

## 3.5 Der Quantenmechanische Messprozess

Ziel dieses Abschnittes ist es, die Messung physikalischer Größen an einem Quantensystem im Zustand  $|\psi\rangle$  genauer zu untersuchen. Dabei spielt der stochastische Charakter der Messung eine wichtige Rolle. Wie wir gerade gesehen haben, sind die möglichen Messwerte zunächst verknüpft mit dem Finden der vollständigen Observablen,  $A$ , und des zugehörigen Operators,  $\hat{A}$ . Dann müssen wir das Spektrum von  $\hat{A}$  bestimmen. Das heißt, wir suchen alle Eigenwerte  $a_i$  und alle Eigenvektoren  $|a_i\rangle$ . Anschließend müssen wir die Messung von  $A$  vornehmen. Die Einzelmessung liefert hierbei ein zufälliges Resultat, bei dem einer der Eigenwerte  $a_1, a_2, \dots, a_k$  realisiert wird, d.h., das System befindet sich nach der Messung im Zustand  $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_k\rangle$ . Ein wiederholbares Messergebnis ist daher nur der Erwartungswert. Diesen können wir durch  $N$ -fache Wiederholung und anschließende Mittelung mit  $N \rightarrow \infty$  erhalten, genauso wie wir es bereits für den Doppelspalt diskutiert hatten. Durch Verwendung der eben gefundenen Eigenschaften einer Basis, Glg. (3.17) und (3.18) erhalten wir dann gleichzeitig wichtige Informationen über quantenmechanische Operatoren.

Die Berechnung des Erwartungswertes des Operators  $\hat{A}$  einer vollständigen Observable, die  $k$  Eigenzustände besitzt, in einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\psi &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N a_j \\ &= \sum_{i=1}^k P_{|\psi\rangle \rightarrow |a_i\rangle} \cdot a_i = \sum_{i=1}^k |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \cdot a_i \\ &= \sum_{i=1}^k \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle \cdot a_i \\ &= \langle \psi | \sum_{i=1}^k a_i \cdot |a_i\rangle \langle a_i | \psi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\sum_{i=1}^k a_i \hat{P}_i}_{=\hat{A}} | \psi \rangle .\end{aligned}$$

Aus der letzten Gleichung können wir zwei wichtige Eigenschaften eines quantenmechanischen Operators ablesen: zum einen bestätigen wir die bereits verwendete Formel für den Erwartungswert. Zum anderen finden wir eine neue Darstellung des Operators—seine *Spektraldarstellung*:

Der Erwartungswert im Zustand  $|\psi\rangle$  und die Spektraldarstellung des Operators  $\hat{A}$  sind gegeben durch:

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (3.19)$$

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i| = \sum_i a_i \hat{P}_i \quad (3.20)$$

**Beispiel:** Wir besprechen dies für das Beispiel des harmonischen Oszillators. Das Experiment möge Elektronen einer bestimmten Ortsverteilung erzeugen, die durch folgenden Superpositions-Zustand  $|\psi\rangle$  genähert werden kann, der in der Ortsdarstellung in die Wellenfunktion übergeht:

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi(x) = \frac{i}{2}\psi_0(x) + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_2(x) ,$$

mit den Energien  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Gesucht sei der Mittelwert der Energie, d.h. der Erwartungswert des Hamilton-Operators.

1. Dieser Zustand erfüllt die Normierung:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx + \frac{3}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^2(x) dx,$$

da hier wieder gilt (Orthonormalität):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m(x) \psi_n(x) = \delta_{mn}$$

2. Wir entwickeln nun den Zustand  $|\psi\rangle$  nach den Basisvektoren  $\psi_n(x)$ .

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\langle \psi_n | \psi \rangle}_{=c_n} \psi_n(x)$$

Die Koeffizienten ergeben sich also zu:

$$c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx$$

Als Resultat erhalten wir  $c_0 = \frac{i}{2}$ ,  $c_1 = 0$ ,  $c_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}$  und  $c_m = 0$  für alle  $m \geq 3$ .

3. Wir berechnen nun den Erwartungswert des Hamilton-Operators:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\psi} &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \sum_i a_i | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle \\ &= \sum_i a_i \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle \\ &= \sum_i a_i | \langle \psi | a_i \rangle |^2 \\ &= \sum_n | \langle \psi_n | \psi \rangle |^2 E_n \\ &= \frac{1}{4} E_0 + \frac{3}{4} E_2 = 2\hbar\omega \end{aligned}$$

Die verwendete Darstellung des Zustandes  $|\psi\rangle$  mit Hilfe von  $\psi(x)$  ist der Spezialfall der *Ortsdarstellung*. Die Superposition von  $\psi(x)$  ist beliebig erweiterbar. Außerdem ist die hier betrachtete Basis aus Oszillator-Eigenfunktionen diskret.

**Fall einer kontinuierlichen Basis.** Wir erweitern unsere Betrachtungen jetzt von einer diskreten auf eine kontinuierliche Basis. Ein Beispiel wären die Eigenfunktionen für den Potentialtopf endlicher Tiefe bei positiven Energien,  $E > V_{\max}$ . Hier sind theoretisch alle Werte für die Energie erlaubt. Galt  $V_{\min} < E < V_{\max}$  so waren die möglichen Energiewerte diskret. Die Idee ist nun, den kontinuierlichen Fall auf den bereits bekannten diskreten zurückzuführen. Nehmen wir also eine Observable  $\hat{B}$ , deren mögliche Eigenwerte  $b$  aus einem Intervall  $[A, B]$  kommen können. Nehmen wir nun zunächst wieder diskrete Eigenwerte  $b_i$  aus diesem Intervall, die jeweils einen Abstand  $\Delta b$  zueinander haben.

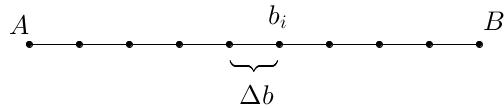


Abbildung 3.2: Annäherung eines kontinuierlichen Eigenwertintervalls durch eine diskrete Einteilung

Bezeichnen wir also den  $i$ -ten Zustand bei der Breite  $\Delta b$  durch  $|b_i \Delta b\rangle$  so fordern wir, dass diese Zustände ein VONS bilden. Also:

$$|b_i \Delta b\rangle \rightarrow \sum_i |b_i \Delta b\rangle \langle b_i \Delta b| = 1$$

$$\langle b_i \Delta b | b_j \Delta b \rangle = \delta_{ij}.$$

Wollen wir nun einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  als Superposition dieser Basiszustände darstellen, so erweitern wir die gewohnte Projektionsdarstellung mit  $\Delta b$  und bilden dann den Grenzwert  $\Delta b \rightarrow 0$ , wodurch gleichzeitig  $b_i$  gegen die kontinuierliche Variable  $b$  geht:

$$|\psi\rangle = \lim_{\Delta b \rightarrow 0} \sum_i \frac{|b_i \Delta b\rangle \langle b_i \Delta b| \psi\rangle}{\Delta b} \Delta b$$

Nun definieren wir:

$$\lim_{\Delta b \rightarrow 0} \frac{|b_i \Delta b\rangle}{\sqrt{\Delta b}} = |b\rangle$$

und ebenso:

$$\lim_{\Delta b \rightarrow 0} \frac{\langle b_i \Delta b | \psi\rangle}{\sqrt{\Delta b}} = \psi(b) = \langle b | \psi\rangle$$

Der Zustand  $|b\rangle$  aus einem kontinuierlichen Spektrum von Zuständen nimmt nun den Platz des diskreten Zustandes  $|b_i\rangle$  aus den diskreten Eigenzuständen an. Diese intuitive Definition ist mathematisch nicht ganz unproblematisch. Für diskrete Zustände können wir Operatoren durch Matrizen ausdrücken. Das Produkt zweier Operatoren ist dann das Matrixprodukt. Gedanklich tauschen wir nun die Summe der Matrixmultiplikation durch ein Integral und haben uns eine kontinuierliche Matrix vorzustellen. Hierbei ist der Begriff "Matrix" im verallgemeinerten Sinne zu verstehen. Ein weiteres Problem ist, dass  $|b\rangle$  kein Vektor mehr aus dem Hilbertraum ist (seine Norm ist unendlich). Rechnerisch machen diese Aspekte aber keine Probleme. Mathematisch korrekt wird dies durch die Theorie der Distributionen beschrieben (s.u.). In der kontinuierlichen Superposition<sup>10</sup> drücken wir nun den Zustand  $|\psi\rangle$  aus durch:

$$|\psi\rangle = \int_A^B |b\rangle \langle b | \psi\rangle db$$

$$= \int \psi(b) |b\rangle db$$

Hierbei nimmt die Vollständigkeitsrelation auch die Form eines Integrals an:

$$\hat{1} = \int_A^B |b\rangle \langle b | db$$

<sup>10</sup>Dies kann man sich vorstellen wie den Übergang von einer Fourier-Reihe zum Fourier-Integral (Fourier-Transformation).

Ebenso müssen natürlich zwei Zustände  $|b\rangle$  und  $|b'\rangle$  eine Orthogonalitätsbedingung erfüllen:

$$\begin{aligned}\langle b|b'\rangle &= \lim_{\Delta b \rightarrow 0} \frac{\langle b_i \Delta b | b'_i \Delta b \rangle}{\Delta b} \\ &= \lim_{\Delta b \rightarrow 0} \frac{\delta_{b_i, b'_i}}{|\Delta b|} = \delta(b - b')\end{aligned}$$

Im kontinuierlichen Fall wird also das Kronecker-Symbol durch eine Delta-Funktion ersetzt. Es gilt außerdem:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \int \langle \psi | b \rangle \langle b | \psi \rangle db \\ &= \int \psi^*(b) \psi(b) db\end{aligned}$$

Hierbei ist  $\psi(b) = \langle b | \psi \rangle$  die Darstellung des Zustandes  $|\psi\rangle$  in der Basis  $\{|b\rangle\}$ . Der Anfangsausdruck war der für die Norm des Zustandes  $|\psi\rangle$ , die wir üblicherweise gleich 1 wählen. Das Endergebnis zeigt dann die uns bereits bekannte Normierungsbedingung der Wellenfunktion  $\psi(x)$  in der Ortsdarstellung, wenn  $b \rightarrow x$  gewählt wird. Allerdings ist der gefundene Ausdruck viel allgemeiner, da hier  $b$  eine beliebige kontinuierliche Variable ist.

### Eigenschaften der Delta-Distribution

Wir erwähnen nun im folgenden einige Eigenschaften der Diracschen Delta-Distribution<sup>11</sup>.

1. Die Delta-Funktion verknüpft zwei Funktionswerte einer Funktion  $\psi$  an den Stellen  $b$  und  $b'$  miteinander:

$$\psi(b') = \langle b' | \psi \rangle = \int \langle b' | b \rangle \langle b | \psi \rangle db = \int \delta(b - b') \psi(b) db.$$

2. Ist nun  $\psi$  die 1-Funktion, so erhalten wir:

$$\int \delta(b - b') db = 1. \quad (3.21)$$

3. Die Delta-Funktion  $\delta(b - b')$  ist der Integral-Einheitsoperator. Dies lässt sich für ein vollständiges Funktionensystem umschreiben:

- (a) Für ein diskretes VONS, mit

$$\hat{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|$$

ergibt sich folgende Darstellung der Delta-Funktion:

$$\delta(b - b') = \langle b | b' \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle b | n \rangle \langle n | b' \rangle. \quad (3.22)$$

- (b) Für ein kontinuierliches VONS

$$\hat{1} = \int |y\rangle \langle y| dy$$

ergibt sich analog:

$$\delta(b - b') = \langle b | b' \rangle = \int \langle b | y \rangle \langle y | b' \rangle dy = \int y(b) y^*(b') dy \quad (3.23)$$

<sup>11</sup>Im Folgenden verwenden wir die übliche Bezeichnung ‘‘Delta-Funktion’’.

4. Durch partielle Integration lässt sich leicht

$$x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x) \quad (3.24)$$

zeigen.

5. Die Fourierdarstellung der Delta-Funktion ist:

$$2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} dy$$

6. Möchte man einen Faktor  $a$  aus dem Argument der Delta-Distribution herausziehen, so geschieht das gemäß:

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x).$$

7. Die dreidimensionale Delta-Funktion (kartesische Koordinaten) ist gegeben durch:

$$\delta(\underline{r} - \underline{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z').$$

8. Die Delta-Funktion ist achsensymmetrisch:

$$\delta(x) = \delta(-x).$$

9. Es gilt:

$$\delta(x) \cdot x = 0.$$

10. Sei  $\varphi(x)$  eine stetig differenzierbare Funktion, die an den Stellen  $x_i$  nur einfache Nullstellen hat. Dann gilt:

$$\delta[\varphi(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|\varphi'(x_i)|}.$$

Man beachte, dass die Deltafunktion dimensionsbehaftet ist, wie man leicht aus dem Integral (3.21) ersieht:

$$[\delta(x)] = \frac{1}{[x]}.$$

## 3.6 Quantemechanische Darstellungen und Transformationstheorie

Bisher haben wir den Zustand  $|\psi\rangle$  immer mit der Ortsdarstellung  $\psi(x)$  interpretiert. Andere Darstellungen wie die Impuls- oder Energiedarstellung sind jedoch dazu völlig äquivalent. In diesem Abschnitt geht es um die Transformationen zwischen diesen (und beliebigen anderen) Darstellungen. Hierbei gilt für eine beliebige Basis  $\{|a_i\rangle\}$  das Superpositionsprinzip:

$$|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle \\ \int |b\rangle \langle b|\psi\rangle db \end{cases}$$

Nun beschäftigen wir uns mit den Transformationen zwischen zwei Darstellungen. Die Entwicklungskoeffizienten erhalten wir, indem wir an der rot markierten Stelle von  $\langle a_j|\psi\rangle$  „eine  $\hat{1}$  einfügen“, d.h. einen vollständigen Funktionensatz. Dies funktioniert sowohl für Transformationen zu diskreten als auch zu kontinuierlichen Basen:

$$\begin{aligned} \langle a_j|\psi\rangle &= \sum_i \langle a_j|k_i\rangle \langle k_i|\psi\rangle \\ &= \int \langle a_j|b\rangle \langle b|\psi\rangle db \end{aligned}$$

Die  $\langle a_j|k_i\rangle$  und die  $\langle a_j|b\rangle$  sind die Entwicklungskoeffizienten, um aus einer Basis  $a_j$  in eine Basis  $k_i$  oder  $b$  zu transformieren. Die Transformation muss außerdem

$$\begin{aligned} \langle a_i|a_j\rangle &= \delta_{ij} = \sum_l \langle a_j|k_l\rangle \langle k_l|a_i\rangle \\ \langle a_i|a_i\rangle &= \sum_l |\langle a_i|k_l\rangle|^2 \end{aligned}$$

erfüllen. So eine Transformation nennt man eine *unitäre Transformation*.

Im folgenden betrachten wir wichtige Spezialfälle von Darstellungen und zeigen, wie sie sich aus den eben abgeleiteten allgemeinen Formeln ergeben.

### 3.6.1 Ortsdarstellung

Als erstes Beispiel betrachten wir die uns bereits geläufige Ortsdarstellung. Hier ist die zentrale Observable der Koordinatenvektor,  $\underline{r}$

$$\underline{r} = x_1 \hat{e}_1 + x_2 \hat{e}_2 + x_3 \hat{e}_3,$$

mit  $|e_i| = 1$ . Dazu korrespondiert in der Quantenmechanik der Operator  $\hat{r}$ . Als Basis für die Beschreibung von Hilbertraum-Zuständen dienen in der Ortsdarstellung die Eigenzustände von  $\hat{r}$ .

1. Die Eigenwertgleichung lautet:

$$\hat{r} |\underline{r}\rangle = \underline{r} |\underline{r}\rangle, \quad (3.25)$$

die drei skalare Eigenwertgleichungen für die kartesischen Komponenten zusammenfasst. Hierbei ist der übliche Ortsvektor der Eigenwert von  $\hat{r}$  und die zugehörige Eigenfunktion ist  $|\underline{r}\rangle$ .

2. Mit der kontinuierlichen Basis  $\{|\underline{r}\rangle\}$  ergibt sich der 1-Operator zu (Vollständigkeit):

$$\hat{1} = \int |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| d\underline{r}$$

3. Der Zustand  $|\psi\rangle$  in der Ortsdarstellung ist gegeben durch:

$$|\psi\rangle = \int |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|\psi\rangle d\underline{r}.$$

4. Für die Normierung ergibt sich daraus, unter Benutzung der Orthonormalität,  $\langle \underline{r}|\underline{r}'\rangle = \delta(\underline{r} - \underline{r}')$ :

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi|\psi\rangle = \int \int \langle \psi|\underline{r}_1\rangle \langle \underline{r}_1|\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|\psi\rangle d\underline{r} d\underline{r}_1 \\ &= \int d\underline{r} \psi^*(\underline{r})\psi(\underline{r}). \end{aligned}$$

Das ist nichts anderes als die von uns bereits verwendete Normierungsbedingung der Wellenfunktion. Wir interpretieren  $|\langle \underline{r}|\psi\rangle|^2 = |\psi(\underline{r})|^2 = \rho(\underline{r})$  als Ortswahrscheinlichkeitsdichte.

5. Das unitäre Produkt zweier Zustände ist, in der Ortsdarstellung:

$$\langle \psi|\varphi\rangle = \int \langle \psi|\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|\varphi\rangle d\underline{r} = \int \psi^*(\underline{r})\varphi(\underline{r}) d\underline{r}.$$

6. Nehmen wir nun einen beliebigen quantenmechanischen Operator,  $\hat{F}$ , mit der Wirkung  $\hat{F}|\psi\rangle = |\Phi\rangle$ , so erhalten wir seine Ortsdarstellung durch Multiplikation mit einem Ortszustand von links:

$$\langle \underline{r}'|\Phi\rangle = \Phi(\underline{r}') = \langle \underline{r}'|\hat{F}|\psi\rangle = \int \langle \underline{r}'|\hat{F}|\underline{r}\rangle \langle \underline{r}|\psi\rangle d\underline{r}, \quad (3.26)$$

wobei  $\langle \underline{r}'|\hat{F}|\underline{r}\rangle$  das Matrixelement des Operators ist und auf der rechten Seite eine 1 aus Ortszuständen eingeschoben wurde. Die Wirkung von  $\hat{F}$  ist damit durch die Matrix  $\langle \underline{r}'|\hat{F}|\underline{r}\rangle$  bestimmt, die alle möglichen Werte von  $\underline{r}$  und  $\underline{r}'$  durchläuft. Im Spezialfall  $\hat{F} = \hat{r}$  gilt, unter Verwendung der Eigenwertgleichung (3.25):

$$\langle \underline{r}'|\hat{r}|\underline{r}\rangle = \underline{r} \langle \underline{r}'|\underline{r}\rangle = \underline{r} \delta(\underline{r}' - \underline{r}).$$

Wir können dies zusammenfassen:

Der Operator  $\hat{r}$  ist in der Ortsdarstellung ein reiner Multiplikator. Seine Matrix,  $\langle \underline{r}'|\hat{r}|\underline{r}\rangle$ , ist diagonal, und die Einträge sind die Eigenwerte. Dies gilt analog für jeden Operator in seiner Eigenbasis.

Betrachten wir nun den Impulsoperator. Dazu finden wir zunächst seine Matrix-Darstellung durch die Eigenfunktionen von  $\hat{r}$ , d.h.  $\langle \underline{r}'|p|\underline{r}\rangle$ . Hierfür benutzen wir den Kommutator:

$$[\hat{p}, \hat{r}] = -i\hbar,$$

den wir als bekannt voraussetzen. Multiplikation der Gleichung mit zwei Ortseigenzuständen von links und rechts ergibt für die linke Seite:

$$\begin{aligned}\langle r' | [\hat{p}, \hat{r}] | r \rangle &= \langle r' | \hat{p}\hat{r} - \hat{r}\hat{p} | r \rangle = \langle r' | \hat{p}\hat{r} | r \rangle - \langle r' | \hat{r}\hat{p} | r \rangle \\ &= r \langle r' | \hat{p} | r \rangle - r' \langle r' | \hat{p} | r \rangle = (r - r') \langle r' | \hat{p} | r \rangle,\end{aligned}$$

sowie für die rechte Seite:

$$-i\hbar \langle r' | r \rangle = -i\hbar \delta(r - r').$$

Also können wir durch Vergleich beider Seiten ablesen (zur Vereinfachung betrachten wir den eindimensionalen Fall<sup>12</sup>):

$$\begin{aligned}\langle r' | \hat{p} | r \rangle &= -\frac{i\hbar \delta(r - r')}{r - r'} \\ &= i\hbar \frac{d}{dr} \delta(r - r').\end{aligned}\tag{3.27}$$

In der letzten Gleichung haben wir Eigenschaft (3.24) der Delta-Funktion verwendet.

Wir finden nun die Wirkung des Impulsoperators auf einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$ . Dazu verwenden wir den Ausdruck (3.26) für die Wirkung eines beliebigen Operators in der Ortsdarstellung und ersetzen  $\langle r' | \hat{F} | r \rangle \rightarrow \langle r' | \hat{p} | r \rangle$ . Durch partielle Integration, bei der die Grenzterme wegfallen, folgt:

$$\begin{aligned}\Phi(r') &= \int i\hbar \left[ \frac{d}{dr} \delta(r - r') \right] \psi(\underline{r}) dr \\ &= -i\hbar \int \delta(r - r') \frac{d}{dr} \psi(\underline{r}) dr \\ &= -i\hbar \frac{d\psi}{dr'}(r').\end{aligned}$$

Da der Zustand  $\psi(r)$  beliebig war, erhalten wir die Wirkung von  $\hat{p}$  in der Ortsdarstellung durch Weglassen von  $\psi(r)$  – wie bereits aus der Ableitung der Schrödinger-Gleichung gefunden – zu  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dr}$ .

Nun benötigen wir noch die *Impulseigenfunktionen in der Ortsdarstellung*. Also schauen wir uns die Eigenwertgleichung für den Impulsoperator an und betrachten den eindimensionalen Fall:

$$\hat{p}_x |p_x\rangle = p_x |p_x\rangle.$$

Um hieraus eine Differentialgleichung für die Eigenfunktionen zu gewinnen, multiplizieren wir von links mit einem Ortseigenzustand und fügen auf der linken Seite an der rot markierten Stelle wieder den entsprechenden  $\hat{1}$ -Operator ein:

$$\begin{aligned}\langle x | \hat{p}_x | p_x \rangle &= \int \langle x | \hat{p}_x | x' \rangle \langle x' | p_x \rangle dx' \\ &= p_x \langle x | p_x \rangle\end{aligned}$$

Die Ortsdarstellung der Impuls-Eigenzustände zum (reellen) Eigenwert  $p_x$  bezeichnen wir mit

$$\langle x | p_x \rangle = \psi_{p_x}(x), \quad \text{Eigenfunktionen des Impulsoperators}\tag{3.28}$$

<sup>12</sup>Dies ist ausreichend, da unterschiedliche Komponenten von  $\underline{r}$  und  $\underline{p}$  kommutieren.

und setzen unter dem Integral die Matrix des Impulsoperators in der Ortsdarstellung, Glg. (3.27), ein:

$$\int i\hbar \left[ \frac{d}{dx} \delta(x - x') \right] \psi_{p_x}(x') dx' = p_x \psi_{p_x}(x)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x),$$

wobei das Ergebnis in der letzten Zeile durch partielle Integration erhalten wurde. Wir erhalten also eine einfach zu lösende gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung mit der Lösung:

$$\psi_{p_x}(x) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x}$$

Um den Koeffizienten  $C$  zu bestimmen, betrachten wir die Normierung und nutzen Eigenschaft (3.23) der Delta-Funktion:

$$\delta(p_{x'} - p_x) = \langle p_{x'} | p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p_{x'}}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx =$$

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{x'} - p_x)x} dx = |C|^2 \delta(p_{x'} - p_x) \cdot 2\pi\hbar$$

Es folgt also:

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$$

Damit können wir das Resultat zusammenfassen:

Die normierten Impulseigenfunktionen in der Ortsdarstellung sind in 1D:

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x} \quad (3.29)$$

und analog in 3D:

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}, \quad (3.30)$$

wobei die ‘‘Normierung auf die Delta-Funktion’’ erfolgt.

Nun wollen wir weitere Operatoren in der Ortsdarstellung erhalten. Hierfür machen wir uns das zuvor schon erwähnte Korrespondenzprinzip zu Nutze. Es ist ein Postulat der Quantenmechanik und besagt:

Der funktionale Zusammenhang einer Observable mit den kanonischen Variablen,  $A = A(r, p)$ , lässt sich direkt auf die Quantenmechanik mit einem Operator  $\hat{A} = \hat{A}(\hat{r}, \hat{p})$  übertragen.

Hierbei ist zu beachten, dass Operatoren nicht zwangsläufig kommutieren. Es kommt hier also auf die Anordnung an. Der folgende Abschnitt erläutert, was wir unter einer Funktion eines Operators zu verstehen ist.

## Funktionen von Operatoren

Sei  $z \in \mathbb{C}$  und  $f$  eine im Sinne der Funktionentheorie differenzierbare Funktion. Diese lässt sich dann immer in eine Potenzreihe

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$$

entwickeln. Wir definieren nun den Operator  $\hat{f}$  im Raum der Operatoren  $\hat{A}$  als

$$\hat{f}(\hat{A}) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(\hat{A})$$

mit

$$f_n(\hat{A}) = \sum_{k=0}^n a_k \hat{A}^k$$

Die Koeffizienten  $a_k$  erhalten wir aus der Taylorreihe des Operators:

$$\hat{f}(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n f(0)}{d\hat{A}^n} \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

Als Beispiel betrachten wir den *Translationsoperator*  $\hat{T}_{\underline{a}}$ .

$$\hat{T}_{\underline{a}} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot \underline{a}}$$

Es ergibt sich:

$$\hat{T}_{\underline{a}} \psi(\underline{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\underline{a} \nabla)^n}{n!} \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r} + \underline{a})$$

Den obigen Ausdruck verifizieren wir durch:

$$\psi(\underline{r} + \underline{a}) = \psi(\underline{r}) + \psi'(\underline{r})(\underline{r} - \underline{r} + \underline{a}) + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\underline{a} \cdot \nabla)^n}{n!} \psi(\underline{r})$$

Die Anwendung des Operators  $\hat{T}_{\underline{a}}$  verschiebt also das Argument einer Wellenfunktion um den Vektor  $\underline{a}$ . Dieser Operator ist direkt mit dem Impulsoperator verknüpft, den man also als *Generator von Raumtranslationen* verstehen kann.

**Weitere Beispiele:** Wir wenden das Korrespondenzprinzip nun weiter auf quantenmechanische Observablen an. Die potentielle Energie  $\hat{V} = \hat{V}(\hat{r})$  ist in der Ortsdarstellung ein reiner Multiplikator, da  $\langle r' | \hat{r} | r \rangle = r\delta(r - r')$  diagonal ist. Daher sind auch beliebige Potenzen von  $\hat{r}$  diagonal. Damit folgt die Wirkung dieses Operators in der Ortsdarstellung zu  $\hat{V}(\hat{r})\psi(r) = V(r)\psi(r)$ . Diese Eigenschaft der Ortsdarstellung hatten wir bereits bei der Lösung der Schrödingergleichung für ein Teilchen im Kastenpotential bzw. im Oszillatortpotential verwendet.

Den Operator der kinetischen Energie können wir ausdrücken durch:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Auch dies hatten wir bereits bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung im Ortsraum benutzt. Wir nutzen nun das Korrespondenzprinzip um den Drehimpulsoperator, den wir bisher noch nicht benutzt hatten, zu bestimmen. Klassisch gilt der Zusammenhang

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$$

Also erwarten wir in der Quantenmechanik einen analogen Operatorform:

$$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \frac{\hbar}{i} \nabla.$$

Dies werden wir im Kapitel 5 direkt bestätigen.

Die Kenntnis von  $\hat{\underline{r}}$  und  $\hat{\underline{p}}$  reicht also aus, um alle weiteren Operatoren zu bestimmen.

### 3.6.2 Impulsdarstellung

Analog zur Ortsdarstellung betrachten wir nun die Impulsdarstellung, die also auf den Eigenfunktionen des Impulsoperators basiert. Für  $-\infty < p_x < \infty$  gilt die folgende Eigenwertgleichung:

$$\hat{p}_x |p_x\rangle = p_x |p_x\rangle$$

Die Impulsdarstellung eines beliebigen Zustands bezeichnen wir mit (zur Unterscheidung der Impulsabhängigkeit verwenden wir die Tilde)<sup>13</sup>:

$$\langle p_x | \psi \rangle = \tilde{\psi}(p_x)$$

Wir wissen bereits, dass der Operator  $\hat{p}_x$  in der Impulsbasis diagonal ist. Wir fragen uns nun, wie der Ortsoperator in dieser Basis aussieht. Hierfür benutzen wir wieder den Kommutator  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ . Die Rechnung ergibt, analog zur Darstellung des Impulsoperators in der Ortsbasis,

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}.$$

Die Matrix dieses Operators in Impulseigenzuständen ist ebenfalls diagonal.

Wir finden nun die *Ortseigenfunktionen in der Impulsbasis*. Eine Rechnung wie im Falle der Ortsdarstellung können wir vermeiden, indem wir die Eigenschaft des unitären Produktes verwenden:

$$\langle p_x | x \rangle = \langle x | p_x \rangle^* = \psi_{p_x}^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x} = \tilde{\psi}_x(p_x)$$

Damit lassen sich also die *Eigenfunktionen des Ortsoperators* in der Impulsdarstellung direkt auf die *Eigenfunktionen des Impulsoperators* in der Ortsdarstellung, s. Glg. (3.28), zurückführen: der Zusammenhang ist durch komplexe Konjugation gegeben.

Fassen wir noch einmal die beiden untersuchten Darstellungen eines beliebigen Zustandes  $|\psi\rangle$  zusammen:

$$|\psi\rangle = \begin{cases} \langle x | \psi \rangle = \psi(x), & \text{Ortsdarstellung} \\ \langle p_x | \psi \rangle = \tilde{\psi}(p_x), & \text{Impulsdarstellung} \end{cases}$$

---

<sup>13</sup>Diese Funktionen unterscheiden sich von den oben eingeführten Impulseigenfunktionen, die vom Ort abhängen, vgl. Glg. (3.29).

Wir fragen nun nach dem Zusammenhang der beiden Wellenfunktionen, die beide den selben Zustand  $|\psi\rangle$  darstellen. Hierfür gehen wir von der Ortsdarstellung aus und fügen wir wieder einen  $\hat{1}$ -Operator aus Impuls-Basiszuständen ein,

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \langle x|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p_x\rangle \langle p_x|\psi\rangle dp_x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p_x \cdot x} \tilde{\psi}(p_x) dp_x\end{aligned}$$

Der gesuchte Zusammenhang zwischen  $\psi(x)$  und  $\tilde{\psi}(p_x)$  ist also die Fouriertransformation.

### 3.6.3 Energiedarstellung

In der Energiedarstellung verwenden wir also die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators als Basis, die wir kurz bezeichnen durch ihren Index:

$$|E_n\rangle = |n\rangle .$$

Die Eigenfunktionen und Eigenwerte ergeben sich aus der Eigenwertgleichung von  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle . \quad (3.31)$$

Der Hamilton-Operator ist in der Energiedarstellung diagonal, wobei auf der Diagonale wiederum die Eigenwerte stehen:

$$\langle E_{n'} | \hat{H} | E_n \rangle = E_n \delta_{n'n} .$$

Dieser Ausdruck gilt für den Fall einer diskreten Basis (z.B. Eigenzustände im Fall des unendlich tiefen Potentialtopfes oder des harmonischen Oszillators), und die Verallgemeinerung auf den kontinuierlichen Fall stellt kein Problem dar.

Der Ausdruck (3.31) ist natürlich von der Form der stationären Schrödinger-Gleichung. Man beachte aber, dass die Eigenzustände  $|E_n\rangle$  hier noch völlig allgemeine Hilbertraumvektoren sind, die erst in der Ortsdarstellung wiederum zum Wellenfunktionen  $\varphi_n(x)$  werden. Diesen Spezialfall betrachten wir jetzt zur Illustration und finden die Matrix des Ortsoperators in der Energiedarstellung,  $\langle n'|\hat{x}|n\rangle$ . Um diesen Ausdruck auf den bekannten (diagonalen) Ausdruck in der Koordinatendarstellung zurückzuführen, fügen wir wie gewohnt zwei  $\hat{1}$ -Operatoren ein und bezeichnen die Ortsdarstellung der Eigenzustände von  $\hat{H}$  mit  $\langle x|n\rangle = \varphi_n(x)$ ,

$$\begin{aligned}\langle n'|\hat{x}|n\rangle &= \int \int \underbrace{\langle n'|x\rangle}_{\varphi_{n'}^*(x)} \underbrace{\langle x|\hat{x}|x'\rangle}_{x\delta(x-x')} \underbrace{\langle x'|n\rangle}_{\varphi_n(x')} dx dx' \\ &= \int dx \varphi_{n'}^*(x) x \varphi_n(x) \equiv x_{nn'}\end{aligned} \quad (3.32)$$

Der Ausdruck (3.32) bezeichnet das Matrixelement des Ortsoperators und lässt sich analog auf beliebige Operatoren übertragen.

Die Verwendung von Matrizen der Form  $\langle n|\hat{x}|n'\rangle = x_{nn'}$  in der Energiebasis entspricht der von Heisenberg eingeführten ‘‘Matrizen-Mechanik’’, die zur Schrödingerbeschreibung mit Wellenfunktionen äquivalent ist. Wie wir gesehen haben, stellen beide aber nur zwei Spezialfälle der allgemeineren Formulierung der Quantenmechanik durch Hilbertraum-Zustände dar – die Energie- bzw. Ortsdarstellung.

**Beispiel 1:** Wir kennen bereits die Lösung der Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator. Der Hamilton-Operator ist hier durch folgende diagonale Matrix gegeben, deren Einträge die Energie-Eigenwerte sind:

$$H_{nn'} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{nn'}$$

Der Ortsoperator hat eine nicht-diagonale Gestalt:

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

**Beispiel 2:** Wir besprechen nun noch ein Beispiel, welches den *Vorteil einer günstigen Darstellungswahl* zeigen soll.<sup>14</sup> Wir betrachten den Hamilton-Operator für ein Teilchen, welches unter dem Einfluss einer konstanten Kraft (lineares Potential) steht,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - F\hat{x}.$$

Zu lösen ist dann die Eigenwertgleichung:

$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$$

Wir können diese EW-Gleichung nun z.B. in der Orts- oder der Impulsdarstellung auswerten. Schauen wir uns zunächst die Ortsdarstellung an und setzen die entsprechenden Operatoren in dieser Darstellung ein:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - Fx \right) \psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

Dies ist eine Differentialgleichung 2ter Ordnung. Die Lösung ist kompliziert und durch die Airy-Funktionen gegeben. Schauen wir uns nun die Impulsdarstellung an:

$$\left( \frac{p_x^2}{2m} - F \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp_x} \right) \tilde{\psi}_E(p_x) = E \tilde{\psi}_E(p_x)$$

Hier haben wir also eine einfach zu lösende Differentialgleichung erster Ordnung vorliegen. Man kann also zunächst das Problem in der einfacheren Impulsdarstellung lösen und die Ortseigenfunktionen dann durch eine Fouriertransformation der Impulseigenfunktionen bestimmen.

## 3.7 VERTAUSCHBARKEIT VON OPERATOREN. MESSBARKEIT. UNSCHÄRFE

### 3.7.1 MESSBARKEIT

In der Quantenmechanik sind im Allgemeinen zwei Observable,  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , nicht gleichzeitig messbar. Das heißt, dass sie keine gemeinsamen Eigenfunktionen haben. Wann gleichzeitige Messbarkeit vorliegt, bestimmt folgender Satz:

<sup>14</sup> Natürlich sind – wie schon erwähnt – alle Darstellungen äquivalent.

**Satz:** Zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  haben genau dann gemeinsame Eigenfunktionen  $|ab\rangle$ , wenn  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  ist.

**Beweis:** 1. Betrachten wir zunächst die einfachere Richtung und nehmen an, dass  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  gemeinsame Eigenzustände  $|ab\rangle$  haben. Die beiden Eigenwertprobleme haben also die Form

$$\begin{aligned}\hat{A} |ab\rangle &= a |ab\rangle \\ \hat{B} |ab\rangle &= b |ab\rangle ,\end{aligned}$$

wobei wir die Eigenwerte von  $\hat{A}$  mit  $a$  und die von  $\hat{B}$  mit  $b$  bezeichnet haben. Dann gilt

$$\hat{B} \hat{A} |ab\rangle = ba |ab\rangle$$

und auch

$$\hat{A} \hat{B} |ab\rangle = ab |ab\rangle$$

Ziehen wir die beiden Gleichungen voneinander ab, so folgt aus  $ba - ab = 0$  sofort die Kommutativität der Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ .

2. Es gelte nun rückwärts,  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Dann folgen die Eigenzustände von  $\hat{A}$  aus

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle ,$$

und ebenso

$$\hat{B} \hat{A} |a\rangle = a \hat{B} |a\rangle = \hat{A} \hat{B} |a\rangle ,$$

wobei der letzte Ausdruck eine Konsequenz des Kommutators ist. Die rechte Relation bedeutet aber nichts anderes als, dass der Zustand  $\hat{B} |a\rangle$  ebenfalls ein Eigenzustand von  $\hat{A}$  ist, und zwar zum selben Eigenwert  $a$ . Unter der Annahme, dass die Eigenwerte  $a$  von  $\hat{A}$  nichtentartet sind, folgt, dass beide Eigenzustände  $\hat{B} |a\rangle$  und  $|a\rangle$  übereinstimmen oder sich höchstens durch einen konstanten Faktor  $b$  unterscheiden:

$$\hat{B} |a\rangle = b |a\rangle .$$

Dies ist aber nichts anderes als das Eigenwertproblem von  $\hat{B}$ , also ist dieser Faktor nichts anderes als der Eigenwert zum Eigenvektor  $|b\rangle \equiv |a\rangle$ , der also ein gemeinsamer Eigenvektor  $|b\rangle \equiv |a\rangle \equiv |ab\rangle$  beider Operatoren ist. Die Verallgemeinerung auf den Fall entarteter Eigenzustände erreicht man wieder durch Anwendung eines Orthogonalisierungsverfahrens.

**Fazit:** Aus  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  folgt also, dass  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  gleichzeitig messbar sind. Ihre Messung führt also auf die gemeinsamen Eigenzustände  $|ab\rangle$ . Ein Beispiel hierfür sind die Operatoren  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}$  und  $\hat{L}_z$ , die beim Wasserstoffatom (isotropes Coulombpotential) alle kommutieren und folglich gemeinsame Eigenzustände  $|nlm\rangle$  besitzen, wobei die Zahlen  $n, m, l$  zu den Eigenwerten von  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$  bzw.  $\hat{L}$  korrespondieren. Ein weiteres Beispiel ist der zweidimensionale harmonische Oszillator mit  $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$ . Dort gilt  $[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0$ , und die gemeinsamen Eigenfunktionen sind einfach das Produkt der Eigenfunktionen der eindimensionalen Probleme,  $\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)$ .

Umgekehrt wissen wir aber auch, dass zum Beispiel der Kommutator  $[\hat{r}, \hat{p}] \neq 0$  nicht verschwindet. Beide Operatoren besitzen also keine gemeinsamen Eigenfunktionen und sind folglich nicht gleichzeitig messbar. Die Abweichung von der gleichzeitigen Messbarkeit lässt sich quantifizieren. Dazu dient der Begriff der *Unschärfe* bzw. des Unschärfeproduktes zweier Operatoren, den wir bereits kennengelernt haben und im Folgenden noch etwas genauer untersuchen.

### 3.7.2 Unschärfe und allgemeine Unschärferelation

Wir diskutieren nun noch einmal die Unschärfe etwas genauer. Wir verstehen sie als Abweichung vom statistischen Mittelwert eines Zufallsprozesses (Schwankung, Standardabweichung). Der Mittelwert eines Operators im Zustand  $|\psi\rangle$  war gegeben durch:

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

Der Operator der Abweichung ist also die Fluktuation:

$$\delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi .$$

Hier treten im allgemeinen natürlich positive und negative Abweichungen auf, so dass die mittlere Schwankung verschwindet

$$\langle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi \rangle_\psi = \langle \delta \hat{A} \rangle_\psi = 0.$$

Um dennoch ein Maß für die Größe der Schwankung zu erhalten, führen wir wie üblich die *Varianz* ein, die aus den quadratischen Abweichungen folgt,

$$\langle (\delta \hat{A})^2 \rangle_\psi = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 = \Delta \hat{A}^2 \quad (3.33)$$

Die Unschärfe definieren wir nun als Wurzel der Varianz, identifizieren sie also mit der Standardabweichung der Größe  $A$  (wir unterdrücken den Index  $\psi$ ):

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\Delta \hat{A}^2} . \quad (3.34)$$

Nach diesen Definitionen betrachten wir nun zwei nicht kommutierende hermitesche Operatoren,  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , und berechnen das Produkt ihrer Unschärfen. Dieses wollen wir in Relation setzen zur Größe ihres Kommutators im Zustand  $|\psi\rangle$ .

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i \hat{C}$$

Wir schauen uns nun die Abweichungen vom Mittelwert an:

$$\begin{aligned} \delta \hat{A} &= \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \\ \delta \hat{B} &= \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \end{aligned}$$

Wie man leicht sieht, gilt auch:

$$[\delta \hat{A}, \delta \hat{B}] = i \hat{C}$$

Nun schauen wir uns das Produkt der Varianzen  $\Delta A^2$  und  $\Delta B^2$  im Zustand  $|\psi\rangle$  an und verwenden (3.33):

$$\begin{aligned} (\Delta A^2)_\psi &= \langle \psi | \delta \hat{A} \delta \hat{A} | \psi \rangle = \langle f | f \rangle , \\ (\Delta B^2)_\psi &= \langle \psi | \delta \hat{B} \delta \hat{B} | \psi \rangle = \langle g | g \rangle , \end{aligned}$$

wobei wir die Abkürzungen  $|f\rangle$  und  $|g\rangle$  für die Zustände  $\delta \hat{A}|\psi\rangle$  bzw.  $\delta \hat{B}|\psi\rangle$  eingeführt haben. Jetzt formulieren wir das Unschärfeprodukt und benutzen die Schwartz'sche Ungleichung für das Skalarprodukt für eine Abschätzung von unten:

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

Damit erhalten wir, nach Einsetzen der Definitionen von  $f$  und  $g$ :

$$(\Delta A^2)_\psi (\Delta B^2)_\psi \geq |\langle \psi | \delta \hat{A} \delta \hat{B} | \psi \rangle|^2$$

Den Ausdruck auf der rechten Seite wollen wir nun durch den Kommutator abschätzen. Dazu nutzen wir folgende Identität:

$$\begin{aligned} \delta \hat{A} \delta \hat{B} &= \frac{1}{2}(\delta \hat{A} \delta \hat{B} + \delta \hat{B} \delta \hat{A}) + \frac{1}{2}(\delta \hat{A} \delta \hat{B} - \delta \hat{B} \delta \hat{A}) \\ &= \frac{1}{2}(\delta \hat{A} \delta \hat{B} + \delta \hat{B} \delta \hat{A}) + \frac{i}{2} \hat{C} \end{aligned}$$

Hieraus folgt:

$$(\Delta A^2)_\psi (\Delta B^2)_\psi \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | \delta \hat{A} \delta \hat{B} + \delta \hat{B} \delta \hat{A} | \psi \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|^2 \quad (3.35)$$

Dies ist bereits das gesuchte Ergebnis, das wir wie folgt formulieren können:

Die allgemeine Form der Heisenberg'schen Unschärferelation (Heisenberg 1927) ist:

$$(\Delta A^2)_\psi (\Delta B^2)_\psi \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \quad (3.36)$$

Das heißt, das Unschärfeprodukt zweier nicht-kommutierender Operatoren in einem Zustand  $|\psi\rangle$  kann nicht kleiner sein als der Erwartungswert des Kommutators dieser Operatoren in diesem Zustand.

Betrachten wir als Beispiel die Observable Impuls und Ort. Aus dem bekannten Kommutator

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$$

folgt für einen beliebigen auf 1 normierten Zustand der Erwartungswert des Kommutators

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} |\langle \psi | -i\hbar | \psi \rangle|^2 &= \frac{1}{4} |-i\hbar \langle \psi | \psi \rangle|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned}$$

Es gilt also für das Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe allgemein (für einen beliebigen Zustand):

$$\Delta p_x^2 \cdot \Delta x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

bzw. für die anschaulicheren Standardabweichungen (sie haben die selbe Dimension wie die Größen selbst)

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2},$$

Daraus folgt sofort für den dreidimensionalen Fall, wegen

$$\begin{aligned} [\hat{r}_i, \hat{r}_j] &= 0 \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0 \\ [\hat{r}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \delta_{ij} \end{aligned}$$

dass die Unschärfeprodukte der einzelnen kartesischen Komponenten additiv sind:

$$\Delta \underline{p}^2 \cdot \Delta \underline{r}^2 \geq 3 \frac{\hbar^2}{4}.$$

Dies ist die berühmte Heisenberg-Unschärfebeziehung für Ort und Impuls, die die prinzipiellen Grenzen der Messgenauigkeit—die nicht durch apparative oder andere Begrenzungen bestimmt sind—in der Quantenmechanik angibt. Man beachte, dass dieses Unschärfeprodukt extrem klein ist (man erinnere sich an den Zahlenwert von  $\hbar!$ ) und nur für Objekte des Mikrokosmos überhaupt relevant ist.

Diese Unschärfebeziehung ist kein reiner Quanteneffekt. Die Unmöglichkeit, gleichzeitig Ort und Impuls (oder Wellenzahl) exakt zu messen, findet man analog bei Wellen, da beide Größen zu einander komplementär sind, d.h. sie sind verknüpft über eine Fouriertransformation, wie wir bei der Diskussion der Impulsdarstellung gesehen hatten.

Eine analoge Komplementarität existiert natürlich auch für Energie (oder Frequenz) und Zeit, etwa in einer elektromagnetischen Welle. Und auch hier existiert ein endliches Unschärfeprodukt: Frequenz (Energie) und Dauer eines Schwingungsvorganges lassen sich prinzipiell nicht gleichzeitig exakt messen,

$$\Delta E^2 \cdot \Delta t^2 \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

was auch hier aus der Fouriertransformation von Zeit zu Frequenz folgt. Allerdings ist die Zeit keine Observable (nicht durch einen Operator gegeben), sondern ein Parameter im Messprozess.

**Minimale Unschärfe:** Wir betrachten nun noch einmal den Zustand der minimalen Orts-Impuls-Unschärfe. Dieser Fall ist der Klassik am nächsten. Wir benötigen nun Bedingungen, um in Formel (3.36) Gleichheit herzustellen. Hierfür müssen wir uns die Schwarz'sche Ungleichung genauer ansehen, da diese der eigentliche Grund für die Heisenberg-Unschärfe ist. Nehmen wir also zunächst zwei Vektoren oder Zustände  $|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H}$  und beweisen die Schwarz'sche Ungleichung:

$$|\langle f|g\rangle| \leq \sqrt{\langle f|f\rangle \langle g|g\rangle}$$

**Beweis:** Aus der Analogie mit Vektoren im Zwei- oder Dreidimensionalen kann man sich überlegen, dass es sinnvoll ist, den Vektor  $|f\rangle$  in eine parallele und eine senkrechte Komponente zu  $|g\rangle$  zu zerlegen. Überlegen wir uns zunächst die parallele Komponente. Hierzu projizieren wir  $|f\rangle$  auf  $|g\rangle$  und teilen durch die Länge von  $|g\rangle$ .

$$|f_{||}\rangle = \frac{|g\rangle \langle g|f\rangle}{\langle g|g\rangle} = \lambda |g\rangle$$

Den senkrechten Anteil erhalten wir dann einfach zu:

$$|f_{\perp}\rangle = \left( |f\rangle - \frac{|g\rangle \langle g|f\rangle}{\langle g|g\rangle} \right)$$

Man erkennt, dass  $\langle f_{||}|f_{\perp}\rangle = 0$  gilt, was die Orthogonalität zeigt. Man macht sich die obigen Überlegungen am besten an Hand von zweidimensionalen Vektoren aus  $\mathbb{R}_2$  klar. Wir können also den Zustand  $|f\rangle$  darstellen als:

$$|f\rangle = |f_{||}\rangle + |f_{\perp}\rangle.$$

Betrachten wir nun:

$$\begin{aligned}
 \langle f|f \rangle &= \langle f_{||} + f_{\perp}|f_{||} + f_{\perp} \rangle \\
 &= \langle f_{||}|f_{||} \rangle + \langle f_{\perp}|f_{\perp} \rangle + \underbrace{\langle f_{||}|f_{\perp} \rangle + \langle f_{\perp}|f_{||} \rangle}_{=0} \\
 &= \frac{\langle g|g \rangle |\langle g|f \rangle|^2}{\langle g|g \rangle \langle g|g \rangle} + \langle f_{\perp}|f_{\perp} \rangle \\
 \langle f|f \rangle &= \frac{|\langle g|f \rangle|^2}{\langle g|g \rangle} + \langle f_{\perp}|f_{\perp} \rangle \geq \frac{|\langle g|f \rangle|^2}{\langle g|g \rangle} \\
 |\langle g|f \rangle| &\leq \sqrt{\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle}
 \end{aligned}$$

Damit ist diese Ungleichung bewiesen. Nun Überlegen wir uns, wann Gleichheit gilt. Schauen wir uns hierfür den vorletzten Schritt des Beweises an. Für Gleichheit muss  $\langle f_{\perp}|f_{\perp} \rangle = 0$  sein. Da dies für alle Zustände  $|f\rangle$  der Fall sein soll, wissen wir, dass im Falle der Gleichheit  $|f\rangle$  parallel zu  $|g\rangle$  sein muss.

$$|\langle f|g \rangle|^2 = \langle f|f \rangle \langle g|g \rangle \Leftrightarrow |f\rangle = \lambda \cdot |g\rangle$$

### Zustände minimaler Orts-Impuls-Unschärfe.

Schauen wir uns nun noch einmal Gleichung (3.35) an. Hier haben wir die Schwarz'sche Ungleichung schon benutzt und machen nun noch eine gröbere Abschätzung beim Schritt zur Unschärferelation indem wir den Term  $\frac{1}{4}|\langle \psi|\delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A}|\psi \rangle|^2$  weglassen. Schauen wir uns nun das Beispiel des Orts und des Impulses an und versuchen, hier den Zustand der minimalen Unschärfe zu finden. Für diese Forderung hatten wir zwei Bedingungen gewonnen:

1. Der Mischterm aus Gleichung (3.35) muss verschwinden:

$$\langle \psi^{(k)} | \delta\hat{p}_x \delta\hat{x} + \delta\hat{x} \delta\hat{p}_x | \psi^{(k)} \rangle = 0. \quad (3.37)$$

2. Außerdem ist für die Gleichheit in der Schwarz'schen Ungleichung

$$\delta\hat{p}_x |\psi^{(k)}\rangle = \lambda \delta\hat{x} |\psi^{(k)}\rangle, \quad (3.38)$$

erforderlich.

Der Index  $k$  bezeichnet dabei die Zustände der minimalen Unschärfe. Dies wollen wir nun zeigen. Hierfür nehmen wir uns Bedingung (3.38) und schreiben die Fluktuationen aus:

$$(\hat{p}_x - \bar{p}) |\psi^{(k)}\rangle = \lambda(\hat{x} - \bar{x}) |\psi^{(k)}\rangle$$

Hieraus folgt in der Ortsdarstellung der Lösungsansatz:

$$\langle x | \psi^{(k)} \rangle = \psi^{(k)}(x) = C(x) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} x}$$

Nimmt man sich nun Bedingung (3.37) und eliminiert  $\delta p$ , folgt

$$0 = \langle \psi^{(k)} | (\delta\hat{x})^2 \lambda^* + \lambda (\delta\hat{x})^2 | \psi^{(k)} \rangle.$$

Daraus folgt, dass  $\lambda^* = -\lambda$  sein muss. Setzen wir den obigen Lösungsansatz in die erste Bedingung ein, so folgt:

$$C(x) = A e^{\frac{i\lambda}{2\hbar} (x - \bar{x})^2}$$

Setzen wir nun die Lösung zusammen, so erhalten wir unser zuvor schon berechnetes Gauß'sches Wellenpaket:

$$\psi^{(k)}(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\Delta x^2}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{4\Delta x^2} - \frac{i}{\hbar} x\bar{p}}$$

Analog findet man die Zustände minimaler Unschärfe für andere Paare nicht-kommutierender Operatoren und in anderen Darstellungen.

**Aufgabe:** Man untersuche kritisch die Anforderungen, die an einen Zustand  $|\psi\rangle$  zu stellen sind, damit die obige Herleitung der Heisenberg-Unschärfe-Relation korrekt ist.

**Aufgabe:** Man untersuche die Heisenberg-Unschärferelation (3.36) für den Fall, dass  $|\psi\rangle$  ein Eigenzustand von  $\hat{A}$ , nicht aber von  $\hat{B}$  ist. Hinweis: man wiederhole und prüfe jeden Schritt der Herleitung.

### 3.7.3 Diskussion zur Messung in der Quantenmechanik. Kollaps der Wellenfunktion und nichtinvasive Messung

Abschließend noch eine Bemerkung zum Messprozess in der Quantenmechanik. Messbarkeit, Unschärfe und Zufälligkeit der Einzelmessung hatten bei unseren bisherigen Betrachtungen eine zentrale Rolle gespielt. Die Idee, dass bei jeder Messung immer nur ein einziger Eigenwert einer vollständigen Observable realisiert wird (“Kollaps der Wellenfunktion”) haben wir dabei implizit angenommen. Dies bedeutet allerdings nicht – wie häufig behauptet – dass die Messprozedur das Messobjekt zwingend stark beeinflusst. Es sind auch andere Messprotokolle möglich, bei denen die Messung nichtinvasiv ist. Wir werden uns dieser Thematik noch einmal gesondert in Kapitel 9.1 widmen.



# Kapitel 4

## Quantenmechanische Dynamik

### 4.1 Dynamik der Zustände. Zeit-Entwicklungsoperator

Nachdem wir zuvor die Eigenschaften stationärer Lösungen formal untersucht haben, beschäftigen wir uns nun mit zeitabhängigen Lösungen. Grundsätzlich gibt es zwei Arten der Zustandsänderung. Zum einen haben wir gesehen, dass in Folge einer Messung ein Eigenwert fixiert werden kann (invasive Messung). Hier liegt eine “sprunghafte” und stochastische Zustandsänderung vor, s. Abschnitt 9.1. Zum anderen kann es – wie auch in der klassischen Mechanik – zu einer, von einer externen Kraftwirkung hervorgerufenen, internen Dynamik kommen. Hier liegt eine kontinuierliche Zeitentwicklung vor, die vergleichbar mit der klassischen Trajektorie ist.

Wir können das Problem dieser quantenmechanischen Dynamik folgendermaßen beschreiben. Wir kennen zum Zeitpunkt  $t = t_0$  den Zustand  $\langle x | \psi t_0 \rangle = \psi(x, t_0) = \psi_0$ . Wie kommen wir jetzt zu einem Zustand zur Zeit  $t > t_0$ , den wir mit  $\langle x | \psi t \rangle = \psi(x, t)$  bezeichnen. Die Dynamik des Zustandes wird also durch den Übergang

$$|\psi t_0\rangle \rightarrow |\psi t\rangle$$

beschrieben. Die zu lösende Grundgleichung ist wieder die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, jetzt allerdings abstrakt für Hilbertraum-Zustände formuliert:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi t\rangle = \hat{H} |\psi t\rangle , \quad (4.1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\psi t_0\rangle = |\psi_0\rangle . \quad (4.2)$$

Wir machen einen Lösungsansatz durch einen Operator  $\hat{U}(tt_0)$ , der das Quantensystem vom Anfangszustand in den Zustand zur Zeit  $t$  transformieren soll, das heißt

$$|\psi t\rangle = \hat{U}(tt_0) |\psi t_0\rangle \quad (4.3)$$

mit

$$\hat{U}(t_0 t_0) = \hat{1} . \quad (4.4)$$

Diese Bedingung gilt für den Fall beliebiger identischer Argumente. Setzen wir dies in (4.1) ein:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(tt_0) |\psi t_0\rangle = \hat{H} \hat{U}(tt_0) |\psi t_0\rangle$$

Wir erhalten hieraus also eine Gleichung für den Operator  $\hat{U}$ , der *Zeitentwicklungsoperator* genannt wird, und der im allgemeinen von zwei Zeitargumenten abhängt (wir verzichten in dem meisten Fällen auf ein Komma, so lange die Notation klar ist).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(tt_0) = \hat{H} \hat{U}(tt_0) \quad (4.5)$$

mit

$$\hat{U}(t_0 t_0) = \hat{1}$$

Verstehen wir die funktionalen Zusammenhänge der Operatoren—wie zuvor besprochen—durch die Wirkung ihrer Taylorentwicklung, so können wir die Differentialgleichung für die *Operatorfunktion*  $\hat{U}$  lösen und erhalten:

$$\hat{U}(tt_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}.$$

Hierbei sind wir jedoch davon ausgegangen, dass der Hamilton-Operator zeitlich konstant bleibt. Wir verallgemeinern dies nun auf  $\hat{H} = \hat{H}(t)$ . Hierzu formen wir (4.5) wie folgt um:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial_t \hat{U}(tt_0)}{\hat{U}(tt_0)} &= \hat{H}(t) \\ i\hbar \int_{t_0}^t \frac{\partial_t \hat{U}(\bar{t}t_0)}{\hat{U}(\bar{t}t_0)} d\bar{t} &= \int_{t_0}^t \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \\ i\hbar \{ \ln \hat{U}(tt_0) - \underbrace{\ln \hat{U}(t_0 t_0)}_{=0} \} &= \int_{t_0}^t \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \end{aligned}$$

Als Ergebnis erhalten wir<sup>1</sup>

$$\hat{U}(tt_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t) dt}. \quad (4.6)$$

Aus unserer Herleitung kann man noch eine andere nützliche Formulierung ersehen:

$$\hat{U}(tt_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') \hat{U}(t't_0) dt' \quad (4.7)$$

Schauen wir uns nun den Spezialfall einer kurzen Zeitdifferenz  $\epsilon$  an. Es sei nun für ein kleines  $\epsilon$  mit  $t = t_0 + \epsilon$  der Hamilton-Operator näherungsweise konstant. Dann können wir ihn aus dem Integral herausziehen und erhalten:

$$\hat{U}(t_0 + \epsilon) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0) \epsilon \quad (4.8)$$

Der Operator  $\hat{H}$  ist also der erzeugende Operator der infinitesimalen zeitlichen Verschiebung.

<sup>1</sup>Streng genommen, muss vor der Exponenten noch ein Zeitordnungsoperator  $\hat{T}$  platziert werden, da es auch Fälle gibt, bei denen der Hamiltonoperator zu einer Zeit nicht mit dem Hamiltonoperator zu einer anderen Zeit kommutiert. In dem Fall muss in der Reihenentwicklung der Exponenten die Anordnung der Hamiltonoperatoren klar definiert werden, was durch den Operator  $\hat{T}$  sichergestellt wird.

**Eigenschaften von  $\hat{U}$ :**

- Der Operator  $\hat{U}$  ist linear. Sei  $|\psi t\rangle$  mit  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ . Dann gilt:

$$|\psi t\rangle = \hat{U}(tt_0) |\psi_1 t_0\rangle + \hat{U}(tt_0) |\psi_2 t_0\rangle \quad (4.9)$$

- Eine weitere sehr wichtige Eigenschaft ist die Gruppeneigenschaft. Betrachten wir drei Zeiten  $t_0 < t_1 < t_2$ . Dann folgt sofort:

$$\begin{aligned} |\psi t_2\rangle &= \hat{U}(t_2 t_0) |\psi t_0\rangle \\ &= \hat{U}(t_2 t_1) |\psi t_1\rangle \\ &= \hat{U}(t_2 t_1) \hat{U}(t_1 t_0) |\psi t_0\rangle \end{aligned}$$

Hieraus folgt:

$$\hat{U}(t_2 t_0) = \hat{U}(t_2 t_1) \hat{U}(t_1 t_0) \quad (4.10)$$

- Der Zeitentwicklungsoperator ist unitär. Es gilt also:

$$\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}.$$

Wir beweisen dies mit unsere Näherung für kleine Zeiten. Es gilt zunächst:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_0 + \epsilon, t_0) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon, , \\ \hat{U}^+(t_0 + \epsilon, t_0) &= \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon. \end{aligned}$$

Die zweite Formulierung gilt mit  $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ . Betrachten wir nun also das Produkt:

$$\begin{aligned} \hat{U} \hat{U}^\dagger &= \left( \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right) \left( \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right) \\ &= \hat{1} + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Für  $\epsilon \rightarrow 0$  wird dies exakt. Wegen der Gruppeneigenschaft können wir außerdem jeden Vorgang in eine endliche Zahl kleiner Zeitintervalle unterteilen (dabei kann  $\epsilon$  endlich gewählt werden, so lange es klein genug ist, dass die quadratischen Beiträge vernachlässigbar sind). Damit ist die Aussage bewiesen.

## 4.2 Dynamik der Operatoren. Schrödinger- und Heisenberg-Bild

**Schrödinger-Bild:** In der Interpretation nach Schrödinger, die wir bisher benutzt haben, sind die Zustände zeitabhängig.

$$|\psi t\rangle = \hat{U}(tt_0) |\psi t_0\rangle ,$$

die Operatoren,  $\hat{A}$ , sind dagegen zeitunabhängig<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>abgesehen von einer möglichen expliziten Zeitabhängigkeit, etwa bei einem zeit-veränderlichen elektromagnetischen Feld.

**Heisenberg-Bild:** Im Heisenberg-Bild sind die Zustände zeitlich konstant und die Operatoren ändern sich. Betrachten wir hierzu die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes eines beliebigen Operators:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle(t) &= \langle \psi t | \hat{A} | \psi t \rangle \\ &= \langle \psi t_0 | \underbrace{\hat{U}^\dagger(t t_0) \hat{A} \hat{U}(t t_0)}_{\hat{A}^H(t)} | \psi t_0 \rangle.\end{aligned}$$

Durch eine exakte Umformung haben wir den Erwartungswert so umgeschrieben, dass er mit den zeitunabhängigen Anfangszuständen berechnet wird. Die Zeitabhängigkeit enthält dafür die *Heisenberg-Operatorform* des Operators  $\hat{A}$ :

$$\hat{A}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t t_0) \hat{A}(t_0) \hat{U}(t t_0). \quad (4.11)$$

In beiden Bildern sind die Messgrößen invariant, also darstellungsunabhängig. Daher sind beide Darstellungen äquivalent. In Zukunft werden wir den Index  $H$  wieder weglassen, da die Zeitabhängigkeit klar macht, um was es sich handelt. Erinnern wir uns an die **Spektraldarstellung** des Operators  $\hat{A}$ :

$$\hat{A} = \sum_a a \cdot |a\rangle \langle a|$$

Wir betrachten nun den zeitabhängigen Operator im Heisenbergbild, bei dem die Zeitabhängigkeit auf zeitabhängige Eigenzustände führen muss:

$$\hat{A}(t) = \sum_a a \cdot \hat{U}(t t_0) \underbrace{[a t_0] \langle t_0 a]}_{\text{Basis fixiert}} \hat{U}^\dagger(t t_0) = \sum_a a \cdot \underbrace{[a t] \langle t a]}_{\text{Basis zeitabhängig}}$$

Folgendes Bild macht die zwei verschiedenen aber äquivalenten Sichtweisen deutlich. Im Schrödingerbild haben wir zum Beispiel eine fixierte Basis  $|a_1\rangle, |a_2\rangle$ . Im Zeitverlauf ändert sich der Zustand (im untenstehenden Bild durch eine Drehung angedeutet). Im Heisenbergbild „drehen“ sich hingegen die Basisvektoren.

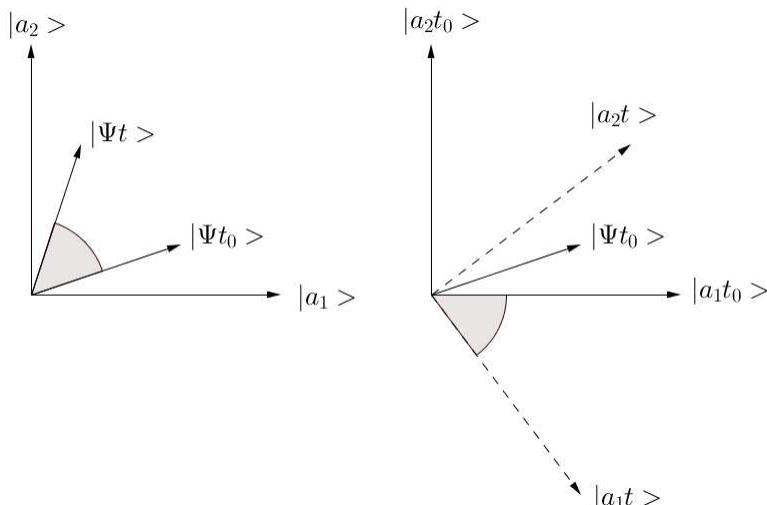


Abbildung 4.1: Veranschaulichung der Äquivalenz des Heisenberg- und des Schrödinger-Bildes.

## 4.3 Dynamik der Operatoren. Heisenberg-Gleichung

Nun versuchen wir die Bewegungsgleichung der zeitabhängigen Operatoren zu finden. Wir benutzen hierbei wieder:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{U}}(tt_0) &= \hat{H}\hat{U}(tt_0) \\ -i\hbar \dot{\hat{U}}^\dagger(tt_0) &= \hat{U}^\dagger(tt_0)\hat{H}. \end{aligned}$$

Der zeitabhängige Operator war:

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(tt_0) \underbrace{\hat{A}(t_0)}_{\hat{A}_0} \hat{U}(tt_0)$$

Dies differenzieren wir nun nach  $t$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \underbrace{i\hbar \dot{\hat{U}}^\dagger \hat{A}_0 \hat{U} + i\hbar \hat{U}^\dagger \hat{A}_0 \dot{\hat{U}}}_{= \hat{B}} + i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}$$

Betrachten wir nun  $\hat{B}$ :

$$\begin{aligned} \hat{B} &= -\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A}_0 \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_0 \hat{H} \hat{U} \\ &= -\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}_0 \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_0 \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \\ &= -\hat{H}(t) \cdot \hat{A}(t) + \hat{A}(t) \hat{H}(t) \\ &= [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \end{aligned}$$

Wir erhalten die Heisenberg-Gleichung zu:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \quad (4.12)$$

Die Heisenberg-Gleichung ist äquivalent zur Schrödinger-Gleichung. Wir wollen noch bemerken, dass die Form des Kommutators unabhängig von der gewählten Darstellung ist. Dies liegt an der Unitarität von  $\hat{U}$ :

$$\hat{B} = \hat{U}^\dagger [\hat{A}_0, \hat{H}] \hat{U} = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)]$$

## 4.4 Erhaltungsgrößen

**Definition:** Eine Observable  $\hat{A}$  ist eine Erhaltungsgröße, wenn im Heisenberg-Bild

$$\frac{d}{dt} \hat{A} = 0$$

gilt. Aus 4.12 folgt, dass  $\hat{A}$  genau dann eine Erhaltungsgröße ist, wenn  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$  und  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$  gilt. Eine Observable  $\hat{A}$  bleibt also erhalten, wenn sie und der Hamilton-Operator gemeinsame Eigenzustände haben:

$$\begin{aligned} \hat{H} |Ea\rangle &= E |Ea\rangle \\ \hat{A} |Ea\rangle &= a |Ea\rangle. \end{aligned}$$

Daraus ist auch klar, dass die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße ist (wie in der klassischen Mechanik), wie wir bereits vorher festgestellt hatten.

Abschließend soll noch darauf hingewiesen werden, dass neben dem Schrödinger- und Heisenberg-Bild noch andere Darstellungen der quantenmechanischen Dynamik existieren. Als Beispiel sei das Wechselwirkungs-(Dirac)-Bild genannt. Dabei wird ein Teil der Dynamik von den Zuständen getragen und ein anderer von den Operatoren. Durch eine geschickte Aufteilung lässt sich die Beschreibung oft deutlich vereinfachen. Das Wechselwirkungsbild spielt eine wichtige Rolle im Bereich der Streutheorie und der zeitabhängigen Störungstheorie und wird im Abschnitt 7.4.6 besprochen.