \widehat{p_x}]\rangle| = \frac{1}{2}|\langle i\hbar\rangle|$$

Da $i\hbar$ eine Konstante ist, ist sie gleich ihrem Erwartungswert, wodurch:

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{1}{2}|i\hbar|$$

Der Betrag der komplexen Zahl i ist einfach eins, wodurch:

$$\boxed{\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Wir haben beweisen, dass die multiplizierte Unbestimmtheit on Orts- und Impulsoperator

Größer oder gleich der halben reduzierten Planck Konstante sind.