Ferienkurs Quantenmechanik
Sommersemester 2013

Daniel Rosenblüh und Florian Häse
Fakultät für Physik
Technische Universität München

9. September 2013

Grundlagen und Formalismus

In der Quantenmechanik werden Zustände mit Wellenfunktionen assoziiert die in *Hilberträumen* (in unserem Fall hauptsächlich $L^2(\mathbb{R})$ oder $L^2(\mathbb{R}^3)$) liegen. *Messgrößen* oder *Observablen* werden als Operatoren auf unserem Hilbertraum dargestellt. Was genau damit gemeint ist wird später erklärt. Die Mathematik die wir für den Formalismus benötigen wird hier nochmal dargsetellt.

1 Hilberträume

Zunächst einaml ein paar wichtige Definitionen

Definition 1 *Eine zweiwertige Verknüpfung* $\langle \cdot, \cdot \rangle$ *auf einem Vektorraum* V *heißt* inneres Produkt, *falls sie folgende Eigenschaften für alle* $\psi, \phi, \chi \in V$ *und* $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ *erfüllt*

1. *Konjugationssymmetrie*
$$\langle \psi, \phi \rangle^* = \langle \phi, \psi \rangle$$

2. *Linearität im zweiten Argument*
$$\langle \psi, c_1\phi + c_2\chi \rangle = c_1 \langle \psi, \phi \rangle + c_2 \langle \psi, \chi \rangle$$

3. *Positive Definitheit*
$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad \textit{und} \quad \langle \psi, \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$$

Aus der Linearität im zweiten Argument und der Konjugationssymmetrie folgt die *Antilinearität* in der ersten Komponente

$$\langle c_1\psi + c_2\phi, \chi\rangle = c_1^* \langle \psi, \chi\rangle + c_2^* \langle \phi, \chi\rangle \,.$$

Außerdem kann durch ein inneres Produkt eine *Norm* definiert werden.

Definition 2 *Ein vollständiger normierter Vektorraum auf dem die Norm durch ein inneres Produkt induziert wird (dh $\| \cdot \| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$), heißt* Hilbertraum.

Für uns interessant ist nun der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^n)$ für eine oder drei Dimensionen ($n = 1, 3$). Er besteht aus allen quadratintegrablen Funktionen, dh

$$L^2(\mathbb{R}^n) \equiv \left\{ \psi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{C}; \int d^n x |\psi(x)|^2 < \infty \right\}$$

Darauf ist ein Skalarprodukt durch

$$\langle \psi, \phi \rangle \equiv \int d^n x \, \psi^*(x) \phi(x)$$

definiert, dass die Norm

$$\| \psi \| \equiv \left(\int d^n x |\psi(x)|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

induziert.

L^2-Funktionen dienen uns zur Beschreibung von physikalischen Zuständen die entweder vom Ort oder dem Impuls abhÃ¤ngen. In der Ortsbasis bezeichnen wir die Wellenfunktion meistens mit $\psi(x)$, in der Impulsbasis $\phi(p)$.

Da wir später mit dem Betragsquadrat der Wellenfunktion die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens definieren wollen, betrachten wir oft normierte L^2-Funktionen. Dann ergibt das Betragsquadrat über den ganzen Raum integriert 1, das Teilchen muss sich also irgendwo im Raum befinden.

Außer dem unendlichdimensionalen L^2 spielen auch endlichdimensionale Räume eine Rolle. Sobald zum Beispiel der Spin betrachtet wird, für den es nur die zwei Zustände Spin-up und Spin-down gibt, benutzen wir zur Beschreibung den $\mathbb{C}^2$.

2 Operatoren

Ein allgemeiner Operator ist einfach eine Abbildung von einem Vektorraum in einen anderen Vektorraum. Für uns interessant sind vor allem lineare Operatoren. Ein Operator A heißt linear, falls

$$A(c_1\psi + c_2\phi) = c_1 A\psi + c_2 A\phi$$

Analog zu Matrizen auf endlichdimensionalen Räumen können lineare Operatoren untereinander multipliziert, addiert und mit Skalaren multipliziert werden und ergeben so wieder neue Operatoren.

$$\begin{aligned}(cA)\psi &= c(A\psi) \text{ für } c \in \mathbb{C}\\ (A+B)\psi &= A\psi + B\psi\\ (AB)\psi &= A(B\psi)\end{aligned}$$

Beispiel 1 *Eine große Rolle spielen Operatoren die*

- *eine Wellenfunktion mit einer Funktion $V(x)$ multiplizieren*

$$V : \psi(x) \longrightarrow V(x)\psi(x)$$

  Für $V(x) = x$ heißt dieser Operator auch einfach Ortsoperator x *(in der Ortsbasis)*

- *und Differentiationsoperatoren der Form*

$$-i\hbar\frac{d}{dx} : \psi(x) \longrightarrow -i\hbar\psi'(x).$$

  Dieser Differentiationsoperator wird als Impulsoperator $p_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$ *(in der Ortsbasis) bezeichnet*

2.1 Adjungierte und Hermitesche Operatoren

Natürlich können wir Wellenfunktionen die wir durch Anwenden eines Operators auf eine andere Funktion erhalten haben in unser Skalarprodukt stecken. Dafür sandwichen wir unseren Operator zwischen den Wellenfunktionen unter dem Integral. Im dreidimensionalen haben wir also

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \int d^3x \phi^*(x) A\psi(x)$$

Über das Skalarprodukt definieren wir den *adjungierten Operator* $A^\dagger$. Und zwar als der eindeutige Operator sodass für alle ϕ, ψ gilt:

$$\langle A^\dagger \phi, \psi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle$$

Für Vielfache, Produkte und Summen von Operatoren gelten beim Adjungieren folgende Regeln

$$\begin{aligned}(cA)^\dagger &= c^* A^\dagger \text{ für } c \in \mathbb{C}\\ (A+B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger\\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger\end{aligned}$$

Falls $A = A^\dagger$ gilt, dann heißt A *hermitesch*. Gilt $B^\dagger = -B$, so heißt B *antihermitesch*.

Satz 1 *In der Quantenmechanik tauchen hermitesche Operatoren in der Form von* Observablen *ständig auf. Der Grund dafür ist, dass hermitesche Operatoren genau diejenigen sind*

1. *die reelle Eigenwerte besitzen (das sind die Werte die wir messen)*
2. *deren Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind (wir wollen ja nicht das ein Zustand mit einem bestimmten Energieeigenwert Komponenten eines anderen Zustandes mit anderem Energieeignwert enthält)*

Antihermitesche Operatoren haben dagegegen rein imaginäre Eigenwerte.

Beispiel 2 *Der Impulsoperator ist ein hermitescher Operator, denn es gilt für alle* ψ, χ

$$\begin{aligned}\langle \psi, p_x \chi\rangle = \int dx\, \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\chi(x)\right) \underset{\textit{partielle Integration}}{=}\\ \underbrace{\Big[-i\hbar\psi^*(x)\chi(x)\Big]_{-\infty}^{\infty}}_{\textit{verschw. im Unendlichen}} + \int dx \left(i\hbar\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right)\chi(x) =\\ \int dx \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)\right)^* \chi(x) = \langle p_x\psi, \chi\rangle\end{aligned}$$

Er besitzt also reelle Eigenwerte und seine Eigenfunktionen sind orthogonal.

2.2 Kommutator

Der *Kommutator* von zwei Operatoren ist definiert als

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

und bildet wieder einen Operator. Er misst quasi wie gut A und B kommutieren.

Für den Kommutator gelten folgende Eigenschaften

1. Antisymmetrie
$$[A, B] = -[B, A]$$
2. Linearität
$$[A, c_1 B + c_2 C] = c_1[A, B] + c_2[A, C] \quad \text{für } c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$
3. Jacobi-Identität
$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$
4. Produktregel
$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

Satz 2 *Verschwindet der Kommutator von zwei Observablen existiert eine Basis aus simultanen Eigenzuständen von beiden Observablen! (Übung)*

Generell verschwindet der Kommutator aber nicht:

Beispiel 3 *Der Kommutator von dem Ortsoperator der x_i-Koordinate (dh Multiplikation mit x_i, also $\psi(x) \longrightarrow x_i\psi(x)$) und dem Impulsoperator $p_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$ lautet*

$$\begin{aligned}
[x_i, p_j] &= \left[x_i, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\right] = -i\hbar\, x_i\frac{\partial}{\partial x_j} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\underbrace{x_i}_{Prod.} \\
&= -i\hbar\, x_i\frac{\partial}{\partial x_j} + i\hbar\left(x_i\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}x_i\right) = i\hbar\delta_{ij}
\end{aligned}$$

Dies ist als kanonische Vertauschungsrelation *bekannt.*

Außer dem Kommutator definieren wir uns noch den *Antikommutator*

$$\{A, B\} \equiv AB + BA.$$

Stecken wir nun einmal zwei hermitesche Operatoren in den Kommutator. Wir stellen fest das der resultierende Operator antihermitesch ist, da

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = -[A, B]$$

Der Antikommutator von A und B ist dagegen wieder hermitesch.

3 Erwartungswerte

Wir definieren den *Erwartungswert* eines Operators A auf dem $L^2(\mathbb{R}^n)$ als

$$\langle A \rangle \equiv \int d^n x\, \psi^*(x, t) A \psi(x, t).$$

Der Erwartungswert hängt offenbar von dem physikalischen Zustand (hier beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ im Ortsraum) in dem sich unser System befindet. Manchmal schreibt man deswegen auch $\langle A \rangle_\psi$.

Der Erwartungswert ist linear

$$\langle c_1 A + c_2 B \rangle = c_1 \langle A \rangle + c_2 \langle B \rangle$$

Falls wir $\langle A \rangle$ und $\langle A^2 \rangle$ kennen, definieren wir die Varianz $(\Delta A)^2$ von A als erwartete quadratische Abweichung vom Erwartungswert:

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \underset{Linearität}{=} \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$\Delta A = \sqrt{(\Delta A)^2} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ heißt *Unschärfe* oder *Standardabweichung* von A.

Beispiel 4 *Angenommen wir haben ein Teilchen auf einer Linie dessen Zustand durch ein* Gauss'sches Wellenpaket

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \exp\left(ikx - \frac{x^2}{2d^2}\right)$$

beschrieben wird (dies ist eine ebene Welle die mit einem Gauss moduliert wird). Dann ist der Erwartungswert des Ortsoperators x - also der erwartete Ort des Teilchens

$$\langle x \rangle = \int dx\, \psi^*(x) x \psi(x) = \int dx\, x |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \int dx\, x \exp\left(-\frac{x^2}{d^2}\right) \underset{Symmetrie}{=} 0.$$

Für x^2 erhalten wir

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \int dx\, x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{d^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \int dx \left[-\frac{\partial}{\partial\alpha} \exp\left(-\alpha x^2\right)\right]_{\alpha=\frac{1}{d^2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \left[-\frac{\partial}{\partial\alpha} \int dx\, \exp\left(-\alpha x^2\right)\right]_{\alpha=\frac{1}{d^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \left[-\frac{\partial}{\partial\alpha} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}\right]_{\alpha=\frac{1}{d^2}} = \frac{1}{2d} \left[\frac{1}{\sqrt{\alpha}^3}\right]_{\alpha=\frac{1}{d^2}} = \frac{d^2}{2}$$

Der Erwartungswert des Impulsoperators $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ lautet

$$\langle p \rangle = \int dx\, \psi^*(x) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) \underset{Übung}{=} \hbar k$$

und für p^2 erhalten wir

$$\langle p^2 \rangle \underset{Übung}{=} \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

Damit können wir das Produkt der Unschärfen für Ort und Impuls für ein Gauss'sches Wellenpaket berechnen:

$$\Delta p \Delta x = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2d^2}}\sqrt{\frac{d^2}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

4 Dirac-Notation

Ein physikalischer Zustand - zum Beispiel ein Elektron mit einer bestimmten Spin-Richtung, ein Teilchen im dreidimensionalen Raum oder ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator mit einer bestimmten Energie - kann durch einen abstrakten Zustandsvektor in einem Hilbertraum dargestellt werden. Wie Dirac bezeichnen wir so einen Vektor als *Ket*, geschrieben $|\alpha\rangle$. Dieser Ket enthält alle Informationen zu dem physikalischen Zustand. Da wir in einem Vektorraum sind können Kets auch addiert und mit Skalaren multipliziert werden.

Zu jedem Ket $|\alpha\rangle$ können wir den dualen *Bra*, $\langle\alpha|$ bilden. Dabei ist gegebenenfalls auf eine komplexe Konjugation zu achten:

$$c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle \leftrightarrow c_1^* \langle\alpha| + c_2^* \langle\beta|$$

Zusammen bilden ein Bra $\langle\alpha|$ und ein Ket $|\beta\rangle$ ein Braket $\langle\alpha|\beta\rangle$, ein inneres Produkt auf unserem komplexen Hilbertraum.

Der Vorteil der Dirac-Notation liegt darin, dass die Kets unabhängig von der Basis formuliert sind. Um in eine bestimmte Darstellung (zB Orts- oder Impulsbasis) zu wechseln, bilden wir das Produkt mit dem entsprechenden Bra. Dann erhalten wir genau unsere Wellenfunktion im Orts- bzw Impulsraum:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') \quad \text{und} \quad \langle p'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p')$$

Auf die Kets können auch Operatoren wirken und neue Kets bilden. Wirkt X auf den Ket $|\beta\rangle$ dann gilt fu"r den dualen Bra

$$X |\beta\rangle \leftrightarrow \langle\beta| X^\dagger$$

Der Erwartungswert einer Observablen A im Zustand $|\alpha\rangle$ wird in der Dirac-Notation als Sandwich von A zwischen $|\alpha\rangle$ und den dualen Bra $\langle\alpha|$ ausgedrückt:

$$\langle A\rangle \equiv \langle\alpha|A|\alpha\rangle$$

Außer dem inneren Produkt können ein Bra $\langle\alpha|$ und ein Ket $|\beta\rangle$ auch ein *äußeres Produkt* $|\beta\rangle\langle\alpha|$ bilden. Das ist ein Operator der einen dritten Ket $|\gamma\rangle$ in die Richtung von $|\beta\rangle$ projeziert, und zwar mit einem Faktor $\langle\alpha|\gamma\rangle$.

Diese Projektion spielt vor allem dann eine Rolle wenn wir eine Basis von unserem Hilbertraum kennen. Dann läßt sich nämlich der Identitätsoperator als Summe (im abzählbaren Fall) oder Integral (im überabzählbaren Fall) von Projektionen schreiben.

Beispiel 5

- *Für den abzählbaren Fall nehmen wir ein beliebiges Orthonormalsystem, zum Beispiel das des harmonischen Oszillators* $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, ...\}$*. Es gilt also* $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$*. Befindet sich der Oszillator im Zustand* $|\alpha\rangle$ *können wir diesen in der Orthonormalbasis entwickeln und erhalten*

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\alpha\rangle}_{c_n}.$$

Da dies für jeden Zustand $|\alpha\rangle$ *gilt können wir den Identitätsoperator schreiben als*

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n|$$

- *Für den überabzählbaren Fall nehmen wir beispielsweise die kontinuierliche Ortsbasis* $\{|x'\rangle ; x' \in \mathbb{R}\}$*. Dies sind gerade die Eigenzustände des Ortsoperators,dh* $x|x'\rangle = x'|x'\rangle$*. Befindet sich ein Teilchen auf einer Linie im Zustand* $|\beta\rangle$ *drücken wir das in der Ortsbasis aus als:*

$$|\beta\rangle = \int dx'\ |x'\rangle \psi_\beta(x') = \int dx'\ |x'\rangle \langle x'|\beta\rangle .$$

Da dies wieder für jeden Zustand gilt, können wir den Identitätsoperator schreiben als

$$1 = \int dx'\ |x'\rangle \langle x'|$$

Statt der kontinuierlchen Ortsbasis hätten wir auch die Impulsbasis (also die Eigenzustände des Impulsoperators) nehmen können. Dann hätten wir herausgefunden dass

$$1 = \int dp'\ |p'\rangle \langle p'|$$

5 Ort und Impuls

Wir wollen den Dirac-Formalismus noch dazu benutzen um herauszufinden wie eine Wellenfunktion $\phi_\alpha(p')$ die einen Zustand $|\alpha\rangle$ in dem Impulsraum beschreibt, im Ortsraum aussieht. Dafür schieben wir einfach geschickt einen Identitätsoperator ein:

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle = \langle x'|1|\alpha\rangle = \int dp'\ \langle x'|p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle = \int dp'\ \langle x'|p'\rangle \phi_\alpha(p').$$

Wir müssen also wissen wie $\langle x'|p'\rangle$ aussieht. Das ist eine Eigenfunktion des Impulsoperators $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ im Ortsraum. Wir haben also die Differentialgleichung

$$-i\hbar\frac{d}{dx'} \langle x'|p'\rangle = p' \langle x'|p'\rangle$$

Die Lösung lautet (mit richtiger Normierung)

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)$$

und ist eine *ebene Welle*. Einsetzen liefert uns dann

$$\psi_\alpha(x') = \int dp' \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p')$$

Wir kommen also durch eine *Fouriertransformation* von einer Wellenfunktion im Impulsraum zu einer Wellenfunktion im Ortsraum.

Analog kommen wir durch eine Fouriertrafo (diesmal mit einem Minus) von einer Wellenfunktion im Ortsraum zu einer Wellenfunktion im Impulsraum:

$$\phi_\alpha(p') = \int dx' \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(x').$$

Das lässt sich auf drei Dimensionen verallgemeinern:

Satz 3 *Haben wir eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ im Ortsraum gegeben, dann lautet die Wellenfunktion im Impulsraum:*

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int d^3x \exp\left(-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right) \psi(\vec{x})$$

Andersrum haben wir

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int d^3p \exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right) \phi(\vec{p})$$

6 Quantenmechanische Messung

Jetzt wollen wir uns einmal anschauen was bei einer Messung genau passiert. Der Einfachkeit halber beschränken wir uns auf den diskreten Fall. Dazu bezeichnen wir die Eigenwerte einer Observablen A mit $a_1, a_2, a_3, ...$ Die zugehörigen normalisierten Eigenvektoren werden $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, ...$ genannt. Wir haben also

$$A\,|n\rangle = a_n\,|n\rangle \quad \text{und} \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}.$$

Jeder Zustand $|\alpha\rangle$ kann in dieser Orthonormalbasis ausgedrückt werden

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\alpha\rangle}_{c_n}.$$

Quantenmechanik postuliert nun, dass im Moment der Messung das System in einen der Eigenzustände kollabiert.

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |n\rangle$$

Als Messwert erhalten wir in dem Moment den zugehörigen Eigenwert a_n. Die Wahrscheinlichkeit in welchen der Eigenzustände das System kollabiert wird über den Koeffizienten $c_n = \langle n|\alpha\rangle$ gegeben. Und zwar ist für normalisierte $|\alpha\rangle$

$$\text{Wahrscheinlichkeit für } a_n = |\,\langle n|\alpha\rangle\,|^2$$

Summieren wir über alle a_n erhalten wir

$$\sum_n |\,\langle n|\alpha\rangle\,|^2 = \sum_n \langle\alpha|n\rangle\,\langle n|\alpha\rangle = \langle\alpha|\underbrace{\left[\sum_n |n\rangle\,\langle n|\right]}_{=1}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle \underset{|\alpha\rangle normalisiert}{=} 1$$

wie es sich für Wahrscheinlichkeiten gehört.

Den Erwartungswert einer Observablen entspricht unserer Vorstellung für einen durchschnittlichen Messwert, da

$$\langle A\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle = \sum_n\sum_m \langle\alpha|m\rangle\,\langle m|A|n\rangle\,\langle n|\alpha\rangle = \sum_n a_n|\,\langle n|\alpha\rangle\,|^2.$$

7 Unschärferelation

Dass wir in der Quantenmechanik Messgrößen *prinzipiell* nicht immer so genau bestimmen können wie wir es gerne hätten wird durch die Heisenberg'sche Unschärferelation ausgedrückt. Sie lautet in der allgemeinen Form

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\,\langle[A,B]\rangle\,|$$

Gilt für zwei Observablen also $\langle[A,B]\rangle \neq 0$, dann ist das Produkt der Unschärfen von beiden immer größer als Null. Sie können also nie gleichzeitig exakt bestimmt werden.

7.1 Beweis der Unschärferelation

Für den Beweis der Unschärferelation benötigen wir die Cauchy-Schwarz Ungleichung

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\,\langle\beta|\beta\rangle \geq |\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2$$

die aus der linearen Algebra bekannt ist.

Zunächst definieren wir uns die Operatoren $\delta A \equiv A - \langle A\rangle$, $\delta B \equiv B - \langle B\rangle$. Diese sind hermitesch, da A und B als Observablen hermitesch waren und die reellen Zahlen $\langle A\rangle$ und $\langle B\rangle$ ebenfalls hermitesch sind.

Unser System sei im beliebigen Zustand $|\gamma\rangle$. Durch Anwenden der Cauchy-Schwarz Ungleichung auf

$$|\alpha\rangle = \delta A\,|\gamma\rangle \quad \text{also} \quad \langle\alpha| = \langle\gamma|\,\delta A^\dagger = \langle\gamma|\,\delta A$$

$$|\beta\rangle = \delta B\,|\gamma\rangle \quad \text{also} \quad \langle\beta| = \langle\gamma|\,\delta B^\dagger = \langle\gamma|\,\delta B$$

erhalten wir

$$\langle(\delta A)^2\rangle\,\langle(\delta B)^2\rangle \geq |\,\langle\delta A\delta B\rangle\,|^2$$

Die Erwartungswerte gelten bezüglich dem Zustand $|\gamma\rangle$. Um die rechte Seite auszuwerten schreiben wir

$$\delta A\delta B = \frac{1}{2}[\delta A, \delta B] + \frac{1}{2}\{\delta A, \delta B\}.$$

Für den Kommutator gilt

$$[\delta A, \delta B] = [A - \langle A\rangle\,, B - \langle B\rangle] = [A, B] - \underbrace{[A, \langle B\rangle]}_{=0} - \underbrace{[\langle A\rangle\,, B]}_{=0} + \underbrace{[\langle A\rangle\,, \langle B\rangle]}_{=0} = [A, B]$$

Für den Erwartungswert auf der rechten Seite erhalten wir also

$$\langle\delta A\delta B\rangle = \frac{1}{2}\underbrace{\langle[A, B]\rangle}_{\textit{rein imaginär}} + \frac{1}{2}\underbrace{\langle\{\delta A, \delta B\}\rangle}_{\textit{reell}}.$$

Der erste Erwartungswert ist rein imaginär da der Kommutator von hermiteschen Operatoren antihermitesch ist, der zweite reell da der Antikommutator wieder hermitesch ist. Für das Betragsquadrat gilt demnach

$$|\,\langle\delta A\delta B\rangle\,|^2 = \frac{1}{4}|\,\langle[A, B]\rangle\,|^2 + \frac{1}{4}|\,\langle\{\delta A, \delta B\}\rangle\,|^2.$$

Wird der rechte Term in der Ungleichung weggelassen und beachten wir, dass

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \langle(A - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle A^2 - A\,\langle A\rangle - \langle A\rangle\,A + \langle A\rangle^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = (\Delta A)^2$$

erhalten wir die Unschärferelation

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \langle(\delta A)^2\rangle\,\langle(\delta B)^2\rangle \geq |\,\langle\delta A\delta B\rangle\,|^2 = \frac{1}{4}|\,\langle[A, B]\rangle\,|^2 + \frac{1}{4}|\,\langle\{\delta A, \delta B\}\rangle\,|^2 \geq \frac{1}{4}|\,\langle[A, B]\rangle\,|^2.$$