

Kursvorlesung PTP4
Theoretische Quantenmechanik

gehalten im Sommersemester 2011

Timo Weigand



Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg

Digitalisierung der handschriftlichen Vorlesungsnotizen: David Breyel

Korrekturen und Verbesserungsvorschläge senden Sie bitte an D.Breyel@thphys.uni-heidelberg.de

Inhaltsverzeichnis

Literatur	1
1 Grundlagen der QM	2
1.1 Einstimmung	2
1.2 Polarisierung des Lichts	3
1.2.1 Klassische versus quantenmechanische Beschreibung des Lichts	3
1.2.2 Einfache Polarisierungsexperimente	4
1.3 Zustand und Vektorraum	6
1.4 Skalarprodukt, Norm, Dualer Vektorraum	9
1.5 Lineare Operatoren & Observablen	11
1.5.1 Die Algebra der Linearen Operatoren	12
1.5.2 Adjungierter Operator und Hermitizität	14
1.6 Messungen & Projektion	16
1.7 Kompatible & inkompatible Observablen	19
1.8 Erwartungswert, Varianz, Unschärfe	20
1.9 Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion	23
1.9.1 Unendlich-dimensionale Zustandsräume	23
1.9.2 Der quantenmechanische Ortsraum	24
1.9.3 Der Begriff der Wellenfunktion	25
1.10 Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen	26
1.10.1 Aktive Translationen	26
1.10.2 Translationen als Lie-Gruppe	27
1.10.3 Der Impuls als Generator der Translationen	28
1.10.4 Kanonische Kommutatorrelationen und Kanonische Quantisierung	29
1.10.5 Darstellung von \hat{p} im Ortsraum	30
1.11 Wellenfunktionen im Impulsraum	31
1.11.1 Wellenfunktion der Impulseigenzustände	31
1.11.2 Zusammenhang von $\psi_\alpha(x) \leftrightarrow \phi_\alpha(p)$ für beliebiges $ \alpha\rangle$	32
1.11.3 Beispiel: Gauß'sche Wellenfunktion	33
2 Quantendynamik	35
2.1 Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung	35
2.2 Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator	39
2.3 Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung	43
2.4 Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild	45
2.4.1 Heisenbergbild und Bewegungsgleichung für Operatoren	45
2.4.2 Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem	47

2.4.3	Basis-Kets im Heisenberg-Bild	49
2.5	Der einfache harmonische Oszillator	50
2.5.1	Lösung im Operatorbild	51
2.5.2	Darstellung im Ortsraum	54
2.5.3	Lösung des Oszillators im Ortsraum	56
2.5.4	Kohärente Zustände	58
3	Drehimpuls und Spin	60
3.1	Rotationen in \mathbb{R}^3 : Lie-Gruppe und Lie-Algebra	60
3.1.1	Von $SO(3)$ zur Lie-Gruppe	60
3.1.2	Von der Lie-Gruppe zur Lie-Algebra	62
3.2	Vom Konzept der Darstellung zum Drehimpuls-Operator	64
3.3	Eigenwerte und Eigenzustände des Drehimpulses	66
3.4	Bahndrehimpuls & Kugelflächenfunktionen	70
3.5	Anwendung: Zentralpotential & Coulombpotential	72
3.5.1	Allgemeines zum Zentralpotential	72
3.5.2	Das Coulombpotential	75
3.6	Spin	78
3.6.1	Phänomenologie des Spins	78
3.6.2	Ontologie des Spins	79
3.6.3	Rechnen mit Tensorprodukten für Spin-1/2-Felder	83
3.6.4	$SO(3)$ versus $SU(2)$	83
3.7	Addition von Drehimpulsen	85
4	Weiterführende Fragen und Anwendungen	90
4.1	Kopplung an das elektromagnetische Feld	90
4.1.1	Schrödingergleichung, Pauli-Gleichung	90
4.1.2	Eichprinzip und kovariante Ableitung	92
4.2	Stationäre Störungstheorie	96
4.2.1	Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (nicht entartet)	96
4.2.2	Entartete Störungstheorie	98
4.2.3	Ritzsches Variationsverfahren	100
4.3	Relativistische Korrekturen beim Wasserstoffatom - Feinstruktur	100
4.4	Zeitabhängige Störungstheorie	102
4.4.1	Wechselwirkungsbild	102
4.4.2	Übergänge erster Ordnung und Goldene Regel	104
4.5	Mess- und Interpretationsproblem	106
4.5.1	Dichtematrix, reiner und gemischter Zustand	106
4.5.2	Dichtematrix gekoppelter Systeme	109
4.5.3	Das Messproblem und einige Lösungsansätze	111
4.6	Pfadintegralformulierung und Streutheorie	115

Literatur

Bei diesem Vorlesungsskript handelt es sich um eine Zusammenfassung meiner Aufzeichnungen im Rahmen der Kursvorlesung PTP4, Theoretische Quantenmechanik, gehalten im Sommersemester 2011 an der Universität Heidelberg. Der hier dargestellte Stoff wurde in 24 Vorlesungen zu je 90 Minuten durchgenommen. Das Vorlesungsskript erhebt nicht den Anspruch einer literarischen Anforderungen genügenden, originären geschweige denn umfassenden Darstellung der Quantenmechanik, sondern soll knapp die wesentlichen Inhalte der Vorlesung zusammenfassen.

Beim Erstellen der Vorlesung habe ich mich folgender Quellen bedient, ohne dies im Skript im einzelnen kenntlich zu machen:

- P.A.M. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics, Oxford Science Publications 1967
- J. J. Sakurai: Modern Quantum Mechanics, Benjamin Cummings 1985
- F. Schwabl: Quantenmechanik, Springer 2005
- R. Fitzpatrick: Quantum Mechanics (<http://farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/389.pdf>)

Empfohlene Literatur zum Studium der Quantenmechanik umfasst darüberhinaus beispielsweise

- R. Shankar: Principles of Quantum Mechanics, Springer, 1994
- A. Messiah: Quantenmechanik 1, 2, De Gruyter 1991
- M Kreuzer: Quantum Theory (<http://hep.itp.tuwien.ac.at/kreuzer/QT.html>)

sowie weitere, im Verlauf des Skripts im einzelnen genannte Quellen.

An dieser Stelle gilt mein Dank David Breyel, der das Gerüst dieses Skripts geteXt hat, sowie den Obertutoren Christoph Mayrhofer und Oliver Lauscher und den Hörern der Vorlesung für wertvolle Kommentare und Anmerkungen.

Kapitel 1

Kinematische & mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

1.1 Einstimmung

Die **klassische Mechanik** liefert eine *deterministische* Beschreibung der „makroskopischen“ Physik. Ihr liegt das Konzept der Punktteilchentrajektorie zu Grunde. Ausgehend von einer genauen Kenntnis der Anfangsbedingungen - d.h. der verallgemeinerten Koordinaten $(\vec{q}, \vec{p})|_{t=t_0}$ - erlaubt sie eine vollständige Beschreibung der Trajektorie zu allen Zeiten unter Einfluss einer Kraft.

Die Beschreibung der „mikroskopischen“ Physik (als solche bezeichnen wir die Physik auf (sub-)atomaren Skalen) erfordert *fundamental neue Konzepte* - die der **Quantenmechanik**.

Für die Notwendigkeit einer neuen Theorie sprechen

- experimentelle Fakten, insbesondere¹
 - die Stabilität des Wasserstoffatoms: Die klassische Trajektorie im Newton'schen Sinne des Elektrons um den Atomkern würde kontinuierliche Abstrahlung erzwingen, im Widerspruch zur Beobachtung.
 - der Welle-Teilchen-Dualismus: Zum einen suggeriert der Photoeffekt den *korpuskularen* Charakter des Lichts (Hertz 1887, Einstein 1905; siehe auch Comptonstreuung 1925). Zum anderen kann die Beugung von Licht am Gitter nur durch den Wellencharakter des Lichts erklärt werden. Umgekehrt verhält sich Materie (z.B. Elektronen) in bestimmten Situation, etwa beim Durchgang durch ein Gitter, wie eine Welle (de Broglie 1923).
- theoretisch-philosophische Überlegungen (nach Dirac, Chapter 1):

¹Eine konzise Übersicht über einige der wichtigsten Experimente findet sich beispielsweise in Schwabl, Kapitel 1.1.

- „Makro“ und „Makro“ können nicht nur relative Konzepte sein. Wäre dies der Fall, so käme die Erklärung des „Großen“ durch das „Kleine“ nie zum Ende. Daraus folgt unmittelbar, dass die Größe eines Systems eine absolute Bedeutung haben muss.
- Physik gibt (in erster Linie? nur? insbesondere?) Auskunft über Resultate von Messungen. Ein System ist „groß“ im absoluten Sinne wenn die Messung seines Zustands diesen kaum beeinflusst. Für kleine Systeme gibt eine *prinzipielle, maximale Auflösung* der Messung. Diese muss von einer Naturkonstanten charakterisiert sein. Es stellt sich heraus, dass die Konstante das *Planck'sche Wirkungsquantum*

$$h = 6.67 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.1)$$

ist.

- Für „kleine“ Systeme ist zu erwarten, dass diese sich nur dann deterministisch verhalten, wenn sie sich selbst überlassen sind. Die unvermeidbare Störung bei einer Beobachtung/ „Messung“ führt zu *nicht-deterministischen* Elementen.

1.2 Polarisation des Lichts

Als Beispiel für das fundamental Neue an der quantenmechanischen Beschreibung betrachten wir die Theorie des Lichts. Anhand einfacher Polarisationsexperimente werden wir heuristisch-induktiv die wesentlichen Grundzüge der neuen Theorie kennenlernen. Unsere Vorgehensweise wird vom Versuch geleitet sein, die Resultate dieser Experimente mit dem angesprochenen Teilchencharakter des Lichts in Einklang zu bringen. Dies führt uns unweigerlich zu den Begriffen des Zustands, der Superposition, sowie einer probabilistischen Interpretation der Theorie. Diese Eigenschaften werden wir daraufhin in mathematische Form gießen und zu allgemeinen Postulaten erheben.

1.2.1 Klassische versus quantenmechanische Beschreibung des Lichts

Im **klassischen Bild** stellt Licht eine transversale, elektromagnetische Welle dar. Betrachten wir eine transversale Lichtwelle in z -Richtung:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_x(\vec{r}, t)\vec{e}_x + E_y(\vec{r}, t)\vec{e}_y = \begin{pmatrix} E_x(\vec{r}, t) \\ E_y(\vec{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

$$E_z = 0, \quad (1.3)$$

$$E_x(\vec{r}, t) = \text{Re}(E_x e^{i(kz - \omega t)}), \quad \text{wobei} \quad (1.4)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu \quad \text{und} \quad E_x = |E_x| e^{i\alpha_x}, \quad \text{sowie} \quad (1.5)$$

$$\vec{B} = \vec{e}_z \times \vec{E}. \quad (1.6)$$

Hierbei stellt α_x eine Phase dar. Die Energiedichte der Welle berechnet sich zu

$$\epsilon(\vec{r}, t) = \frac{1}{8\pi} (|\vec{E}|^2 + |\vec{B}|^2)(\vec{r}, t). \quad (1.7)$$

Die Polarisation dieser Welle ist nun über das Verhältnis von E_x und E_y definiert, z.B.

- $E_y = 0 \Leftrightarrow$ lineare Polarisierung in x -Richtung,

- $E_y = E_x \Leftrightarrow$ lineare Polarisierung in 45° -Richtung,
- $E_y = iE_x \Leftrightarrow$ rechts-zirkulare Polarisierung (Phasendifferenz $\frac{\pi}{2}$ für E_x und E_y).

Quantenmechanisch verhält sich Licht in bestimmten Situationen, als bestünde es aus Teilchen (= Photonen).

- Als *Photon* bezeichnet man das *minimale Energiequant*, welches das Licht transportiert. Für Licht der Frequenz ν ist die Energie eines Photons

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \text{wobei} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.8)$$

- Photonen haben *korpuskularen* (=Teilchen-)Charakter. Sie sind *unzerteilbar*, d.h. sie stellen jene im Argument von Dirac in Kapitel 1.1 beschriebene *kleinste Einheit* des Lichts (im absoluten Sinne) dar.
- Der Teilchencharakter wird experimentell manifest bei kleinsten Intensitäten: Der Detektor registriert einzelne, diskrete Klicks bei Absorption *einzelner Photonen*. Insbesondere gilt der Zusammenhang

$$\text{Lichtintensität } I \propto \text{Anzahl der Photonen}. \quad (1.9)$$

1.2.2 Einfache Polarisierungsexperimente

Experiment 1

Betrachte den Durchgang einer Lichtwelle mit allgemeiner Polarisation (E_x, E_y) durch einen Polarisationsfilter, der nur transversal in x -Richtung polarisiertes Licht durchlässt.

Klassisches Bild

Nach Durchgang durch den Polarisator ist die Welle transversal polarisiert in x -Richtung. Das Verhältnis der Intensitäten ergibt sich als

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{|\vec{E}_{\text{out}}|^2}{|\vec{E}_{\text{in}}|^2} = \frac{|\vec{E}_x|^2}{|\vec{E}_x|^2 + |\vec{E}_y|^2}. \quad (1.10)$$

Quantenmechanisches Bild

Der Polarisationsfilter lässt nur einzelne Photonen als Ganzes durch. Ein Photon kann also entweder den Polarisator als Ganzes passieren, oder es wird als Ganzes absorbiert. Das Verhältnis der Intensitäten muss interpretiert werden als

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{\# \text{ der auslaufenden Photonen}}{\# \text{ der einlaufenden Photonen}} = \frac{|\vec{E}_x|^2}{|\vec{E}_x|^2 + |\vec{E}_y|^2} =: P_x \quad (1.11)$$

P_x ist zunächst eine relative Häufigkeit für das Ensemble von Photonen. Da nur einzelne Photonen als Ganzes durchgelassen werden können, sind wir gezwungen, P_x zu interpretieren als die *Wahrscheinlichkeit*, dass ein Photon der Lichtwelle mit Polarisation (E_x, E_y) den x -Polarisator

passiert. Diese probabilistische Interpretation ist die unmittelbare Konsequenz aus der Notwendigkeit, die Zerlegung einer Lichtwelle in x- und y-polarisierte Anteile mit dem Teilchencharakter des Lichts zu vereinbaren.

Einem einzelnen Photon ordnen wir den *Zustandsvektor* \vec{E}^N , wobei N für normiert steht, zu:

$$\vec{E}_{\text{in}}^N = \frac{E_x}{\sqrt{|\vec{E}_x|^2 + |\vec{E}_y|^2}} \vec{e}_x + \frac{E_y}{\sqrt{|\vec{E}_x|^2 + |\vec{E}_y|^2}} \vec{e}_y, \quad (1.12)$$

$$\vec{E}_{\text{in}}^N = A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y, \quad A_x, A_y \in \mathbb{C}, \quad |A_x|^2 + |A_y|^2 = 1. \quad (1.13)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das einzelne Photon durch den x-Polarisator gelassen wird, ist gegeben als

$$P_x = |A_x|^2. \quad (1.14)$$

Falls das Photon durch den Polarisator durchgelassen wird, ist es danach x -polarisiert. Dem auslaufenden, x -polarisierten Photon ordnen wir den Vektor

$$\vec{E}_{\text{out}}^N = \frac{E_x}{\sqrt{|E_x|^2}} \vec{e}_x \quad \text{zu.} \quad (1.15)$$

Hier sehen wir bereits ein allgemeine Eigenschaft von Messungen: Abgesehen von der Normierung ändert sich der Zustandsvektor durch die Messung von

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=:\hat{P}_x} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

$\begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix}$ ist die Projektion des Vektors $\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$ auf die Richtung \vec{e}_x . \hat{P}_x ist der entsprechende *Projektionsoperator* mit der Eigenschaft $\hat{P}_x^2 = \hat{P}_x$.

Experiment 2

In diesem Experiment folgt auf den uns bereits bekannten x -Polarisator ein x' -Polarisator. Dabei sei (x', y') gegenüber (x, y) um einen Winkel ϕ gedreht. Wir zerlegen die $(\vec{e}_{x'}, \vec{e}_{y'})$ -Basis bezüglich der (\vec{e}_x, \vec{e}_y) -Basis als

$$\vec{e}_{x'} = \cos(\phi) \vec{e}_x + \sin(\phi) \vec{e}_y \quad \leftrightarrow \quad \vec{e}_x = \cos(\phi) \vec{e}_{x'} - \sin(\phi) \vec{e}_{y'} \quad (1.17)$$

$$\vec{e}_{y'} = -\sin(\phi) \vec{e}_x + \cos(\phi) \vec{e}_y \quad \leftrightarrow \quad \vec{e}_y = \sin(\phi) \vec{e}_{x'} + \cos(\phi) \vec{e}_{y'}. \quad (1.18)$$

Beachte dabei, dass $\cos(\phi) = \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'}$ und $-\sin(\phi) = \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{y'}$ aus den *Skalarprodukten* der Einheitsvektoren hervorgehen.

Klassisches Bild

Im Wellenbild können wir deshalb schreiben

$$\vec{E}_1 = E_x \vec{e}_x = E_x \underbrace{(\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'})}_{\cos(\phi)} \vec{e}_{x'} + E_x \underbrace{(\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{y'})}_{-\sin(\phi)} \vec{e}_{y'}, \quad (1.19)$$

$$\vec{E}_2 = E_x \cos(\phi) \vec{e}_{x'}. \quad (1.20)$$

Damit ergibt sich für das Verhältnis der Intensitäten

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{|E_2|^2}{|E_1|^2} = \cos^2(\phi) = |\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'}|^2. \quad (1.21)$$

Quantenmechanisches Bild

Nach Durchgang durch den x -Polarisator ordnen wir dem Photon den normierten Zustandsvektor

$$\vec{E}_1^N = \frac{E_x}{\underbrace{\sqrt{|E_x|^2}}_{A_x}} \vec{e}_x \quad (1.22)$$

zu. Dieser kann bezüglich der $(\vec{e}_{x'}, \vec{e}_{y'})$ -Basis zerlegt werden:

$$\vec{E}_1^N = A_{x'} \vec{e}_{x'} + A_{y'} \vec{e}_{y'}, \quad (1.23)$$

wobei die jeweiligen Größen gegeben sind durch

$$A_{x'} = \vec{E}_1^N \cdot \vec{e}_{x'} \quad \text{und} \quad A_{y'} = \vec{E}_1^N \cdot \vec{e}_{y'} \quad \text{mit} \quad |A_{x'}|^2 + |A_{y'}|^2 = 1. \quad (1.24)$$

Das Photon kann insofern aufgefasst werden als in der *Superposition* von $A_{x'} \vec{e}_{x'}$ und $A_{y'} \vec{e}_{y'}$. Umgekehrt: $A_{x'} \vec{e}_{x'}$ und $A_{y'} \vec{e}_{y'}$ können addiert werden - wie für Vektoren üblich.

Die Aussage, dass sich das Photon in der Superposition von $A_{x'} \vec{e}_{x'}$ und $A_{y'} \vec{e}_{y'}$ befindet, ist so zu deuten, dass sich das Photon mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit so verhält wie ein x' -polarisiertes Photon und mit einer anderen Wahrscheinlichkeit so wie ein y' -polarisiertes Photon. Das heißt, die Wahrscheinlichkeit, dass das sich in diesem Superpositionszustand befindliche Photon durch den x' -Polarisator durchgelassen wird, ist demnach

$$P_{x'} = |A_{x'}|^2. \quad (1.25)$$

Wichtig ist hierbei, dass jedes *einzelne* Photon nach dem x -Polarisator im Zustand $\vec{E}_1^N = A_x \vec{e}_x = A_{x'} \vec{e}_{x'} + A_{y'} \vec{e}_{y'}$ ist. Das bedeutet, dass die Zustände einzelner Photonen Superpositionen sein können.

1.3 Zustand und Vektorraum

In der Quantenmechanik werden alle physikalisch relevanten Eigenschaften eines Systems durch seinen *Zustand* beschrieben. Als Beispiel hierfür haben wir den Polarisationszustand des Photons kennengelernt. Wir führen folgende Dirac-Notation ein:

Zustand $\leftrightarrow \alpha\rangle$.	(1.26)
--	--------

Nach Dirac bezeichnet man einen solchen Zustand $|\alpha\rangle$ als “ket”.

Zentrale empirisch untermauerte Einsicht:

Sei der Zustand $|\gamma\rangle$ gegeben. Dann existieren immer zwei oder mehr physikalische Zustände, z.B. $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$, so dass das System als “teilweise” in diesen Zuständen aufgefasst werden kann,

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle. \quad (1.27)$$

Diese Tatsache bezeichnet man als *Superpositionsprinzip (Überlagerungsprinzip)*. Um das Prinzip zu verdeutlichen, schreiben wir das bekannte Polarisationsexperiment in dieser neuen Notation:

$$\underbrace{E_x \vec{e}_x}_{|\gamma\rangle} = \underbrace{E_x \cos(\phi) \vec{e}_{x'}}_{|\alpha\rangle} + \underbrace{(-E_x \sin(\phi)) \vec{e}_{y'}}_{|\beta\rangle}. \quad (1.28)$$

Im Beispiel des Polarisationsexperiment hatten wir gesehen, dass die Aussage $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$ bedeutet: Das Photon verhält sich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit wie ein Teilchen im Zustand $|\alpha\rangle$ und mit einer anderen Wahrscheinlichkeit wie ein Teilchen im Zustand $|\beta\rangle$. Dies werden wir noch präzisieren.

Die Anwendung dieses von der Mechanik der Wellen vertrauten Phänomens auf *alle* quantenmechanischen Zustände macht eine der Kernneuerungen der Quantenmechanik gegenüber der klassischen Mechanik aus. Wichtig ist, dass das Superpositionsprinzip bereits für *einzelne Teilchen* (Photonen, etc.) gilt.

Anhand unserer bisherigen Betrachtungen stellen wir fest:

- Im Polarisationsbeispiel ist $E_x \in \mathbb{C}$. Dies ist notwendig, um auch zirkulare Polarisation zu beschreiben (für die $E_y = \pm i E_x$).
- Die Physik eines einzelnen Photons spielt sich nur im *Verhältnis* von $E_x \cos(\phi)$ und $E_x \sin(\phi)$ zueinander ab (siehe Intensitätsformel).

Wir folgern daraus: Man kann einen Zustand $|\gamma\rangle$ mit $x \in \mathbb{C}$ multiplizieren. Für $c \neq 0$ sind $|\gamma\rangle$ und $c|\gamma\rangle$ physikalisch äquivalent.

Wir stellen uns deshalb nun die Aufgabe, eine mathematische Struktur zu finden, welche das Konzept von

- Superposition und
- Multiplikation mit $c \in \mathbb{C}$

beschreibt. Die von uns gesuchte Struktur ist die des **komplexen Vektorraums (VR)**:

Definition 1.1. Ein komplexer VR ist eine Menge V von Objekten - genannt Vektoren $|\alpha\rangle \in V$ - zusammen mit den Operationen

$$+ : V \times V \rightarrow V \quad (\text{Vektoraddition}) \quad \text{und} \quad \cdot : \mathbb{C} \times V \rightarrow V \quad (\text{Skalarmultiplikation}) \quad (1.29)$$

so dass gilt:

- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle \in V$,
- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$ (abelsch),

- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \in V$ ist $(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$ (*assoziativ*),
- $\exists |0\rangle \in V : \forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle$ (*0-Vektor*),
- $\forall |\alpha\rangle \in V \exists (-|\alpha\rangle \in V) : |\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = |0\rangle$ (*Inverses*),
- - $\forall c \in \mathbb{C}$ und $\forall |\alpha\rangle \in V$ ist $c|\alpha\rangle \in V$,
- $\forall |\alpha\rangle \in V$ ist $1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$,
- $\forall c, d \in \mathbb{C}$ und $\forall |\alpha\rangle \in V$ ist $(c \cdot d)|\alpha\rangle = c \cdot (d|\alpha\rangle)$ (*assoziativ*)
- $\forall c, d \in \mathbb{C}$ und $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$ und $(c + d)|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle + d|\alpha\rangle$.

Mittels dieser Eigenschaften ist es nun leicht zu zeigen, dass $0|\alpha\rangle = |0\rangle$. Den Beweis führen wir in den Übungen aus.

Fassen wir also unsere bisher gewonnenen Erkenntnisse zusammen:

Postulat 1 (vorläufige Fassung)

Der quantenmechanische Zustand ist ein Vektor (genauer: ein Strahl) in einem komplexen Vektorraum.

Hierzu wollen wir noch folgende Anmerkungen machen:

- Eine tiefere Begründung, warum der Vektorraum über \mathbb{C} , nicht über \mathbb{R} zu betrachten ist, wird später noch gegeben, Wir sehen jedoch schon an dieser Stelle, dass in der Quantenmechanik der Körper der komplexen Zahlen direkte physikalische Signifikanz hat.
- Der Zustand $|0\rangle$ entspricht dem "Vakuum" (d.h. dem physikalischen Zustand ohne "Teilchen" oder sonstige Anregungen).
- Der Zustandsraum in der Quantenmechanik ist genauer ein *Hilbertraum*. Auch hierauf werden wir später zurückkommen.

Das Superpositionsprinzip besagt demnach:

Sei $\{|\alpha_i\rangle\}$, $i = 1, \dots, k$ eine Menge von Zuständen. Dann ist $|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$ ebenfalls ein physikalischer Zustand, dessen Eigenschaften wir noch genau bestimmen werden.

Wir stellen uns nun die Frage, wann eine Menge $\{|\alpha_i\rangle\}$ ausreicht, um jeden Zustand $|\gamma\rangle$ darzustellen. Wir führen deshalb das Konzept der *linearen Unabhängigkeit und Basis* ein:

Definition 1.2. Die Menge der Vektoren $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_k\rangle\}$ heißt *linear unabhängig genau dann*, wenn die Gleichung $c_1|\alpha_1\rangle + \dots + c_k|\alpha_k\rangle = |0\rangle$ nur die triviale Lösung $c_1 = c_2 = \dots = c_k = 0$ besitzt. Andernfalls heißt die Menge der Vektoren *linear abhängig*.

Definition 1.3. Die *Dimension eines VR* ist die größte Anzahl linear unabhängiger Vektoren.

Definition 1.4. Die Menge der Vektoren $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_k\rangle\}$ heißt *Basis genau dann*, wenn

- $\{|\alpha_1\rangle \dots |\alpha_k\rangle\}$ linear unabhängig sind und
- $\forall |\gamma\rangle \in V : \exists c_i \in \mathbb{C}, \quad i = 1, \dots, k : |\gamma\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$.

Eine Basis ist also die kleinste Menge an Vektoren $|\alpha_i\rangle$, so dass jeder Vektor eindeutig durch Superposition erreicht werden kann.

In den Übungen werden wir mit Hilfe dieser Definitionen folgendes Lemma beweisen:

Lemma 1.1. *In einer linear abhängigen Menge kann einer der Vektoren als Linearkombination der anderen ausgedrückt werden.*

Kommen wir nun auf unsere Frage zurück, warum der Zustand Element eines komplexen VRs ist. Betrachten wir dazu erneut die Polarisation des Photons und wählen eine Basis:

$$\vec{e}_x = |x\rangle, \vec{e}_y = |y\rangle. \quad (1.30)$$

Jeder Polarisationszustand ist schreibbar als

$$|E\rangle = A_x |x\rangle + A_y |y\rangle, \quad \text{aber} \quad |E\rangle \cong c \cdot |E\rangle \quad \text{für} \quad c \neq 0. \quad (1.31)$$

Um nach wie vor zwei unabhängige Freiheitsgrade zu beschreiben, muss $A_x, A_y \in \mathbb{C}$. (Später werden wir eine tiefere Erklärung finden.)

Bemerkung: Der quantenmechanische Zustands-VR ist i.a. unendlichdimensional. Das wird noch genau behandelt werden. Im Augenblick denken wir nur an Zustände in einem endlichdimensionalen VR, z.B. wie im Polarisationsexperiment mit Basis $|e_x\rangle, |e_y\rangle$.

1.4 Skalarprodukt, Norm, Dualer Vektorraum

Erinnern wir uns an Gleichung (1.20), an der wir sehen, dass uns das Skalarprodukt die Koeffizienten in einer Superposition angibt. In der Tat stellt sich das Skalarprodukt in physikalischen Anwendungen als sehr nützlich heraus, weshalb wir es zunächst mathematisch etwas genauer beleuchten wollen.

Definition 1.5. *Sei V ein komplexer VR. Dann ist ein Skalarprodukt eine positiv-definite, hermitesche, sesquilineare Abbildung:*

$$|\alpha\rangle, |\beta\rangle \mapsto (|\alpha\rangle, |\beta\rangle) \in \mathbb{C} \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle. \quad (1.32)$$

D.h. es gilt

- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, c_i \in \mathbb{C} : (|\alpha\rangle, c_1 |\beta\rangle + c_2 |\gamma\rangle) = c_1 (|\alpha\rangle, |\beta\rangle) + c_2 (|\alpha\rangle, |\gamma\rangle)$,
- $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle) = (|\beta\rangle, |\alpha\rangle)^*$,
- $(|\alpha\rangle, |\alpha\rangle) \geq 0$,
- $(|\alpha\rangle, |\alpha\rangle) = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle = 0$.

Insbesondere folgt damit

$$(c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle, |\gamma\rangle) = c_1^* (|\alpha\rangle, |\gamma\rangle) + c_2^* (|\beta\rangle, |\gamma\rangle). \quad (1.33)$$

Definition 1.6. *Ein komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt heißt unitär.*

In den Übungen werden wir als wichtige Konsequenz aus der obigen Definition beweisen, dass die **Schwarz'sche Ungleichung** gilt,

$$|(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)|^2 \leq (|\alpha\rangle, |\alpha\rangle)(|\beta\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.34)$$

Das Konzept des Skalarproduktes erlaubt es, den Überlapp zweier Vektoren - physikalisch also zweier Zustände - zu quantifizieren.

Definition 1.7. Zwei Vektoren heißen *orthogonal*, wenn $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle) = 0$. Eine *Orthogonalbasis* $\{|\alpha_i\rangle\}$ erfüllt $(|\alpha_i\rangle, |\alpha_j\rangle) = 0$ für $i \neq j$.

Sei nun eine Orthogonalbasis gegeben und $|\gamma\rangle = \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle$. Dann folgt:

$$(|\alpha_j\rangle, |\gamma\rangle) = (|\alpha_j\rangle, \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle) = \sum_{i=1}^k c_i (|\alpha_j\rangle, |\alpha_i\rangle) = c_j (|\alpha_j\rangle, |\alpha_j\rangle), \quad (1.35)$$

woraus wiederum $c_j = \frac{(|\alpha_j\rangle, |\gamma\rangle)}{(|\alpha_j\rangle, |\alpha_j\rangle)}$ folgt. $(|\alpha_j\rangle, |\alpha_j\rangle)$ bezeichnet die Länge des Vektors $|\alpha_j\rangle$. Dies führt uns zum Begriff der Norm:

Definition 1.8. Eine Norm ist eine Abbildung

$$\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R} \quad (1.36)$$

so dass

- $\forall |\alpha\rangle \in V : \|\alpha\| \geq 0 \quad \& \quad \|\alpha\| = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle,$
- $\forall |\alpha\rangle \in V, c \in \mathbb{C} : \|c|\alpha\rangle\| = |c| \|\alpha\|,$
- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V : \|\alpha\rangle + |\beta\rangle\| \leq \|\alpha\rangle\| + \|\beta\rangle\|.$

Ein VR mit einer Norm heißt *normiert*.

Lemma 1.2. In einem unitären VR induziert das Skalarprodukt eine Norm:

$$\|\alpha\rangle\| := \sqrt{(|\alpha\rangle, |\alpha\rangle)}. \quad (1.37)$$

Wir werden in den Übungen darauf zurückkommen. Für gegebenes $|\alpha\rangle$ ist $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{|\alpha\rangle}{\|\alpha\rangle\|}$ auf eins normiert.

Definition 1.9. Eine *Orthonormalbasis (ONB)* ist eine Orthogonalbasis, deren Elemente normiert sind.

Für eine solche ONB $|e_i\rangle$ gilt

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle \Rightarrow c_i = (|e_i\rangle, |\gamma\rangle), \quad (1.38)$$

im Einklang mit dem Polarisationsbeispiel (1.19).

In quantenmechanischen Anwendungen benötigen wir schließlich das wichtige Konzept des *dualen Vektorraums*, definiert über die linearen Abbildungen von V in den zugrundeliegenden Körper, hier \mathbb{C} .

Definition 1.10. Eine Funktion $f : V \rightarrow \mathbb{C}$ ist linear, wenn $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V, a, b \in \mathbb{C} : f(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = af(|\alpha\rangle) + bf(|\beta\rangle)$.

Offensichtlich ist $\lambda f_1 + \mu f_2$ ebenfalls eine lineare Funktion ($\lambda, \mu \in \mathbb{C}$). Daraus folgt sofort, dass die Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{C}$ einen VR bilden:

Definition 1.11. Der zu V duale Vektorraum V^* ist der Vektorraum der linearen Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{C}$.

Falls der VR ein Skalarprodukt besitzt, stellt dieses eine Abbildung zwischen Elementen aus V^* und V her:

Sei $|\alpha\rangle \in V$. Dann definiere

$$f_{|\alpha\rangle} : V \rightarrow \mathbb{C} : f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.39)$$

Wir stellen fest :

$$f_{|\alpha\rangle} \in V^* \stackrel{\text{dual}}{\leftrightarrow} |\alpha\rangle. \quad (1.40)$$

Beachte dabei, dass aus (1.33) und (1.39) folgt, dass $f_{c|\alpha\rangle} = c^* f_{|\alpha\rangle}$. Wir führen die folgende, wichtige Notation ein,

$$f_{|\alpha\rangle} \equiv \langle \alpha|, \quad (1.41)$$

und nennen diesen dualen Vektor "bra". Wir schreiben weiterhin

$$f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = \langle \alpha|\beta\rangle = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.42)$$

Manchmal verwendet man auch die Notation

$$\langle \alpha| = (|\alpha\rangle)^* \Rightarrow \langle \alpha|c^* = (c|\alpha\rangle)^* \quad \text{für } c \in \mathbb{C}. \quad (1.43)$$

1.5 Lineare Operatoren & Observablen

Bis jetzt haben wir den Zustand eines Systems dargestellt durch einen ket-Vektor $|\gamma\rangle \in V$, wobei V ein unitärer VR ist, dessen Skalarprodukt es erleichtert, die Entwicklung eines Zustands insbesondere in eine Orthonormalbasis ökonomisch zu bestimmen. Wir wenden uns nun der Frage zu, was die physikalischen Eigenschaften von $|\gamma\rangle$ sind. Die Quantenmechanik gibt Auskunft über das Ergebnis von Messungen. Die *Messgrößen* heißen Observable - z.B. Ort, Impuls, Drehimpuls etc.

Wir gehen induktiv-heuristisch vor am Beispiel des Polarisierungsexperimentes:
Betrachte die Polarisationszustände

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle), \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle). \quad (1.44)$$

Ein Vergleich mit dem klassischen Wellenvektor, wie in Kapitel 1.2.1 beschrieben, zeigt:
 $|R\rangle \leftrightarrow$ Photon eines rechtszirkulär polarisierten Strahls,
 $|L\rangle \leftrightarrow$ Photon eines linkszirkulär polarisierten Strahls.

Als Beispiel einer Observablen betrachten wir den Drehimpuls. Experimentell findet man:
Ein einzelnes Photon im Zustand $|R\rangle$ ($|L\rangle$) gibt Drehimpuls in z -Richtung $L_z = \hbar$ ($L_z = -\hbar$) an die Photoplatten ab. Das *Spektrum der möglichen Messwerte* von L_z scheint also die Werte $\{\hbar, -\hbar\}$ zu umfassen.

In Vektornotation ist $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ und $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$. Wir machen folgende Beobachtung: Wenn wir die Matrix $\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ betrachten, finden wir

$$\hat{S}_z |R\rangle = +\hbar |R\rangle \quad \text{und} \quad \hat{S}_z |L\rangle = -\hbar |L\rangle. \quad (1.45)$$

Das *Spektrum der möglichen Messwerte* ist hier also durch die *Eigenwerte* einer Matrix - \hat{S}_z - gegeben.

Dieser Zusammenhang erscheint an dieser Stelle zugegebenermaßen etwas adhoc. Es stellt sich aber heraus, dass ein solcher Zusammenhang - zwischen den möglichen Messwerten für eine Observable und den Eigenwerten geeigneter Matrizen - allgemein in der QM gilt.

Um dies zu formalisieren, müssen wir die mathematischen Eigenschaften von "Matrizen" - d.h. Operatoren auf dem VR - verstehen. Dies wird uns erlauben, die Darstellung von Observablen durch geeignete solcher Operatoren zu erraten und zu einem allgemeinen Postulat der QM zu erheben.

1.5.1 Die Algebra der Linearen Operatoren

Definition 1.12. *Ein linearer Operator ist eine Abbildung*

$$\hat{A} : V \rightarrow V \quad \text{so dass} \quad \hat{A}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{A}|\alpha\rangle + b\hat{A}|\beta\rangle. \quad (1.46)$$

Beachte, dass ein linearer Operator $\hat{A} : V \rightarrow V$ ebenfalls auf dem dualen VR V^* wirkt:

$$\hat{A} : V^* \rightarrow V^*, \quad \langle \alpha | \rightarrow \langle \alpha | \hat{A}, \quad (1.47)$$

was definiert ist durch

$$(\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle) := \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) \quad \Rightarrow \quad \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) = (\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle). \quad (1.48)$$

Ein linearer Operator ist spezifiziert durch seine *Wirkung auf einer Basis*:

Sei $\{|e_i\rangle, \quad i = 1, \dots, N\}$ eine ONB. Dann ist $|f_i\rangle = \hat{A}|e_i\rangle = \sum_{k=1}^N A_{ki} |e_k\rangle$, wobei die Matrixelemente A_{ji} gegeben sind als

$$A_{ji} = \langle e_j | \sum_k A_{ki} e_k \rangle = \langle e_j | \hat{A} | e_i \rangle. \quad (1.49)$$

Dies führt uns zur Identifikation

$$\text{linearer Operator } \hat{A} \leftrightarrow \text{Matrix } A_{ji}. \quad (1.50)$$

Als wichtiges Beispiel sehen wir, dass $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ $\hat{A} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ ein linearer Operator ist:

$$\hat{A}|\gamma\rangle = (|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle) = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle \quad (1.51)$$

Von großer Bedeutung ist insbesondere Darstellung des Identitätsoperators $\mathbb{1}$. Sei $\{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\}$ eine Orthonormalbasis:

$$\forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (\langle e_i | \alpha \rangle) = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle \quad (1.52)$$

$$\Rightarrow \mathbb{1} = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i| \quad (\text{Vollständigkeitsrelation}) \quad \text{falls } \{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\} \text{ ONB ist.} \quad (1.53)$$

Insbesondere gilt damit natürlich $|\alpha\rangle = \mathbb{1}\alpha = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle$.

Oftmals werden wir obige Darstellung des Identitätsoperators an diversen Stellen einfügen, um abstrakte Zusammenhänge in einer bestimmten Basis auszudrücken. So führt uns etwa die Manipulation

$$\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \left(\sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j|\right) \hat{A} \left(\sum_{k=1}^N |e_k\rangle \langle e_k|\right) = \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle (\langle e_j | \hat{A} | e_k \rangle) \langle e_k| \quad (1.54)$$

$$(1.55)$$

zur Matrixdarstellung eines linearen Operators,

$$\hat{A} = \sum_{j,k=1}^N A_{jk} |e_j\rangle \langle e_k|. \quad (1.56)$$

Beleuchten wir nun die mathematische Struktur, welche das Konzept des Operators beschreibt, etwas genauer:

- Die Addition linearer Operatoren führt wieder zu einem linearen Operator, und die Addition erfüllt die Eigenschaften
 - $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$,
 - $\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}$,
 - $\hat{A} + \hat{0} = \hat{A}$ wobei $\hat{0}|\alpha\rangle = |0\rangle \quad \forall |\alpha\rangle$,

$$- \hat{A} + (-\hat{A}) = \hat{0}.$$

Ferner kann ein Operator mit einer Zahl $c \in \mathbb{C}$ multipliziert werden. Dies definiert also wiederum einen Vektorraum.

- Die Hintereinanderausführung zweier linearer Operatoren ergibt wieder einen linearen Operator, gegeben durch das Produkt der Operatoren mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} - \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) &= (\hat{A}\hat{B})\hat{C} \quad (\text{Assoziativität}), \\ - \mathbb{1}\hat{A} &= \hat{A} \quad (\text{Existenz der Eins}). \end{aligned}$$

Ferner gilt das Distributivgesetz $\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$.

Definition 1.13. Ein Vektorraum mit einer Abbildung $V \times V \rightarrow V$ mit obigen Eigenschaften heißt **Algebra mit Einselement**.

Wichtig: Im Allgemeinen kommutiert die Multiplikation nicht!

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \tag{1.57}$$

Definition 1.14. Wir bezeichnen $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ als **Kommutator** von \hat{A} und \hat{B} .

Der Kommutator erfüllt die *Jacobi-Identität*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \tag{1.58}$$

1.5.2 Adjungierter Operator und Hermitizität

Ein wesentliches Konzept ist das des adjungierten Operators:

Definition 1.15. Sei $\hat{A} : V \rightarrow V$ gegeben, so ist $\hat{A}^\dagger : V \rightarrow V$ der zu \hat{A} adjungierte Operator, definiert so dass $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$:

$$(\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, \hat{A} |\beta\rangle) = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle. \tag{1.59}$$

Beachte dabei, dass

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} |\beta\rangle) = (\langle \alpha | \hat{A}) | \beta \rangle \quad \text{d.h.} \quad \langle \alpha | \hat{A} \stackrel{\text{dual}}{\leftrightarrow} \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle. \tag{1.60}$$

Alternativ können wir wegen

$$(|\beta\rangle, \hat{A}^\dagger |\alpha\rangle) = (\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle)^* = (|\alpha\rangle, \hat{A} |\beta\rangle)^* \tag{1.61}$$

auch schreiben

$$\langle \beta | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle^*. \tag{1.62}$$

In Matrixschreibweise bedeutet dies

$$\hat{A} = \sum_{j,k} A_{jk} |e_j\rangle \langle e_k|, \quad \hat{A}^\dagger = \sum_{j,k} (A^\dagger)_{jk} |e_j\rangle \langle e_k|, \quad (A^\dagger)_{jk} = A_{kj}^*. \tag{1.63}$$

Beweis:

$$(A^\dagger)_{jk} = \langle e_j | \hat{A}^\dagger | e_k \rangle = \langle e_k | \hat{A} | e_j \rangle^* = A_{kj}^*. \tag{1.64}$$

In den Übungen werden wir folgende Identität zeigen:

Lemma 1.3.

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (1.65)$$

Definition 1.16. Ein linearer Operator heißt hermitesch, wenn

$$\langle \alpha | A | \beta \rangle = \langle \beta | A | \alpha \rangle^* \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle. \quad (1.66)$$

Für endlich-dimensionale VR impliziert dies, dass $A = A^\dagger$, d.h. der Operator ist selbstadjungiert. Selbstadjungiertheit, $A = A^\dagger$ erfordert zusätzlich zu Hermitizität, dass auch der Definitionsbereich von A und A^\dagger übereinstimmen muss. Dies ist auf endlich-dimensionalen Vektorräumen immer der Fall, stellt für unendlich-dimensionale VR aber eine nicht-triviale Einschränkung dar. Im Folgenden wollen wir die Bedeutung selbstadjungierter Operatoren anhand ihrer "guten" Eigenschaften bzgl. Diagonalisierung darlegen.

Definition 1.17. Ein linearer Operator \hat{A} auf einem N -dimensionalen komplexen Vektorraum hat einen vom Nullvektor verschiedenen Eigenvektor $|\lambda\rangle$ mit Eigenwert λ , wenn

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \text{d.h.} \quad (\hat{A} - \lambda\mathbb{1})|\lambda\rangle = 0. \quad (1.67)$$

Lösungen zu dieser Gleichung existieren, wenn $\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0$. Dies ist ein Polynom in λ vom Grade N , welches nach dem Fundamentalsatz der Algebra N Nullstellen hat, wobei nicht alle verschieden sein müssen.

Die wichtige Eigenschaft von hermiteschen Operatoren ist zusammengefasst in

Lemma 1.4. Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell. Die Eigenvektoren gehörig zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis: Sei $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ und normiere $\langle \lambda | \lambda \rangle = 1$.

- $\lambda^* = (\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle)^* = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle = \lambda$
- Seien $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ und $\hat{A}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle$ für $\lambda \neq \mu$:

$$\lambda\langle \lambda | \mu \rangle = (\lambda\langle \mu | \lambda \rangle)^* = (\langle \mu | \hat{A} | \lambda \rangle)^* \quad (1.68)$$

$$= \langle \lambda | \hat{A} | \mu \rangle = \mu\langle \lambda | \mu \rangle \quad (1.69)$$

Das bedeutet, dass $\langle \lambda | \mu \rangle = 0$ sein muss, da $\mu \neq \lambda$.

Für selbstadjungierte Operatoren gilt darüberhinaus folgendes Theorem von zentraler Wichtigkeit:

Lemma 1.5. Die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators formen eine Orthogonalbasis des Vektorraumes.

Beweis: Sei $\dim(V) = N$. Die Eigenwerte von \hat{A} sind die Nullstellen von $\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1})$. Wenn alle Eigenwerte verschieden sind $\exists \lambda_1, \dots, \lambda_N$ mit $|\lambda_1\rangle, \dots, |\lambda_N\rangle : \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij}$. Daraus folgt sofort, dass $\{|\lambda_i\rangle\}$ eine ONB bilden.

Allgemeiner hat $\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0$ k Lösungen $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ mit Multiplizität (=Entartungsgrad)

$d(\lambda_1), \dots, d(\lambda_k) : \sum_{i=1}^k d(\lambda_i) = N$. Dann gilt (siehe Literatur zur linearen Algebra), dass jeder Eigenwert λ_i seiner Vielfachheit $d(\lambda_i)$ entsprechend viele linear unabhängige Eigenvektoren besitzt.

$$\hat{A} |\lambda_i^{(n_i)}\rangle = \lambda_i |\lambda_i^{(n_i)}\rangle, \quad n_i = 1, \dots, d(\lambda_i). \quad (1.70)$$

Wir bilden nun die ONB des Unterraums, der von den $|\lambda_i^{(n)}\rangle$ aufgespannt wird.

$$\text{Insbesondere gilt } \hat{A} = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| \quad (\text{nicht entarteter Fall}) \quad (1.71)$$

Begründung: \hat{A} ist durch seine Wirkung auf eine Basis eindeutig bestimmt. Wähle die normierte Eigenbasis $|\lambda_i^{(n)}\rangle$:

$$\hat{A} |\lambda_i\rangle = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|\lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle. \quad (1.72)$$

Beachte: Obwohl der Beweis nur für endlichdimensionale Vektorräume skizziert wurde, gilt das Theorem auch für unendlich-dimensionale Vektorräume. Allerdings ist es hier entscheidend, dass der Operator selbstadjungiert und nicht nur hermitesch ist, um Existenz einer Eigenbasis zu garantieren.

Nun zurück zur Physik. Im Polarisationsexperiment hatten wir den Zusammenhang festgestellt

$$\text{Messgröße} = \text{Observable} \leftrightarrow \text{Operator } \hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Die möglichen Messergebnisse $(+\hbar, -\hbar)$ sind Eigenwerte von \hat{S}_z . Messergebnisse müssen immer reell sein. Nach Lemma 1.4 ist dies für $\hat{S}_z^\dagger = \hat{S}_z$ garantiert. Es stellt sich heraus, dass es sinnvoll ist, diesen Sachverhalt zu einem allgemeinen Postulat zu erheben:

Postulat 2

Eine quantenmechanische Observable ist eine Messgröße. Jeder Observablen ordnen wir einen selbstadjungierten Operator \hat{A} auf dem VR der Zustände zu. Eigenwerte von \hat{A} stellen alle in der Quantenmechanik möglichen Messwerte dar.

Beachte, dass wir hier, wie in der Literatur üblich, fordern, dass die Observable einem selbstadjungierten, und nicht nur einem hermiteschen Operator, entspreche. Inwieweit diese Bedingung in bestimmten Situationen aufgeweicht werden sollte, kann hier nicht weiter erörtert werden.

1.6 Messungen & Projektion

Betrachten wir einen normierten Zustand $|\gamma\rangle$ und eine Observable \hat{A} mit normierter Eigenbasis $\{|\lambda_i\rangle\}$,

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\lambda_i\rangle, \quad c_i = \langle\lambda_i|\gamma\rangle, \quad \sum_i |c_i|^2 = 1. \quad (1.73)$$

Wir nehmen zunächst an, dass die Eigenwerte nicht degeneriert seien.

Die prinzipiell möglichen Messwerte bei Messung der Observablen sind die Eigenwerte λ_i .

Am Polarisationsexperiment haben wir beobachtet, dass die Wahrscheinlichkeit, dass wir den Wert λ_i messen, gegeben ist durch

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 \quad (\text{Born'sche Regel}). \quad (1.74)$$

Insbesondere wird λ_i genau dann mit Sicherheit gemessen, $P(\lambda_i) = 1$, wenn $|\gamma\rangle = |\lambda_i\rangle$.

Wir stellen uns nun die Frage, in welchem Zustand das System nach der Messung ist. Beginnen wir mit $|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\lambda_i\rangle$. Wenn wir unmittelbar nach der Messung eine weitere Messung vornehmen, sollte derselbe Wert mit Wahrscheinlichkeit 1 gemessen werden. Daraus folgt, dass das System nach der Messung des Eigenwertes λ_i im Eigenzustand $|\lambda_i\rangle$ sein muss. Dies ist im Einklang mit der Beobachtung im Polarisationsexperiment. Wir verallgemeinern diese Überlegungen zu

Postulat 3.a

Sei \hat{A} eine Observable mit nicht-degenerierten Eigenwerten λ_i und normierter Eigenbasis $\{|\lambda_i\rangle\}$. Die Messung der Observablen am normierten Zustand $|\gamma\rangle = \sum_j c_j |\lambda_j\rangle$ ergibt λ_i mit Wahrscheinlichkeit

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2. \quad (1.75)$$

Nach Messung von λ_i befindet sich das System im Zustand $|\lambda_i\rangle$.

Bemerkung:

Durch den Messvorgang “springt” der Zustandsvektor von $|\gamma\rangle \rightarrow |\lambda_i\rangle$. Dies wird als “Kollaps” oder Reduktion der Wellenfunktion bezeichnet. In herkömmlicher (“Kopenhagen’scher”) Interpretation der Quantenmechanik wird nicht weiter erklärt, wie oder warum dieser Kollaps vonstatten geht. Dies wird als *Messproblem* bezeichnet. Am Ende der Vorlesung werden wir den Messprozess genauer beleuchten und mögliche Interpretationen des Kollapses der Wellenfunktion kennenlernen. An dieser Stelle sei lediglich betont, dass Postulat 3 in exzellenter Übereinstimmung mit allen Experimenten steht und zumindest als effektive Beschreibung eines Messvorgangs Bestand hat.

Mathematisch lässt sich der Kollaps der Wellenfunktion mithilfe eines *Projektionsoperators* beschreiben. Der Zustand $|\gamma\rangle = \sum_j c_j |\lambda_j\rangle$ und der Eigenzustand $|\lambda_i\rangle$ hängen wie folgt zusammen:

$$\underbrace{|\lambda_i\rangle \langle \lambda_i |}_{\hat{P}_i} \gamma = c_i |\lambda_i\rangle \Rightarrow |\lambda_i\rangle = \frac{|\lambda_i\rangle \langle \lambda_i | \gamma}{c_i}. \quad (1.76)$$

Der Operator $\hat{P}_j = |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|$ erfüllt die Eigenschaften

- $\hat{P}_j^2 = \hat{P}_j$, denn $|\lambda_j\rangle \langle \lambda_j | \underbrace{|\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|}_{=1} |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| = |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|$,

- $\hat{\mathbb{P}}_j^\dagger = \hat{\mathbb{P}}_j$, denn

$$\langle x | \hat{\mathbb{P}}_j | y \rangle = \langle x | \lambda_j \rangle \langle \lambda_j | y \rangle = (\langle y | \lambda_j \rangle \langle \lambda_j | x \rangle)^* = \langle y | \hat{\mathbb{P}}_j | x \rangle^*. \quad (1.77)$$

Einen Operator mit diesen Eigenschaften nennt man *Projektionsoperator*. Ein Projektionsoperator hat die Eigenwerte 0 oder 1, denn

$$\hat{\mathbb{P}} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \Rightarrow \hat{\mathbb{P}}^2 |\lambda\rangle = \lambda^2 |\lambda\rangle = \hat{\mathbb{P}} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle. \quad (1.78)$$

Die Wahrscheinlichkeit, den nicht-degenerierten Eigenwert λ_i zu messen, kann man nun mithilfe des Projektionsoperators \mathbb{P}_i schreiben als

$$P(\lambda_i) = \langle \gamma | \hat{\mathbb{P}}_i | \gamma \rangle = \|\hat{\mathbb{P}}_i | \gamma \rangle\|^2, \quad (1.79)$$

und nach Messung des nicht-degenerierten Eigenwertes λ_i kollabiert der Zustandsvektor gemäß

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{\hat{\mathbb{P}}_i |\gamma\rangle}{\|\hat{\mathbb{P}}_i |\gamma\rangle\|} \cong |\lambda_i\rangle. \quad (1.80)$$

Im letzten Schritt schreiben wir \cong , weil die Ausdrücke auf beiden Seiten sich nur durch eine komplexe Phase unterscheiden.

Nun betrachten wir entartete Eigenwerte, d.h. die Observable \hat{A} hat Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ mit Entartung $d(\lambda_1), \dots, d(\lambda_k)$. Dann gibt es $d(\lambda_i)$ linear unabhängige Eigenvektoren $|\lambda_i^{(a)}\rangle$, $a = 1, \dots, d(\lambda_i)$, welche wir o.B.d.A. orthonormal wählen können,

$$\hat{A} |\lambda_i^{(a)}\rangle = \lambda_i |\lambda_i^{(a)}\rangle, \quad \langle \lambda_i^{(a)} | \lambda_j^{(b)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{ab}. \quad (1.81)$$

Es stellt sich die Frage, in welchem Zustand $|\gamma\rangle$ nach der Messung von λ_i ist. Dazu bedenken wir die folgenden beiden Punkte:

- $|\gamma\rangle$ sollte im Eigenraum liegen, der von $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aufgespannt wird.
- Die Messung von λ_i zeichnet keinen der $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aus.

Wir definieren den Projektor, der auf den von den $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aufgespannten Unterraum projiziert,

$$\hat{\mathbb{P}}_i = \sum_{a=1}^{d(\lambda_i)} |\lambda_i^{(a)}\rangle \langle \lambda_i^{(a)}|. \quad (1.82)$$

Eine naheliegende Verallgemeinerung des Messaxioms für entartete Eigenwerte ist gegeben durch

Postulat 3.b

Sei \hat{A} eine Observable mit (degenerierten) Eigenwerten λ_i und \hat{P}_i der in (1.82) definierte Projektionsoperator auf den Eigenraum zu Eigenwert λ_i . Die Wahrscheinlichkeit, den Wert λ_i bei Messung an einem normierten Zustand $|\gamma\rangle$ zu messen, ist

$$P(\lambda_i) = \langle \gamma | \hat{P}_i | \gamma \rangle. \quad (1.83)$$

Bei der Messung kollabiert die Wellenfunktion gemäß

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{\hat{P}_i |\gamma\rangle}{\|\hat{P}_i |\gamma\rangle\|}. \quad (1.84)$$

1.7 Kompatible & inkompatible Observablen

Eine entscheidende Rolle spielt das Konzept der *gleichzeitigen Messung* mehrerer Observablen. Wegen des Zusammenhangs zwischen Messergebnis und Eigenbasis ist folgendes Lemma von Bedeutung:

Lemma 1.6. *Seien \hat{A}, \hat{B} Observablen mit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Dann sind \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig diagonalisierbar, d.h. sie haben dieselben Eigenvektoren.*

Beweis: Sei $\{|a_i\rangle\}$ eine Eigenbasis von \hat{A} . Wir nehmen zunächst keine Entartung an. Dann gilt:

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle. \quad (1.85)$$

Daraus folgt, dass $\hat{B}|a_i\rangle$ **der** (eindeutige) Eigenvektor von \hat{A} mit Eigenwert a_i ist. Das wiederum bedeutet, dass $\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle$ für ein bestimmtes b_i .

Wenn a_i degeneriert ist, dann liegt $\hat{B}|a_i\rangle$ im zu a_i gehörigen Eigenraum. Wir können dann \hat{B} auf diesem Unterraum diagonalisieren.

Definition 1.18. *Zwei Observable \hat{A} und \hat{B} heißen kompatibel, wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ und inkompatibel, wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$.*

Die physikalische Bedeutung von *kompatiblen* Observablen besteht darin, dass sie *gleichzeitig messbar* sind in folgendem Sinne.

i.) Nicht-degenerierter Fall

Betrachten wir die zu \hat{A} und \hat{B} gehörigen Eigenvektoren, so dass

$$\hat{A}|a_i, b_i\rangle = a_i|a_i, b_i\rangle, \quad \hat{B}|a_i, b_i\rangle = b_i|a_i, b_i\rangle. \quad (1.86)$$

Für den nicht-degenerierten Fall gilt dann:

Messung von \hat{A} am Zustand $|a_i, b_i\rangle$ ergibt a_i mit $P(a_i) = 1$, und

Messung von \hat{B} am Zustand $|a_i, b_i\rangle$ ergibt b_i mit $P(b_i) = 1$.

Beginnen wir mit einem Zustand $|\gamma\rangle$. Dieser lässt sich darstellen als $|\gamma\rangle = \sum_i c_i |a_i, b_i\rangle$. Wir messen nun die Observable \hat{A} und erhalten das Ergebnis a_i mit Wahrscheinlichkeit $|c_i|^2$. Nach der Messung ist das System im Zustand $|a_i, b_i\rangle$. D.h. nach der Messung von \hat{A} hat das System

einen definitiven Wert auch für \hat{B} - beide Observablen sind gleichzeitig genau messbar.

ii.) Degenerierter Fall

Nehmen wir nun an, der Eigenwert a_i der Observable \hat{A} , sei $d(a_i)$ -fach entartet, so dass

$$\hat{A} \left| a_i^{(n_i)} \right\rangle = a_i \left| a_i^{(n_i)} \right\rangle \quad \text{mit } n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.87)$$

Betrachten wir eine weitere Observable \hat{B} mit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Gemäß Lemma (1.6) ist $\left| a_i^{(n_i)} \right\rangle$ auch Eigenvektor zu \hat{B} ,

$$\hat{B} \left| a_i^{(n_i)} \right\rangle = b_i^{(n_i)} \left| a_i^{(n_i)} \right\rangle \quad \text{mit } n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.88)$$

Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass alle $b_i^{(n_i)}$ verschieden sind. Das bedeutet, dass \hat{B} die Entartung aufhebt. In diesem Fall können wir die Basis schreiben als $\left\{ \left| a_i, b_i^{(n_i)} \right\rangle \right\}$ mit $n_i = 1, \dots, d(a_i)$.

Unser Ausgangszustand sei gegeben durch

$$|\gamma\rangle = \sum_{i, n_i} c_i^{(n_i)} \left| a_i, b_i^{(n_i)} \right\rangle. \quad (1.89)$$

Nun messen wir abwechselnd die Observablen \hat{A} und \hat{B} :

- Die erste Messung von \hat{A} ergibt den Wert a_i mit $P(a_i) = \sum_{n_i=1}^{d(a_i)} |c_i^{(n_i)}|^2$ und der Zustand kollabiert zu

$$|\gamma\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n_i=1}^{d(a_i)} c_i^{n_i} \left| a_i, b_i^{n_i} \right\rangle, \quad N = \left(\sum_{n_i=1}^{d(a_i)} |c_i^{(n_i)}|^2 \right)^{1/2}. \quad (1.90)$$

- Darauf folgende Messung von \hat{B} ergibt den Wert $b_i^{(k)}$ mit $P(b_i^{(k)}) = \frac{|c_i^{(k)}|^2}{|N|^2}$. Der Zustand kollabiert zu

$$|\psi_1\rangle \rightarrow \left| a_i, b_i^{(k)} \right\rangle. \quad (1.91)$$

- Weitere Messung von \hat{A} ergibt nun a_i mit $P(a_i) = 1$, Messung von \hat{B} ergibt b_i^k mit $P(b_i^k) = 1$ usw.

1.8 Erwartungswert, Varianz, Unschärfe

Betrachte eine Observable mit Eigenwert λ_i und projiziere das System in Zustand $|\gamma\rangle$. Die Messung von \hat{A} liefert λ_i mit $P(\lambda_i) = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2$. Wiederhole das Experiment n mal - jedes Mal beginnend im Zustand $|\gamma\rangle$. Die statistische Verteilung der Messergebnisse λ_i mit relativer Häufigkeit von λ_i ist gegeben durch

$$H(\lambda_i) = \frac{n_i}{n}, \quad \sum_i n_i = n. \quad (1.92)$$

Im Limes $n \rightarrow \infty$ gilt $\frac{n_i}{n} \rightarrow P(\lambda_i)$.

Definition 1.19. Der Mittelwert $\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle}$ der Observable \hat{A} im Zustand $|\gamma\rangle$ ist

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i) \quad (1.93)$$

$$= \sum_i \lambda_i |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 \quad (1.94)$$

$$= \sum_i \lambda_i \langle \gamma | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \gamma \rangle \quad (1.95)$$

$$= \langle \gamma | \left(\sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| \right) | \gamma \rangle. \quad (1.96)$$

Wir lesen ab:

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} = \langle \gamma | \hat{A} | \gamma \rangle. \quad (1.97)$$

Ein Maß für die Streuung (= Breite der Verteilung) der Zufallsgrößen $\{\lambda_i\}$ ist die Varianz

$$(\Delta A)_{|\gamma\rangle}^2 := \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\gamma\rangle} - \langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle}^2 = \sum_i P(\lambda_i) \lambda_i^2 - \left(\sum_i P(\lambda_i) \lambda_i \right)^2, \quad (1.98)$$

woraus wir die Standardabweichung $(\Delta A) = \sqrt{\Delta A^2}$ erhalten. Im Folgenden wird der Subskript $|\gamma\rangle$ oft weggelassen. Aber \hat{A} und $\langle \hat{A}^2 \rangle$ beziehen sich immer auf einen festen Zustand. Beachte, dass für einen Eigenzustand von \hat{A} gilt: $(\Delta A)^2 = 0$.

Wir haben gesehen, dass für inkompatible Observablen, $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, es nicht möglich ist, für jeden Zustand sowohl \hat{A} als auch \hat{B} mit Sicherheit zu kennen. Diese Unmöglichkeit, \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig scharf zu messen, wird in der *Unschärferelation* quantifiziert:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2} \quad (\text{angewendet auf beliebigen Zustand}). \quad (1.99)$$

Diese Aussage lässt sich wie folgt interpretieren: Präpariere ein Ensemble im Zustand $|\psi\rangle$ und

- bestimme ΔA durch Messung von \hat{A} im Zustand $|\psi\rangle$ sowie
- bestimme ΔB durch unabhängige Messung von \hat{B} im Zustand $|\psi\rangle$.

$$\Rightarrow (\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2} \quad (1.100)$$

Beachte:

- Die obige Unschärfe stellt die intrinsische, statistische Unschärfe bei unabhängiger Messung von \hat{A} und \hat{B} dar. Die Messungen von \hat{A} und \hat{B} beeinflussen einander hier nicht - \hat{A} und \hat{B} werden unabhängig an jeweils unterschiedlichen Repräsentanten des Ensembles im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen und die statischen Schwankungen erfüllen obige Ungleichung.
- Zusätzlich hierzu entsteht typischerweise eine weitere Quelle der Unschärfe, wenn man sowohl \hat{A} als auch \hat{B} gleichzeitig für dieselben Repräsentanten des Ensembles misst, denn diese Messungen beeinflussen einander. Die Unschärfe aufgrund einer solchen gemeinsamen

Messung von \hat{A} und \hat{B} ist typischerweise um einen Faktor 3 größer als obige statistische Unschärfe. Dieser Effekt tritt z.B. beim in vielen phänomenologischen Darstellungen der Unschärferelationen bemühten Heisenberg-Mikroskop auf, bei dem die Messung des Ortes eines Elektrons mittels eines Photons einer bestimmten Wellenlänge unweigerlich den Impuls des Elektrons beeinflusst. Je höher die Frequenz des Photons, desto besser die Ortsauflösung, aber desto schlechter die Impulsauflösung aufgrund des unvermeidbaren Impulsübertrags vom Photon auf das Elektron. Beide Effekte müssen je nach Versuchsanordnung berücksichtigt und gegebenenfalls addiert werden.²

Der **Beweis** der Unschärferelation (1.99) geht wie folgt: Betrachte ein beliebiges $|\psi\rangle$, $\| |\psi\rangle \| = 1$ und definiere

$$|\phi_A\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle, \quad |\phi_B\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle. \quad (1.101)$$

Damit folgt dann:

$$\langle \phi_A | \phi_A \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (1.102)$$

$$= \langle \psi | (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}^2 - \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle = (\Delta A)^2. \quad (1.103)$$

Außerdem gilt mit Hilfe der Schwarz'schen Ungleichung

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \leq \sqrt{|\langle \phi_A | \phi_A \rangle \langle \phi_B | \phi_B \rangle|} = (\Delta A)(\Delta B). \quad (1.104)$$

Nun schätzen wir $|\langle \phi_A | \phi_B \rangle|$ weiter ab. Es gilt:

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| = \sqrt{(\operatorname{Re}\langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2 + (\operatorname{Im}\langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2}. \quad (1.105)$$

Wir müssen nun also Real- und Imaginärteil finden. Wir schreiben zunächst

$$\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \quad (1.106)$$

Wir arbeiten weiter mit der folgenden Idee: Ist \hat{C} hermitesch, so gilt $\langle \hat{C} \rangle \in \mathbb{R}$. Ist \hat{C} anti-hermitesch ($\hat{C}^\dagger = -\hat{C}$) so gilt, dass $\langle \hat{C} \rangle$ rein imaginär ist. Damit ist in unserem Fall $\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \in \mathbb{R}$. Aber: $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ ist weder hermitesch noch anti-hermitesch. Wir schreiben daher:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}). \quad (1.107)$$

Damit können wir nun $\hat{A}\hat{B}$ in einen hermiteschen und einen anti-hermiteschen Anteil zerlegen:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2} \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\text{Kommutator, anti-hermitesch}} + \frac{1}{2} \underbrace{\{\hat{A}, \hat{B}\}}_{\text{Anti-Kommutator, hermitesch}}. \quad (1.108)$$

Es folgt unmittelbar

$$\operatorname{Re}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{\hat{A}, \hat{B}\} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (1.109)$$

$$\operatorname{Im}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle, \quad (1.110)$$

was uns zu

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad \Rightarrow \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (1.111)$$

führt.

²Weitere Details können z.B. in M.G. Raymer "Uncertainty principle for joint measurement of noncommuting variables", Am. J. Phys **62** (11), November 1994, gefunden werden.

1.9 Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion

1.9.1 Unendlich-dimensionale Zustandsräume

Bisher haben wir uns mit endlich-dimensionalen VR beschäftigt. Das Spektrum der Observablen hatte immer endlich viele Werte

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle, \quad \langle a'|a''\rangle = \delta_{a',a''}, \quad (1.112)$$

insofern a' endlich viele diskrete Werte annimmt.

In der Quantenmechanik gibt es auch Observable mit kontinuierlichem Spektrum: z.B. Ort und Impuls eines freien Teilchens.

Sei $\hat{\xi}$ eine solche Observable. Noch immer gilt die Eigenwertgleichung $\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle$, wobei der Eigenwert ξ' kontinuierliche Werte annehmen kann. $\{|\xi'\rangle\}$ stellt die kontinuierliche Eigenbasis von $\hat{\xi}$ dar. Wir verallgemeinern die Eigenschaften der endlichen Eigenbasis:

- Orthogonalität

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a',a''} \rightarrow ? \quad (1.113)$$

$$\text{Idee: } \langle \xi'|\xi''\rangle = 0 \quad \text{für } \xi' \neq \xi'' \quad \text{und} \quad (1.114)$$

$$\sum_{a'} \langle a'|a''\rangle = \sum_{a'} \delta_{a',a''} = 1 \rightarrow \int d\xi' \langle \xi'|\xi''\rangle = 1 \quad (1.115)$$

$$\Rightarrow \langle \xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi' - \xi'') \quad (1.116)$$

- Vollständigkeit

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{1} \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = \mathbb{1} \quad (1.117)$$

- Entwicklung in Basis

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'|\alpha\rangle \quad (1.118)$$

- Normierung

$$\sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1 \rightarrow \int d\xi' |\langle \xi'|\alpha\rangle|^2 = 1 \quad (1.119)$$

- Skalarprodukt

$$\langle \alpha|\beta\rangle = \sum_{a'} \langle \alpha|a'\rangle \langle a'|\beta\rangle \rightarrow \langle \alpha|\beta\rangle = \int d\xi' \langle \alpha|\xi'\rangle \langle \xi'|\beta\rangle \quad (1.120)$$

- Matrixelemente

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle = a'\delta_{a',a''} \rightarrow \langle \xi''|\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'\delta(\xi' - \xi'') \quad (1.121)$$

Unendlich-dimensionale VR in der Quantenmechanik haben eine weitere Struktur - die der *Vollständigkeit*:

Definition 1.20. Sei V ein normierter VR. Betrachte eine Folge $(|x_1\rangle, |x_2\rangle, \dots)$ von Vektoren. Die Folge konvergiert gegen $|x\rangle \in V$, wenn

$$\forall \epsilon > 0 \exists n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x\rangle \| < \epsilon \quad \forall n \geq n_0. \quad (1.122)$$

Notwendige Bedingung ist, dass der Abstand zwischen den Folgeelementen immer kleiner wird im Sinne der Cauchy-Folge:

$$\forall \epsilon > 0 \exists n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x_m\rangle \| < \epsilon \quad \forall n, m \geq n_0. \quad (1.123)$$

Eine Cauchy-Folge konvergiert, aber der Limes muss nicht unbedingt im VR liegen.

Definition 1.21. Ein normierter VR V heißt vollständig, wenn jede Cauchy-Folge gegen ein Element $|x\rangle \in V$ konvergiert.

Definition 1.22. Ein normierter, vollständiger VR heißt Banach-Raum.

Definition 1.23. Ein Banach-Raum, dessen Norm durch ein Skalarprodukt induziert ist, heißt Hilbertraum.

Wir weisen darauf hin, dass ein endlich-dimensionaler, unitärer VR immer ein Hilbertraum ist. Für ∞ -dimensionale, unitäre VR muss dies nicht gelten. In der Quantenmechanik fordern wir, dass der VR vollständig ist. Andernfalls könnte eine Folge von Operationen an einem Zustand aus dem Zustandsraum führen, was physikalisch unsinnig ist.

Postulat 1 (endgültig)

Der quantenmechanische Zustandsraum ist ein Hilbertraum.

1.9.2 Der quantenmechanische Ortsraum

Betrachte ein freies Teilchen im 1-dimensionalen Raum \mathbb{R} :

- \hat{x} : Observable des Ortes für ein Teilchen
- $|x'\rangle$: Eigenzustand zu \hat{x} : $\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle$
- $|x'\rangle \leftrightarrow$ Teilchen ideal lokalisiert bei x' : $\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'')$

Ein allgemeiner Zustand ist gegeben durch

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\text{Koeffizienten}} \quad (1.124)$$

Betrachten wir eine idealisierte Messung: Der Detektor klickt nur bei Lokalisierung bei x' . Dies führt zum "Kollaps" auf Eigenfunktion

$$|\alpha\rangle \rightarrow |x'\rangle. \quad (1.125)$$

Realistischer ist der Fall, dass der Detektor klickt bei einer Messung im Intervall $[x' - \Delta/2, x' + \Delta/2]$. Bei dieser Messung kollabiert

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \rightarrow \int_{x' - \Delta/2}^{x' + \Delta/2} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \quad (1.126)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Intervall $[x' - dx, x' + dx]$ aufhält ist dann

$$P = |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx \quad (dx \text{ infinitesimal}). \quad (1.127)$$

Insbesondere beträgt die Wahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo im Raum zu finden

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = 1. \quad (1.128)$$

Dies stimmt überein mit der Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|\alpha\rangle$ zu messen, wenn der Zustand $|\alpha\rangle$ präpariert wurde:

$$1 = \langle \alpha|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle. \quad (1.129)$$

1.9.3 Der Begriff der Wellenfunktion

Wir interpretieren $\langle x'|\alpha\rangle$ wie folgt:

$\forall x'$ ist $\langle x'|\alpha\rangle \in \mathbb{C}$, d.h. $\langle \cdot|\alpha\rangle$ ist eine Funktion $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$.

Definition 1.24. Die Größe $\langle x'|\alpha\rangle$ ist die zum Zustand $|\alpha\rangle$ gehörige Wellenfunktion im Ortsraum:

$$\psi_\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad x' \mapsto \psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle. \quad (1.130)$$

$\psi_\alpha(x)$ stellt die Koeffizienten des Zustandes $|\alpha\rangle$ bezüglich der Orts-Eigenbasis dar:

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \psi_\alpha(x') \quad (1.131)$$

Wir vergleichen dies mit dem endlich-dimensionalen Fall:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|\alpha\rangle = \sum_i |e_i\rangle \alpha_i. \quad (1.132)$$

Wir können damit gegenüberstellen:

$$\text{Label } i \text{ der ONB } \{|e_i\rangle\} \leftrightarrow \text{Label } x' \text{ der ONB } \{|x'\rangle\}. \quad (1.133)$$

Der gesamte bisherige Formalismus kann mithilfe der Wellenfunktion umgeschrieben werden

- Zustand: $|\alpha\rangle \leftrightarrow \psi_\alpha(x)$
- Skalarprodukt: $\langle \beta|\alpha\rangle = \int dx' \langle \alpha|x'\rangle \langle x'|\beta\rangle = \int dx' \psi_\alpha^*(x') \psi_\beta(x')$
- Norm: $\langle \alpha|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\alpha^*(x') \psi_\alpha(x') = \int dx' |\psi_\alpha(x')|^2$
- Matricelement: $\langle \beta|\hat{A}|\alpha\rangle = \int dx' dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x'|\hat{A}|x''\rangle \psi_\alpha(x'')$.
Insbesondere gilt für Observable der Form $\hat{A} = f(\hat{x})$ wegen $\langle x'|f(\hat{x})|x''\rangle = f(x'')\delta(x' - x'') \Rightarrow \langle \beta|\hat{A}|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x')$.

Beachte: Da $\|\alpha\| < \infty$ für einen Zustand im unitären VR ist $\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{\alpha}(x)|^2 < \infty$.

Theorem 1.1. *Der Raum $L^2(\mathbb{R})$ der quadratintegrierbaren Funktionen $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ bildet einen Hilbertraum bezüglich des Skalarproduktes $(\psi, \phi) = \int dx \psi^*(x)\phi(x)$.*

Für einen Beweis dieses nichttrivialen Theorems verweisen wir auf die Methoden der Funktionalanalysis.

Beispiel: Wir wollen die Wellenfunktion zum Ortseigenket $|x'\rangle$ finden. Es gilt:

$$\forall |\alpha\rangle : \langle x'|\alpha\rangle = \psi_{\alpha}(x') \quad (1.134)$$

Auf der anderen Seite gilt aber auch

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int dx \langle x'|x\rangle \langle x|\alpha\rangle = \int dx \psi_{x'}^*(x) \psi_{\alpha}(x). \quad (1.135)$$

Damit folgt sofort $\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$.

Beachte: Die Deltadistribution stellt kein Element von $L^2(\mathbb{R})$ dar. In diesem Sinne ist der Orts-Eigenzustand ein uneigentlicher Zustand. Dennoch wird der Ortseigenzustand mit zum Zustandsraum genommen. Oftmals allerdings bedarf es einer sorgfältigen Regularisierung der Deltafunktion, um mit diesem korrekt umzugehen. Beispiele hierfür werden wir in den Übungen kennenlernen.

1.10 Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen

1.10.1 Aktive Translationen

Unser Ziel ist es die *Wirkung des Impulsoperators* auf einen gegebenen Zustand $|\alpha\rangle = \int dx |x\rangle \psi_{\alpha}(x)$ zu finden. Aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass der *Impuls* der *Generator von Ortstranslationen* ist. Wir suchen deshalb zunächst eine Darstellung des Translationsoperators \hat{T} auf $|\alpha\rangle$. Wir unterscheiden:

- passive Transformationen, bei den das physikalische System gleich bleibt, während die Koordinaten transformiert werden versus
- aktive Transformationen, bei denen das physikalische System transformiert wird.

Wir betrachten *aktive Translationen* und definieren den Translationsoperator

$$\hat{T}(\Delta x) : \text{Zustand bei } x \mapsto \text{Zustand bei } x + \Delta x \quad (1.136)$$

$$\hat{T}(\Delta x) |x\rangle = |x + \Delta x\rangle \quad (1.137)$$

Berechnen wir also die Wellenfunktion zu $|x + \Delta x\rangle$:

$$|x + \Delta x\rangle = \hat{T}(\Delta x) |x\rangle \quad (1.138)$$

$$= \hat{T}(\Delta x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|x\rangle \quad (1.139)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \hat{T}(\Delta x) |x'\rangle \langle x'|x\rangle \quad (1.140)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x' + \Delta x\rangle \langle x'|x\rangle \quad (1.141)$$

Mit $x'' = x' + \Delta x$ erhalten wir daraus ... = $\int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x'' - \Delta x|x\rangle$. Damit folgern wir

$$|x + \Delta x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x' - \Delta x|x\rangle}_{\psi_x(x' - \Delta x)}, \text{ was dann} \quad (1.142)$$

$$\hat{T}(\Delta x)\psi(x) = \psi(x - \Delta x)$$

bedeutet.

1.10.2 Translationen als Lie-Gruppe

Die Translationen $\hat{T}(\Delta x)$ bilden eine *einparametrische kontinuierliche Gruppe* bezüglich der Hintereinanderausführung (Multiplikation):

- Gruppeneigenschaft:
 - Abgeschlossenheit: $\hat{T}(\Delta x) \cdot \hat{T}(\Delta x') = \hat{T}(\Delta x'')$ mit $\Delta x'' = \Delta x + \Delta x'$
 - Assoziativität: $(\hat{T}(\Delta x)\hat{T}(\Delta x'))\hat{T}(\Delta x'') = \hat{T}(\Delta x)(\hat{T}(\Delta x')\hat{T}(\Delta x''))$
 - Existenz des Inversen: $[\hat{T}(\Delta x)]^{-1} = \hat{T}(-\Delta x)$
 - Existenz der Eins: $\hat{T}(0) = \mathbb{1}$
- Die Eigenschaft der *einparametrischen, kontinuierlichen Gruppe* bedeutet, dass $\hat{T}(\Delta x)$ durch einen Parameter $\Delta x \in \mathbb{R}$ bestimmt, so dass insbesondere die Verknüpfungsregel $\hat{T}(\Delta x) \cdot \hat{T}(\Delta x') = \hat{T}(\Delta x'')$ mit $\Delta x'' = \Delta x + \Delta x'$ gilt. $\hat{T}(\Delta x)$ hängt ferner stetig von Δx ab. Insbesondere gilt $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \hat{T}(\Delta x) = \mathbb{1}$.

Kontinuierliche Gruppen mit diesen Eigenschaften heißen *Lie-Gruppen*. Wir werden sie im Zusammenhang mit dem Konzept der Drehung und des Drehimpulses noch eingehend studieren.

$\hat{T}(\Delta x)$ ist ferner *unitär*, denn wir fordern, dass die Normierung eines Zustands unter Wirkung von $\hat{T}(\Delta x)$ erhalten bleibt:

$$(\hat{T}(\Delta x) |\alpha\rangle, \hat{T}(\Delta x) |\alpha\rangle) = (|\alpha\rangle, |\alpha\rangle). \quad (1.143)$$

Das bedeutet

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{T}^\dagger(\Delta x) = \mathbb{1}, \quad \text{d.h.} \quad \hat{T}^\dagger(\Delta x) = [\hat{T}(\Delta x)]^{-1}. \quad (1.144)$$

Betrachten wir nun also *infinitesimale* Transformationen

$$\hat{T}(dx) = \mathbb{1} - i\hat{K}dx + O(dx^2). \quad (1.145)$$

Wenn $\hat{K}^\dagger = \hat{K}$ gilt, erfüllt $\hat{T}(dx)$ alle obigen Eigenschaften:

$$\hat{T}(dx) \text{ unitär} \leftrightarrow \hat{K} \text{ hermitesch.} \quad (1.146)$$

Der Operator $\hat{K}^\dagger = \hat{K}$ generiert die Gruppe der Translationen in obigem Sinne.

Wir merken an dieser Stelle an, dass eine Translation um ein endliches Δx aus Abfolge infinitesimaler Translationen zusammengesetzt werden kann:

$$\hat{T}(\Delta x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i\hat{K} \frac{\Delta x}{N} \right)^N, \quad (1.147)$$

was bedeutet:

$$\hat{T}(\Delta x) = \exp(-i\hat{K}\Delta x) \quad (T^{-1} = T^\dagger \Leftrightarrow K^\dagger = K) \quad (1.148)$$

Nun wollen wir die Kommutationsrelation mit dem Ortsoperator \hat{x} finden:

$$[\hat{x}, \hat{T}(\Delta x)] = ? \quad (1.149)$$

Dazu berechnen wir:

$$\hat{x}\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = \hat{x}|x' + \Delta x\rangle = (x' + \Delta x)|x' + \Delta x\rangle, \quad (1.150)$$

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{x}|x'\rangle = x'\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = x'|x' + \Delta x\rangle. \quad (1.151)$$

Wir übertragen unser Ergebnis auf den Fall infinitesimaler Translationen ($\Delta x \rightarrow dx$):

$$(\hat{x}\hat{T}(dx) - \hat{T}(dx)\hat{x})|x'\rangle = dx|x'\rangle + O(dx^2) \quad \Longrightarrow \quad [\hat{x}, \hat{T}(dx)] = dx\mathbb{1} = dx. \quad (1.152)$$

Da $\hat{T} = 1 - i\hat{K}dx$ infinitesimal ist, folgt

$$[\hat{x}, \hat{K}] = i. \quad (1.153)$$

1.10.3 Der Impuls als Generator der Translationen

Wir haben gerade etabliert, dass der hermitesche Operator \hat{K} mit $[\hat{x}, \hat{K}] = i$ der Generator der Translationen in der Quantenmechanik ist. Wie schon angedeutet ist *klassisch* aber der Impuls der Generator der Translationen, im folgenden Sinne:

- Betrachte den klassischen Phasenraum (q, p) mit der Poissonklammer $\{, \}$:

$$\{A(q, p), B(q, p)\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}. \quad (1.154)$$

- Unter einer aktiven Translation um Δq transformiert eine Funktion $F(q, p)$ wie³

$$F(q, p) \mapsto \tilde{F}(p, q) = F(q + \Delta q, p). \quad (1.155)$$

Im infinitesimalen Fall bedeutet das

$$\tilde{F}(q, p) = \left(1 + dq \frac{\partial}{\partial q}\right) F(q, p) = F + \delta F \quad (1.156)$$

mit $\delta F = \{F, Q\}$ für $Q = p$.

Dies legt eine *Identifikation der Observablen* p mit dem *hermiteschen Operator* \hat{K} - dem Generator der Translationen nahe. Beachten wir allerdings:

- Ein *Beweis* dieses Zusammenhangs in der QM ist nicht möglich. Vielmehr gehen wir auch hier wieder heuristisch vor: Wir versuchen, die Strukturen aus der Klassischen Mechanik so gut wie möglich auf die QM zu übertragen. Die Sinnhaftigkeit dieser Übertragung muss sich dann ex post zeigen.
- Eine genauere Begründung für die Identifikation von \hat{p} mit dem Generator der Translationen hierfür bedarf einer Definition der Translation angewendet auf Operatoren (bisher hat unser Translationsoperator nur auf Zustände gewirkt!). Wir kommen später mit der Einführung des Heisenbergbildes darauf zurück (siehe Diskussion um Gl. (2.102)).
- \hat{p} und \hat{K} tragen unterschiedliche Einheiten:

$$\psi(x-dx) = (\mathbb{1} - id_x \hat{K})\psi(x), \quad [\hat{K}] = \frac{1}{[\text{Länge}]}, \quad [\text{Impuls}] = \frac{[\text{Wirkung}]}{[\text{Länge}]} = \frac{Js}{m} \quad (1.157)$$

Es bedarf einer fundamentalen Naturkonstanten mit Einheiten einer Wirkung zur Umrechnung:

$$\hat{p} = \hbar \hat{K}, \quad [\hbar] = \text{Wirkung} \quad (1.158)$$

An dieser Stelle ist \hbar eine beliebige Grösse mit obigen Einheiten. Eine physikalische Interpretation von \hbar werden wir bald finden und somit \hbar in eine messbare Konstante verwandeln.

Wegen (1.153) gilt die kanonische Kommutatorrelation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (1.159)$$

Als Anwendung der allgemeinen Unschärferelation (1.99) finden wir damit, dass Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf messbar sein können:

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Heisenberg'sche Unschärferelation.

$$(1.160)$$

³Dass $F(q, p) \mapsto \tilde{F}(p, q) = F(q + \Delta q, p)$ das korrekte Transformationsverhalten unter aktiven Transformationen ist wird offensichtlich, wenn man z.B. q selbst betrachtet: $q \rightarrow q + \Delta q$. Dies ist zu unterscheiden vom besprochenen Verhalten der Wellenfunktion unter einer aktiven Translation, $\psi(x) \rightarrow \psi(x - \Delta x)$, welche natürlich keine klassische Entsprechung hat.

1.10.4 Kanonische Kommutatorrelationen und Kanonische Quantisierung

Betrachte $\psi(x_i)$ mit z.B. $i = 1, 2, 3$ und x_i die Koordinaten des 3-dimensionalen euklidischen Raumes. Um die Relation (1.159) zu verallgemeinern bedenken wir:

- Der Ortsoperator in x_i -Richtung und der Translationsoperator in x_j -Richtung sind unabhängig voneinander für $i \neq j$. Deshalb gilt

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (1.161)$$

- Translationen in i - und j -Richtung kommutieren: $[\hat{T}(\Delta x_i), \hat{T}(\Delta x_j)] = 0$. Daraus folgt

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.162)$$

Wir fassen unsere Erkenntnisse in den *kanonischen Kommutatorrelationen* zusammen,

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.163)$$

Beachte, dass diese, wie oben hergeleitet, direkt aus der wohl motivierten Identifizierung von \hat{p} mit dem Generator der Translationen folgen.

Die Kommutatorrelationen erinnern uns an die *klassischen Poissonbracket-Relationen* der kanonischen Phasenraumkoordinaten (q_i, p_j) ,

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad (1.164)$$

Wir stellen fest, dass die quantenmechanischen Kommutatorrelationen aus den klassischen Poisson-Bracket-Relationen durch die Ersetzung

$$[,]^{\text{QM}} \equiv \{, \}_{\text{P.B.}} \cdot i\hbar \quad (1.165)$$

folgen (bzw. durch Ersetzung $\{, \}_{\text{P.B.}} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[,]$). Diese Vorgehensweise heißt *kanonische Quantisierung*:

$$\text{Klassische Phasenraumkoordinaten} \mapsto \text{QM Operator (Observable) mit } [,] = i\hbar\{, \}_{\text{P.B.}}. \quad (1.166)$$

In den Übungen werden wir sehen, dass die Ersetzung klassischer Funktionen auf dem Phasenraum durch nicht-kommutierenden Operatoren den Zusammenhang $[,] = i\hbar\{, \}_{\text{P.B.}}$ erzwingt. Diese Erkenntnis kann auch als eine alternative Herleitung der Relationen (1.163) dienen. Abschließend wollen wir den Ursprung des Faktors $i\hbar$ noch verstehen:

- $\{f, g\}_{\text{P.B.}}$ ist reell, falls f, g reell, aber $[\hat{f}, \hat{g}]$ ist antihermitesch, falls \hat{f}, \hat{g} hermitesch. Deshalb benötigt man einen Faktor i .
- $\{, \} \approx \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}$, deshalb ist der Faktor \hbar aus Einheitengründen nötig.

1.10.5 Darstellung von \hat{p} im Ortsraum

Betrachte den infinitesimalen Translationsoperator in einer Dimension,

$$\hat{T}(\delta x) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \delta x, \quad \delta x : \text{infinitesimal.} \quad (1.167)$$

Wir berechnen seine

- Wirkung auf den Zustand $|\alpha\rangle$:

Wir starten mit

$$\hat{T}(\delta x) |\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x' - \delta x | \alpha \rangle. \quad (1.168)$$

Eine Taylor-Entwicklung erlaubt uns zu schreiben

$$\langle x' - \delta x | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha \rangle - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle + \dots \quad (1.169)$$

oder gleichbedeutend

$$\psi_\alpha(x' - \delta x) = \psi_\alpha(x') - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \psi_\alpha(x') + \dots \quad (\text{Taylor-Entwicklung}). \quad (1.170)$$

Damit erhalten wir $(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}) |\alpha\rangle = \underbrace{\int dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle}_{|\alpha\rangle} - \delta x \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle$ und folgern

$$\hat{p} |\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar \partial_{x'}) \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.171)$$

- Wirkung auf Wellenfunktionen:

Aus $\hat{T}(\delta x) \psi_\alpha(x) = \psi_\alpha(x - \delta x) = \psi_\alpha(x) - \delta x \frac{\partial}{\partial x} \psi_\alpha(x)$ folgt

$$\hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (1.172)$$

Insbesondere gilt

$$\langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') (-i\hbar \partial_{x'}) \psi_\alpha(x'). \quad (1.173)$$

1.11 Wellenfunktionen im Impulsraum

1.11.1 Wellenfunktion der Impulseigenzustände

Wie für den Ortsraum betrachten wir eine Basis aus Eigenzuständen von \hat{p} (zunächst ein-dimensional),

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle, \quad \langle p' | p \rangle = \delta(p - p'). \quad (1.174)$$

Genau wie im Ortsraum können wir einen Zustand $|\alpha\rangle$ in dieser Eigenbasis entwickeln,

$$|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \underbrace{\phi_\alpha(p)}_{\text{Wellenfunktion im Impulsraum}}. \quad (1.175)$$

Wir suchen jetzt den Zusammenhang zwischen $|x\rangle$ und $|p\rangle$. Insbesondere möchten wir $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ berechnen. Dies entspricht der Wellenfunktion des Impulseigenzustands $|p\rangle$ in der Ortsdarstellung. Aus (1.171) gewinnen wir durch Multiplikation beider Seiten mit $\langle x|$, dass

$$\forall |\alpha\rangle: \quad \langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|\alpha\rangle. \quad (1.176)$$

Für $|\alpha\rangle = |p\rangle$ folgt daraus sofort

$$p\langle x|p\rangle = \langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|p\rangle. \quad (1.177)$$

$$(1.178)$$

Beachte den Unterschied zwischen der reellen Zahl p und dem Operator \hat{p} in dieser Gleichung. Wir erhalten damit eine DGL für $\langle x|p\rangle$:

$$\partial_x\langle x|p\rangle = \frac{i}{\hbar}p\langle x|p\rangle \quad (1.179)$$

mit Lösung $\langle x|p\rangle = N \exp(\frac{i}{\hbar}px)$ (N ist eine Normierungskonstante).

Wir halten fest: Der Eigenzustand $|p\rangle$ mit festem Impuls p ist eine ebene Welle im Ortsraum.

Bestimmen wir nun noch die Normierung. Wir wählen sie dergestalt, dass die Normierung $\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'')$ gilt. Nun berechnen wir

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|x''\rangle \quad (1.180)$$

$$= \int dp' |N|^2 \exp(\frac{i}{\hbar}p'(x' - x'')). \quad (1.181)$$

Verwenden wir $\int dk e^{ikx} = 2\pi\delta(x)$, so erhalten wir $\langle x'|x''\rangle = 2\pi\hbar|N|^2\delta(x' - x'')$. Damit $\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'')$ muss $|N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$. So kommen wir zu dem wichtigen Ergebnis

$$\langle x|p\rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}. \quad (1.182)$$

1.11.2 Zusammenhang von $\psi_\alpha(x) \leftrightarrow \phi_\alpha(p)$ für beliebiges $|\alpha\rangle$

Wir suchen nun die Transformation, welche einem Basiswechsel vom Ortsraum in den Impulsraum entspricht. Durch Einfügen der $\mathbb{1}$ können wir schreiben

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\alpha\rangle. \quad (1.183)$$

Mithilfe des soeben berechneten Zusammenhangs (1.182) und $\langle p|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p)$ wird daraus

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \phi_\alpha(p). \quad (1.184)$$

Ebenso berechnen wir $\phi_\alpha(p) = \langle p|\alpha\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\alpha\rangle$, woraus wir

$$\phi_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi_\alpha(x) \quad (1.185)$$

ablesen. Damit stellen wir fest, dass die Wellenfunktionen im Orts- und Impulsraum durch eine Fouriertransformation ineinander übergeführt werden,

$$\psi_\alpha(x) \xrightarrow{\text{Fouriertransformation}} \phi_\alpha(p). \quad (1.186)$$

Kommentare

- Dieser “magische” Zusammenhang folgt allein aus den kanonischen Kommutatorrelationen: Die Relation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ wird erfüllt von $\hat{p} = i\hbar\partial_x$, und daraus folgt unmittelbar $\langle x|p\rangle \sim e^{\frac{i}{\hbar}px}$, was wiederum sofort auf die Fouriertransformation führt. Dieser Zusammenhang wird deshalb allgemeiner auftreten, wann immer $[\hat{A}, \hat{B}] = i \cdot c$, wobei c eine Konstante ist.
- Was ist nun die physikalische Bedeutung von \hbar ? Die Wellenfunktion eines Impulseigenzustands lässt sich, wie wir gesehen haben, schreiben als

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}, \quad \text{mit } k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.187)$$

Dies impliziert die Entsprechung

$$\text{Teilchen mit Impuls } p \leftrightarrow \text{Ebene Welle mit Wellenzahl } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad (1.188)$$

Diese Beziehung ist nichts anderes als die DeBroglie-Relation für Materiewellen,

$$p = \hbar k. \quad (1.189)$$

Dies kann in Experimenten, etwa Elektronenstreuung an Gittern, experimentell untersucht werden. Dies erlaubt im Prinzip die Messung von $\hbar = \frac{1}{2\pi}h = \frac{1}{2\pi}6.67 \times 10^{-34} Js$.

- Umgekehrt kann man \hat{x} im Impulsraum darstellen:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \quad (1.190)$$

$$\hat{x}|p\rangle = +i\hbar\partial_p|p\rangle. \quad (1.191)$$

Obige Relationen für ein-dimensionale Systems können sofort auf \mathbb{R}^3 verallgemeinert werden,

$$\hat{\vec{x}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle, \quad \langle\vec{x}|\vec{x}'\rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'), \quad \hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle \quad (1.192)$$

und

$$\int d^3x |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \hat{\vec{p}}|\vec{x}\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}_x|\vec{x}\rangle. \quad (1.193)$$

Wir erhalten daraus

$$\psi_\alpha(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \phi_\alpha(\vec{p}) \quad (1.194)$$

$$\phi_\alpha(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \psi_\alpha(\vec{x}) \quad (1.195)$$

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \quad (1.196)$$

1.11.3 Beispiel: Gauß'sche Wellenfunktion

Wir betrachten einen Zustand mit Wellenfunktion im Ortsraum

$$\psi_\alpha(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + ikx}, \quad a \in \mathbb{R}^+. \quad (1.197)$$

In den Übungen werden wir folgende Erwartungswerte berechnen:

- $\langle \hat{x} \rangle = 0$,
- $\langle \hat{x}^2 \rangle = (\Delta x)^2 = \frac{1}{2a}$,
- $\langle \hat{p} \rangle = \hbar k$,
- $\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{a\hbar^2}{2} + \hbar^2 k^2$.

Daraus folgt sofort

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.198)$$

Dies bedeutet, dass $\psi_\alpha(x)$ *minimale* Unschärfe hat ($\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$). Man kann zeigen, dass dies die einzige Wellenfunktion ist, welche die Unschärfeungleichung saturiert.

Wir beobachten ferner, z.B. durch expliziten Vergleich der Wellenfunktionen im Orts- und Impulsraum, den Zusammenhang

$$\text{Lokalisierung im Ortsraum-Raum} \quad \leftrightarrow \quad \text{Delokalisierung im Impulsraum} \quad (1.199)$$

$$\Delta x \rightarrow 0 \quad \leftrightarrow \quad \Delta p \rightarrow \infty \quad (1.200)$$

Anders ausgedrückt:

$$|\alpha\rangle \text{ stark lokalisiert im } x\text{-Raum} \quad \leftrightarrow \quad \phi_\alpha(p) \text{ signifikant über weiten Impuls-/Wellenzahlbereich} \quad (1.201)$$

D.h. ein im Ortsraum stark lokalisierter Zustand entspricht im Impulsraum einem Wellenpaket, welches Beiträge von vielen verschiedenen Wellenzahlen bzw. Impulswerten erhält. Dieser Zusammenhang ist uns natürlich aus der Theorie der Fouriertransformationen wohlvertraut.

Kapitel 2

Quantendynamik

2.1 Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung

Gegeben sei ein Zustand $|\alpha\rangle$ zur Zeit t_0 , geschrieben im folgenden als $|\alpha, t_0\rangle$. Wir wollen nun analysieren, in welchem Zustand sich das System zur Zeit t befindet. Wir parametrisieren dazu die Zeitabhängigkeit, indem wir den Zustand zur Zeit t als $|\alpha, t_0; t\rangle$ schreiben. Insbesondere gilt in dieser Notation

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle. \quad (2.1)$$

Beachte: Anders als der Ort fungiert die Zeit in der Quantenmechanik nur als reeller Parameter, von dem Zustände abhängen, und nicht als Observable im üblichen Sinne von Postulat 2 der Quantenmechanik.¹ Insofern ist die Formulierung der Quantenmechanik, die wir gerade kennenlernen, nicht kovariant. In der relativistischen Version der Theorie, der Quantenfeldtheorie, stellt auch der Ort keinen Operator, sondern nur noch einen Parameter der Quantenfelder dar.

Der Übergang $|\alpha, t_0\rangle \rightarrow |\alpha, t_0; t\rangle$ wird durch den *Zeitentwicklungsoperator* $\hat{U}(t, t_0)$ beschrieben,

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle. \quad (2.2)$$

Dies ist *ähnlich* zur Wirkung des Translationsoperators $\hat{T}(\Delta x)$ auf Zustände, allerdings mit dem konzeptionellen Unterschied, dass t , wie angedeutet, nur einen Parameter des Zustands darstellt, der Ort \hat{x} hingegen eine Observable ist und x somit Ortseigenwert des Zustands $|x\rangle$. Ähnlich wie für $\hat{T}(\Delta x)$ konstatieren wir folgende wichtige Eigenschaften:

- Unitarität: $\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1}$, damit die die Normierung des Zustands erhalten bleibt:

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \quad \rightarrow \quad \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1, \quad (2.3)$$

- Verknüpfungsgesetz: $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$, wobei $t_0 \leq t_1 \leq t_2$,

¹Ein Zeitoperator \hat{t} sollte kanonisch konjugiert sein zum Hamilton-Operator im Sinne von $[H, \hat{t}] = i\hbar$. W. Pauli hat bewiesen, dass ein solcher Operator nicht selbst-adjungiert sein kann, denn dies würde der Existenz eines minimalen Energie-Eigenwertes widersprechen. Allerdings kann ein Operator \hat{t} definiert werden, der schwächere Eigenschaften erfüllen (insbesondere Hermitizität). Eine Diskussion, inwieweit dies ausreicht, um einen Zeitoperator sinnvoll zu definieren, findet sich z.B. in V. S. Olkhovsky, Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy, and Foundations of Self-Consistent Time Analysis of Quantum Processes, Advances in Mathematical Physics, vol. 2009, Article ID 859710, 83 pages, 2009. doi:10.1155/2009/859710, <http://www.hindawi.com/journals/amp/2009/859710/cta/>

- Stetigkeit: $\lim_{dt \rightarrow 0} \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} = \hat{U}(t_0, t_0)$.

Für infinitesimales dt entwickeln wir $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$ zu erster Ordnung in dt ,

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i \Omega dt. \quad (2.4)$$

Dies erfüllt alle obigen Eigenschaften, falls $\hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}$. $\hat{\Omega}$ generiert also die Zeittranslation um dt . Wie im Kontext von \hat{T} und dem Impuls erraten wir heuristisch eine sinnvolle Interpretation von $\hat{\Omega}$, indem wir uns an der klassischen Dynamik orientieren: *Klassisch* generiert die Hamiltonfunktion die Zeittranslation. Wir identifizieren deshalb

$$\hat{\Omega} \leftrightarrow H \quad H \text{ Observable der Energie.} \quad (2.5)$$

Eine Einheitenbetrachtung zeigt $[\hat{\Omega}] = \frac{1}{\text{Zeit}}$, $[H] = \frac{\text{Wirkung}}{\text{Zeit}}$. Daraus folgt, dass wieder eine Konstante mit Einheit einer Wirkung zur Umrechnung einzufügen ist:

$$\hat{\Omega} = \frac{1}{\hbar} H \quad (2.6)$$

Bemerkung: Die Konstanten in $\hat{K} = \frac{\hat{p}}{\hbar}$ und $\hat{\Omega} = \frac{H}{\hbar}$ müssen a priori nicht die selben sein. Dass dies, wie die Notation andeutet, so ist, ergibt sich später aus den quantenmechanischen Bewegungsgleichungen.

Zur Herleitung der bestimmenden Gleichung für $\hat{U}(t, t_0)$ betrachten wir die Evolution

$$t_0 \xrightarrow{\hat{U}(t, t_0)} t \xrightarrow{\hat{U}(t+dt, t)} t + dt, \quad (2.7)$$

was

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) \hat{U}(t, t_0) \quad (2.8)$$

entspricht. Wir führen eine Taylorentwicklung durch,

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t, t_0) + dt \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0), \quad (2.9)$$

die uns zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = H \hat{U}(t, t_0) \quad (2.10)$$

führt. Mit der Gleichung $|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0; t\rangle$ erhalten wir daraus die **Schrödingergleichung für die Zeitentwicklung eines Zustands**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle. \quad (2.11)$$

Die Gleichung (2.10) für $\hat{U}(t, t_0)$ mit der Randbedingung $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ kann allgemein gelöst werden:

- Falls H konstant in t ist, gilt einfach $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$.

- Falls $H = H(t)$ schreiben wir (2.10) um als Integralgleichung,

$$\underbrace{\int_{t_0}^t dt' i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t', t_0)}_{i\hbar[\hat{U}(t, t_0) - \mathbb{1}]} = \int_{t_0}^t dt' H(t') \hat{U}(t', t_0), \quad (2.12)$$

was uns auf

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \hat{U}(t', t_0) \quad (2.13)$$

führt.

Nun können wir die linke Seite in die rechte einsetzen und dies iterativ wiederholen. So findet man die *Dyson-Reihe*

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n). \quad (2.14)$$

In den Übungen werden wir beweisen, dass das in (2.14) gegebene $\hat{U}(t, t_0)$ in der Tat die Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = H(t) \hat{U}(t, t_0) \quad \text{mit} \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad (2.15)$$

erfüllt.

Im Spezialfall $[H(t_i), H(t_j)] = 0 \quad \forall t_i, t_j$ vereinfacht sich (2.14) zu

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')}. \quad (2.16)$$

Bemerkungen:

- Die Schrödingergleichung (SG) ist eine *lineare* Differentialgleichung (DGL) *erster Ordnung* in t . Zu ihrer Lösung benötigt man als Anfangswert also nur den Zustand zur Zeit $t = t_0, |\alpha, t_0\rangle$. (Vgl. dagegen das Newton'sche Gesetz: $m\ddot{x} = F \Rightarrow x(t_0)$ und $\dot{x}(t_0)$ sind erforderlich.)
- Die Zeitentwicklung des Zustands $|\alpha\rangle$ unter der SG ist *völlig deterministisch*. Der probabilistische Charakter der Quantenmechanik kommt erst durch den Messprozess zustande. Das ungestört Teilchen propagiert deterministisch.

Im folgenden betrachten wir $H = \text{konst.}$ in der Zeit. Von besonderem Interesse sind die *Energie-Eigenzustände*:

Sei \hat{A} ein Operator so dass $[\hat{A}, H] = 0$ mit normierter Eigenbasis $\{|a'\rangle\}$, die auch Eigenbasis von H ist:

$$H |a'\rangle = E_{a'} |a'\rangle, \quad \hat{A} |a'\rangle = a' |a'\rangle. \quad (2.17)$$

- Betrachte die Zeitentwicklung der $|a'\rangle$:

$$\text{Sei } |\alpha, t_0\rangle = |a'\rangle \quad \Rightarrow |\alpha, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |a'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} |a'\rangle. \quad (2.18)$$

Das bedeutet, dass sich die Energie-Eigenzustände nur um eine gesamte Phase ändern. Insbesondere gilt für den Erwartungswert bzgl. eines beliebigen Operators \hat{B} :

$$\langle a' | \hat{B} | a' \rangle \rightarrow \langle a' | e^{\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} \hat{B} e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} | a' \rangle = \langle a' | \hat{B} | a' \rangle \quad (2.19)$$

Ein Energieeigenzustand $|a'\rangle$ heißt deshalb *stationärer Zustand*.

- Betrachte nun ein allgemeines $|\alpha\rangle$. Dieses entwickeln wir in $|a'\rangle$,

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle. \quad (2.20)$$

Der Zustand zur Zeit t ist dann

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t) |a'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle \quad (2.21)$$

$$= \sum_{a'} c_{a'}(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} |a'\rangle \quad (2.22)$$

mit $c_{a'}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} c_{a'}(t_0)$. Dies ist ein *nicht-stationärer Zustand*.

Wir formulieren folgende **allgemeine Lösungsstrategie**:

- Entwickle $|\alpha, t_0\rangle$ in Eigenbasis von H :

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle. \quad (2.23)$$

- Der Zustand zur Zeit t ist $|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t) |a'\rangle$ mit $c_{a'}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} c_{a'}(t_0)$.

Als Check können wir rückwärts rechnen und erhalten, wie erwartet,

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} |a'\rangle \quad (2.24)$$

$$= \sum_{a'} \langle a' | \alpha, t_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} |a'\rangle \quad (2.25)$$

$$= \sum_{a'} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |a'\rangle \langle a' | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.26)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle \quad (2.27)$$

$$= \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle. \quad (2.28)$$

2.2 Schrödinger-Gleichung für Wellenfunktionen und Propagator

Wir können die Schrödinger-Gleichung (SG)

$$i\hbar\partial_t |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.29)$$

in eine Gleichung für $\psi_{\alpha, t_0}(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \alpha, t_0; t \rangle$ umschreiben. Im einfachsten Fall eines *zeitunabhängigen* Hamiltonoperators nimmt H die Form an

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (2.30)$$

Hier ist $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ der Operator der kinetischen Energie und $V(\hat{x})$ der Operator der potentiellen Energie. Nun werten wir die Schrödinger-Gleichung in der Form $\langle \vec{x} | i\hbar\partial_t |\alpha, t_0; t\rangle = \langle \vec{x} | H |\alpha, t_0; t\rangle$ aus mithilfe von

$$\langle \vec{x} | \hat{p} |\alpha, t_0; t\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t\rangle, \quad (2.31)$$

$$\langle \vec{x} | \frac{\hat{p}^2}{2m} |\alpha, t_0; t\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t\rangle. \quad (2.32)$$

$$\langle \vec{x} | V(\hat{x}) |\alpha, t_0; t\rangle = V(\vec{x})\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t\rangle. \quad (2.33)$$

$$\implies i\hbar\partial_t\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t\rangle. \quad (2.34)$$

Damit erhalten wir als Ergebnis:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}, t). \quad (2.35)$$

Beachte: Wenn $\psi(\vec{x}, t)$ Lösung ist, so ist $\psi(\vec{x}, -t)$ keine Lösung, weil die SG eine DGL erster Ordnung in t ist. $\psi^*(\vec{x}, -t)$ hingegen ist aber eine Lösung. D.h. Invarianz der Theorie unter Zeitumkehr $t \rightarrow -t$ ist gesichert, sofern

$$t \rightarrow -t \quad \implies \quad \psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi^*(\vec{x}, -t). \quad (2.36)$$

Dies ist der tiefere Grund, warum der Hilbertraum der Zustände ein *komplexer* Vektorraum zu sein hat - andernfalls wäre keine zeitinvariante Bewegungsgleichung erster Ordnung in t möglich.

Auch im Wellenfunktionsbild ist die SG wiederum besonders einfach für *Energieeigenzustände*: Sei $|a, t_0\rangle$: $H|a, t_0\rangle = E_a|a, t_0\rangle$ und damit $|a, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}|a, t_0\rangle$. Wir erhalten:

$$\psi_{a, t_0}(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}\psi_{a, t_0}(\vec{x}, t_0). \quad (2.37)$$

Eingesetzt in die SG ergibt dies die **stationäre Schrödinger-Gleichung**, gültig für Energie-Eigenzustände,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}, t) = E\psi(\vec{x}, t) \quad \text{E. Schrödinger, 1926.} \quad (2.38)$$

Die allgemeine Lösung zur zeitabhängigen SG $i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t)$ lässt sich wie folgt schreiben:

- Finde eine Energie-Eigenbasis von Wellenfunktionen:

$$H\chi_n(\vec{x}) = E_n\chi_n(\vec{x}), \quad \int d^3x \chi_m^*(\vec{x}) \chi_n(\vec{x}) = \delta_{mn} \quad (2.39)$$

- Entwickle die Wellenfunktion des Anfangszustands in dieser Basis:

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \sum_n c_n \chi_n(\vec{x}) \quad \text{mit} \quad c_n = \int d^3y \chi_m^*(\vec{y}) \psi(\vec{y}, t_0). \quad (2.40)$$

- Es folgt sofort

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n(\vec{x}) \quad (2.41)$$

$$= \int d^3y \sum_n \chi_n^*(\vec{y}) \psi(\vec{y}, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n(\vec{x}). \quad (2.42)$$

Damit erhalten wir

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3y G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) \psi(\vec{y}, t_0), \quad (2.43)$$

wo

$$G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n^*(\vec{y}) \chi_n(\vec{x}) \quad (2.44)$$

den *Propagator* darstellt.

Wir demonstrieren dies am **Beispiel des kräftefreien Teilchens in einer Dimension**:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.45)$$

Wir suchen zunächst die Energie-Eigenzustände, definiert als $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = Eu(x)$. Der Lösungsraum dieser Gleichung ist aufgespannt von den Funktionen

$$\begin{aligned} u_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} & \text{sowie} & & u_{-k}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} & \text{mit Energieeigenwerten} \\ E_{\pm k} &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Wir haben also *zweifach entartete* Energie-Eigenwerte aufgrund der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie $x \rightarrow -x$ von H . Wir wollen nun die volle SG $i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t)$ lösen mit Anfangszustand $\psi(x, 0) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-\frac{1}{2}ax^2)$ und folgen unserem Lösungsschema:

1. Schritt : Expansion des Anfangszustands in Energieeigenfunktionen u_k

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk c(k) e^{ikx} \quad \text{mit} \quad c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (2.47)$$

2. Schritt : Anwendung der Zeitpropagation

$$\psi(x, t) = \int dk c(k) e^{ikx} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \int dk c(k) e^{ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t} \quad (2.48)$$

Explizite Lösung: Mithilfe des allgemeinen Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 \pm ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{b^2}{4a}\right) \quad (2.49)$$

berechnen wir

$$c(k) = \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2a}}, \quad \psi(\vec{x}, t) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar a}{m} t}} e^{-\frac{1}{2} \left(x^2 \frac{a}{1 + i\hbar a t/m}\right)}. \quad (2.50)$$

Nach weiterer expliziter Rechnung (siehe Übung) ergibt sich die Ortsunschärfe zur Zeit t zu

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2 (\Delta x)_{t=0}^2} t^2. \quad (2.51)$$

Wegen $(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$ bei $t = 0$, wo die Wellenfunktion ein Gauß'sches Wellenpaket darstellt, schreiben wir dies als

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{(\Delta p)^2}{m^2} t^2. \quad (2.52)$$

Wir sehen, dass das Wellenpaket eines freien Teilchens mit der Zeit zerfließt, d.h. das Teilchen ist trotz anfänglicher Lokalisierung zu späteren Zeiten delokalisiert. Je stärker das Teilchen ursprünglich lokalisiert ist, desto schneller fließt das Wellenpaket mit der Zeit auseinander. Der Grund dafür ist, dass eine starke Lokalisierung eine hohe Impulsbreite verursacht. Das Zerfließen entsteht nun durch die unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Impulskomponenten. Dieses *Zerfließen des Wellenpakets* ist ein quantenmechanisches Phänomen ohne klassisches Analogon.

Abschließend stellen wir noch einige wichtige, aber etwas formale Betrachtungen zum Konzept des Propagators $G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0)$ an, definiert als Kern des Integraloperators

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3 y G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) \psi(\vec{y}, t_0). \quad (2.53)$$

$G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0)$ ist das Analogon des Zeitentwicklungsoperators in der Ortsbasis: Ausgehend von

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.54)$$

finden wir

$$\langle \vec{x} | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) \int d^3 y |\vec{y}\rangle \langle \vec{y} | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.55)$$

$$\implies \psi(\vec{x}, t) = \int d^3 y \underbrace{\langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle}_{G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0)} \psi(\vec{y}, t_0). \quad (2.56)$$

In der Tat gilt, in Übereinstimmung mit (2.44),

$$\langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle = \sum_n \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | n \rangle \langle n | \vec{y} \rangle \quad (2.57)$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \chi_n^*(\vec{y}) \chi_n(\vec{x}). \quad (2.58)$$

Wir haben also folgende wichtige Interpretation des Propagators:

$$G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle = \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} | \vec{y} \rangle. \quad (2.59)$$

Beachte hierbei, dass $\lim_{t \rightarrow t_0} G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})$, d.h. der Propagator divergiert bei $t = t_0$, $\vec{x} = \vec{y}$. Von theoretischem Interesse ist insbesondere die Größe

$$G(t - t_0) = \int d^3 y G(\vec{y}, t; \vec{y}, t_0) \quad (2.60)$$

$$= \int d^3 y \sum_n \langle y | e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} | n \rangle \langle n | y \rangle \quad (2.61)$$

$$= \int d^3 y \sum_n \langle n | y \rangle \langle y | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \quad (2.62)$$

$$= \sum_n \langle n | \underbrace{\int d^3 y | y \rangle \langle y |}_{=1} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \quad (2.63)$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)}. \quad (2.64)$$

$G(t - t_0)$ erhält Information über das Energiespektrum und wird in der Quantenfeldtheorie eine wichtige Rolle spielen.

2.3 Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung

Betrachte die Größe $\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)$. Die physikalische Interpretation von $\rho(\vec{x}, t)$ ist die einer *Wahrscheinlichkeitsdichte*, denn die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen mit Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ zur Zeit t im Volumen V zu finden, ist

$$P(\text{Teilchen ist zur Zeit } t \text{ im Volumen } V) = \int_V d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}, t). \quad (2.65)$$

Die Änderung von $\rho(\vec{x}, t)$ mit der Zeit wird in der *Kontinuitätsgleichung* beschrieben. Ausgangspunkt zu ihrer Herleitung ist die Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t), \quad (2.66)$$

$$-i\hbar \partial_t \psi^*(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V^*(\vec{x}) \right) \psi^*(\vec{x}, t). \quad (2.67)$$

Damit erhalten wir sofort

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) = (\partial_t \psi^*(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \partial_t \psi(\vec{x}, t) \quad (2.68)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [-(\Delta \psi^*) \psi + \psi^* \Delta \psi] + \frac{i}{\hbar} (V^* - V) \psi^* \psi. \quad (2.69)$$

Falls das Potential reell ist, $V^* = V$, gilt also

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right). \quad (2.70)$$

Diese Gleichung lässt sich suggestiv schreiben als

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad (2.71)$$

wobei \vec{j} gegeben ist durch

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right). \quad (2.72)$$

$\vec{j}(\vec{x}, t)$ ist die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*, wie aus der integralen Form der Kontinuitätsgleichung hervorgeht. Betrachte hierzu ein Volumen V mit Rand $\partial V = F$ und integriere (2.71) über V . Dies ergibt

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3 x \rho(\vec{x}, t) = - \int_V d^3 x \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = - \int_F d\vec{F} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t). \quad (2.73)$$

Im zweiten Schritt haben wir den Gauß'schen Integralsatz angewendet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ändert sich also in dem Maße wie Wahrscheinlichkeitsdichte aus dem Volumen heraus oder in das Volumen hineinströmt. Die Kontinuitätsgleichung ist uns natürlich von der Hydrodynamik inkompressibler Flüssigkeiten vertraut.

Aus der Unitarität der Zeitentwicklung wissen wir, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten bleibt,

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \rho(\vec{x}, t) = 0 \quad (\text{Normerhalt}). \quad (2.74)$$

Dies ist konsistent mit der Kontinuitätsgleichung:

Damit $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x}, t)|^2 < \infty$, oder in Kugelkoordinaten $\int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 |\psi|^2 < \infty$, muss $|\psi|^2$ asymptotisch stärker abfallen als $\frac{1}{r^3}$. Damit fällt auch \vec{j} stärker ab als $\frac{1}{r^3}$. Wir beschreiben nun das Integral über \mathbb{R}^3 als Integral über eine Kugel $B(r)$ um den Ursprung mit Radius r im Limes $r \rightarrow \infty$. Die rechte Seite von (2.73) verhält sich wie

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\partial B(r)} d\vec{F} \cdot \vec{j} \lesssim \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi \frac{r^2}{r^3} \rightarrow 0, \quad (2.75)$$

was zu (2.74) führt.

Bemerkung: Normerhalt erfordert, dass das Potential reell ist,

$$V(\vec{x}) = V^*(\vec{x}). \quad (2.76)$$

Echt komplexe Potentiale $V(\vec{x}) \neq V^*(\vec{x})$ beschreiben Prozesse, bei denen die Teilchenzahl nicht erhalten ist, d.h. die Absorption oder Produktion von Teilchen.

Wir wenden uns noch etwas näher der physikalischen Interpretation von $\vec{j}(\vec{x}, t)$ zu: Mit $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ ist

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \hat{p} \psi(\vec{x}, t) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}, t) (\hat{p} \psi(\vec{x}, t))^* \right). \quad (2.77)$$

Daraus folgt sofort

$$\int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\langle \hat{p} \rangle(t)}{m}. \quad (2.78)$$

Dieser Zusammenhang wird weiter relevant in Kombination mit folgender Beobachtung: Schreibe

$$\psi(\vec{x}, t) = \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)} \quad (2.79)$$

und

$$\psi^* \vec{\nabla} \psi = \sqrt{\rho} e^{-\frac{i}{\hbar} S} \left(\frac{\vec{\nabla} \rho}{2\sqrt{\rho}} e^{\frac{i}{\hbar} S} + \sqrt{\rho} e^{\frac{i}{\hbar} S} \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \rho + \frac{i}{\hbar} \rho \vec{\nabla} S. \quad (2.80)$$

Daraus erhalten wir

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t) \frac{\vec{\nabla} S(\vec{x}, t)}{m}, \quad (2.81)$$

d.h. der Gradient der Phase gibt die *Richtung des Wahrscheinlichkeitsstromes* an. Aus $\int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$ ergibt sich die interessante Interpretation

$$\vec{p} = \vec{\nabla} S(\vec{x}, t). \quad (2.82)$$

Es ist naheliegend, eine Geschwindigkeit des Teilchens zu definieren als die Größe mit $\vec{v} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} S(\vec{x}, t)$. Damit nimmt die Kontinuitätsgleichung die vertraute Form an

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0. \quad (2.83)$$

Allerdings ist in konventioneller Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik die Identifizierung von $\vec{v} = \frac{1}{m}\vec{\nabla}S(\vec{x}, t)$ mit der Geschwindigkeit des Teilchens nur eine rein formale Analogie. In Kopenhagener Interpretation gibt es ja gerade **keine feste Trajektorie für ein Teilchen mit festem Impuls**.

Bemerkung: Die Gleichung $\vec{v} = \frac{1}{m}\vec{\nabla}S(\vec{x}, t)$ ist Ausgangspunkt der sogenannten "Bohmschen Mechanik", einer von der Kopenhagener Interpretation bewusst abweichenden Interpretation der Quantenmechanik, in der \vec{v} als das Geschwindigkeitsfeld des Teilchens verstanden wird.

2.4 Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild

2.4.1 Heisenbergbild und Bewegungsgleichung für Operatoren

Bisher haben wir die Zeitentwicklung im *Schrödinger-Bild* betrachtet:

- Die Zustandsvektoren ändern sich mit der Zeit $|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$.
- Die Observablen sind keiner Zeitentwicklung unterworfen. Beispielsweise wird $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ zu jedem Zeitpunkt durch denselben Operator dargestellt.

Von praktischem physikalischem Interesse ist weniger die Zeitentwicklung der Zustände, als vielmehr die Dynamik von Matrixelementen der Observablen. Denn sowohl die Wahrscheinlichkeiten für Messung eines Wertes aus dem Spektrum als auch die Mittelwerte von Operatoren sind als Matrixelemente schreibbar.

Betrachten wir deshalb die Zeitentwicklung der Matrixelemente von Operatoren,

$$t = t_0 = 0 : \quad \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \quad \longrightarrow \quad t > 0 : \quad \langle \alpha | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0) | \beta \rangle. \quad (2.84)$$

Alternativ können wir diese Dynamik der Matrix-Elemente auch durch einen Formalismus der Zeitentwicklung der Operatoren, nicht des Zustandsvektors, darstellen. In dieser Form ergibt sich die Dynamik wie folgt:

$$t = 0 : \quad \hat{A} \quad \longrightarrow \quad t > 0 : \quad \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0). \quad (2.85)$$

$$t = 0 : \quad |\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad t > 0 : \quad |\alpha\rangle. \quad (2.86)$$

Im folgenden schreiben wir: $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)$. Wir definieren das *Heisenberg-Bild* wie folgt:

- Die Observable im Heisenberg-Bild ist definiert als

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t), \quad (2.87)$$

wo $\hat{A}^{(S)}$ die Observable im Schrödinger-Bild ist. Insbesondere stimmen die Operatoren zu einem (willkürlich gewählten) Referenzzeitpunkt $t_0 \equiv 0$ überein,

$$\hat{A}^{(H)}(t = 0) = \hat{A}^{(S)}. \quad (2.88)$$

- Der *Zustandsvektor* ist zeitunabhängig und

$$\forall t : \quad |\alpha, t_0 = 0; t\rangle_{(H)} = |\alpha, t_0 = 0\rangle \equiv |\alpha\rangle_{(H)}. \quad (2.89)$$

Damit kann man die Matrix-Elemente in beiden Bildern berechnen,

$${}_{(S)}\langle \alpha, t_0 = 0; t | \hat{A}^{(S)} | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_{(S)} = {}_{(H)}\langle \alpha | \hat{A}^{(H)}(t) | \alpha \rangle_{(H)}. \quad (2.90)$$

Die Dynamik ist im Heisenberg-Bild in einer Bewegungsgleichung der Operatoren enthalten, die wir aus der Schrödinger-Gleichung herleiten können. Nehmen wir zunächst an, dass $\hat{A}^{(S)}$ keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, $\partial_t \hat{A}^{(S)} = 0$. Die zeitliche Ableitung der Heisenberg-Observable ist

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \frac{d}{dt} (\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t)) \quad (2.91)$$

$$= (\partial_t \hat{U}^\dagger(t)) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \partial_t \hat{U}(t). \quad (2.92)$$

Mit $i\hbar \partial_t \hat{U} = H\hat{U}$ und $-i\hbar \partial_t \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger H$ folgt

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} (-\hat{U}^\dagger H \hat{A}^{(S)} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} H \hat{U}) \quad (2.93)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (-\hat{U}^\dagger H \hat{U} \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U}}_{\hat{A}^{(H)}(t)} + \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U}}_{\hat{A}^{(H)}(t)} \hat{U}^\dagger H \hat{U}) \quad (2.94)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}(t), \hat{U}^\dagger(t) H \hat{U}(t)]. \quad (2.95)$$

Insbesondere ist

$$\hat{U}^\dagger H \hat{U} = H^{(H)}(t) \quad (2.96)$$

im Heisenberg-Bild, weshalb

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}(t), H^{(H)}(t)]. \quad (2.97)$$

Wenn H zeitunabhängig ist, also $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$, ist $H^{(H)}(t) = H$ und $\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}(t), H]$. Wenn wir außerdem eine explizite Zeitabhängigkeit in $\hat{A}^{(S)}$ haben, also $\partial_t \hat{A}^{(S)}(t) \neq 0$, finden wir die Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)^{(H)} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}(t), H], \quad (2.98)$$

wo $\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)^{(H)} = \hat{U}^\dagger(t) \partial_t \hat{A}^{(S)}(t) \hat{U}(t)$.

Bemerkungen:

- Das Heisenberg-Bild ist näher am klassischen Bild: Die Wellenfunktion/ der Zustandsvektor hat kein direktes klassisches Analogon, aber klassische Größen wie Energie, Ort und Impuls werden zu quantenmechanischen Observablen, die sich im Heisenberg-Bild dynamisch

²Allgemeiner gilt dies für $[H(t_i), H(t_j)] = 0$.

ändern. Insbesondere ist die Heisenberg-Gleichung (2.98) als direktes quantenmechanisches Analogon zu

$$\frac{d}{dt}F(q, p, t) = \partial_t F(q, p, t) + \{F(q, p, t), H\} \quad (2.99)$$

zu verstehen. Hier ist $\{F, G\} = \partial_q F \partial_p G - \partial_p F \partial_q G$ die klassische Poisson-Klammer. Angesichts des besprochenen Zusammenhangs

$$\{ \quad, \quad \} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\quad, \quad] \quad (2.100)$$

rechtfertigt dies nachträglich die Identifikation von $\hat{\Omega}$ in $\hat{U}(t + dt, t_0) = \mathbb{1} - i\hat{\Omega}dt$ mit $\frac{1}{\hbar}H$.

- Eine ähnliche Analogie besteht für den Translationsoperator. Statt $|x\rangle \rightarrow |x + \Delta x\rangle = \hat{T}(\Delta x)|x\rangle$ können wir Observable translatieren,

$$\hat{A} \rightarrow \hat{T}^\dagger(\Delta x)\hat{A}\hat{T}(\Delta x). \quad (2.101)$$

Infinitesimal ergibt sich mittels $\hat{T}(\delta x) = \mathbb{1} - i\delta x\hat{K}$ für δx das Transformationsverhalten $\hat{A} \rightarrow \hat{A} + \frac{1}{i}\delta x[\hat{A}, \hat{K}]$. Dies ist zu vergleichen mit der klassischen Transformation einer Funktion $F(q, p)$ auf dem Phasenraum,

$$F(q, p) \rightarrow \tilde{F}(q, p) = F(q + \delta q, p) = F(q, p) + \delta F, \quad \delta F = \delta q \partial_q F = \delta q \{F, Q\}, \quad Q = p. \quad (2.102)$$

Wir erhalten daraus mittels 2.100 den Zusammenhang $\hat{K} \leftrightarrow \frac{\hat{p}}{\hbar}$, wie wir ihn in Gl. (1.158) angenommen hatten.

2.4.2 Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem

Wir verdeutlichen die Zeitentwicklung der Operatoren im Heisenberg-Bild am Beispiel des freien Teilchens:

Im Folgenden sei $\hat{x} = \hat{x}^{(H)}(t)$ und $\hat{p} = \hat{p}^{(H)}(t)$ im Heisenbergbild. Der Hamiltonian für das freie Teilchen ist

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (2.103)$$

Damit laute die Bewegungsgleichung für der Impuls

$$\frac{d}{dt}\hat{p} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, H] = 0, \quad (2.104)$$

weil $[\hat{p}_i, f(\hat{p}_j)] = 0$.

Somit ergibt sich

$$\hat{p}_i(t) = \hat{p}_i(0). \quad (2.105)$$

Die Bewegungsgleichung für \hat{x}_i lautet

$$\frac{d}{dt} \hat{x}_i = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_i, H]. \quad (2.106)$$

Auf Blatt 5 beweisen wir

$$[\hat{x}_i, f(\hat{p})] = i\hbar \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \right), \quad [\hat{p}_i, g(\hat{x})] = -i\hbar \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right). \quad (2.107)$$

Daraus können wir sofort folgern, dass

$$[\hat{x}_i, H] = \frac{1}{2m} i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial p_i} \sum_{i=1}^3 p_i^2 \right) = \frac{1}{2m} i\hbar 2\hat{p}_i, \quad (2.108)$$

was mit $\frac{d}{dt} \hat{x}_i(t) = \frac{\hat{p}_i(t)}{m} = \frac{\hat{p}_i(0)}{m}$ ergibt:

$$\hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \frac{\hat{p}_i(0)}{m} t. \quad (2.109)$$

Wir sehen also, dass die klassischen Bewegungsgleichungen zu Operatorgleichungen im Heisenberg-Bild werden.

Nun möchten wir das Zerfließen des Wellenpakets im Heisenberg-Bild verstehen. Beachte dabei, dass im Heisenberg-Bild der Kommutator **zu gleichen Zeiten** mit dem Kommutator im Schrödinger-Bild wie folgt zusammenhängt:

$$[\hat{A}^{(H)}(t), \hat{B}^{(H)}(t)] = [\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t), \hat{U}^\dagger(t) \hat{B}^{(S)} \hat{U}(t)] \quad (2.110)$$

$$= \hat{U}^\dagger(t) [\hat{A}^{(S)}, \hat{B}^{(S)}] \hat{U}(t). \quad (2.111)$$

Insbesondere gilt $[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(t)] = 0$. Aber es gilt (für Kommutatoren zu nicht gleichen Zeiten)

$$[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(0)] = \left[\frac{\hat{p}_i t}{m}, \hat{x}_j(0) \right] = -\frac{i\hbar t}{m} \delta_{ij}. \quad (2.112)$$

Mit $(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq \frac{1}{4} |[\hat{A}, \hat{B}]|^2$ können wir nun

$$(\Delta x_i)_t^2 (\Delta x_i)_{t=0}^2 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \quad (2.113)$$

folgern, was das Auseinanderfließen des Wellenpakets für ein freies Teilchen bedeutet.

Unser zweites Beispiel stellt ein Teilchen im Potential $V(\vec{x})$ dar,

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}). \quad (2.114)$$

Aus diesem Hamilton-Operator erhalten wir die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})] \quad (2.115)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_i}\hat{V}(\vec{x}) \quad (2.116)$$

und

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = \frac{\hat{p}_i}{m}, \quad (2.117)$$

da $[\hat{x}_i, V(\vec{x})] = 0$ (zu gleichen Zeiten). Wir erhalten daraus

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}_i(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{d}{dt}\hat{x}_i, H\right] \quad (2.118)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hat{p}_i}{m}, H\right] \quad (2.119)$$

$$= \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\hat{p}_i. \quad (2.120)$$

Damit lautet die Operatorgleichung im Heisenberg-Bild:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}^{(H)}(t) = -\vec{\nabla}V(\hat{x}^{(H)}). \quad (2.121)$$

Betrachten wir nun den Erwartungswert von (2.121) bzgl. eines Zustands $|\alpha\rangle_{(H)}$. Da $|\alpha\rangle_{(H)}$ unabhängig von t ist, können wir folgern

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\langle\vec{\nabla}V(\hat{x})\rangle. \quad (2.122)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als **Ehrenfest'sches Theorem**. Da der Erwartungswert im Schrödinger- und im Heisenberg-Bild übereinstimmt, gilt dies allgemein:

Erwartungswerte erfüllen klassische Bewegungsgleichungen.

2.4.3 Basis-Kets im Heisenberg-Bild

Wir wenden uns abschließend der Zeitentwicklung der Basis-Vektoren zu. Im Schrödinger-Bild gilt:

- $|\alpha, t_0; t\rangle_{(S)} = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$, d.h. der Zustandsvektor ist dynamisch.
- Bei Entwicklung in Basis-Vektoren sind diese nicht dynamisch: Insbesondere gilt dies für die Eigenbasis zum Operator $\hat{A}^{(S)}$:

$$\hat{A}^{(S)}|a'\rangle = a'|a'\rangle. \quad (2.123)$$

$$(2.124)$$

Die Zeitentwicklung des Zustandsvektors $|\alpha, t_0; t\rangle_{(S)} = \sum_{a'} c_{a'}(t)|a'\rangle$ ist in den Koeffizienten bzgl. der Basis enthalten,

$$c_{a'}(t) = \langle a' | \alpha, t_0; t \rangle_{(S)} = \langle a' | \hat{U}(t) | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.125)$$

Der Übergang ins Heisenbergbild liefert:

$$\underbrace{\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t)}_{\hat{A}^{(H)}(t)} \hat{U}^\dagger(t) | a' \rangle = \hat{U}^\dagger(t) a' | a' \rangle, \quad (2.126)$$

also

$$\hat{A}^{(H)}(t) (\hat{U}^\dagger(t) | a' \rangle) = a' (\hat{U}^\dagger(t) | a' \rangle). \quad (2.127)$$

Somit ist $\hat{U}^\dagger(t) | a' \rangle$ Eigenket zu $\hat{A}^{(H)}(t)$ mit Eigenwert a' . Damit können wir die Eigenkets im Heisenberg-Bild definieren:

$$| a', t \rangle_{(H)} = \hat{U}^\dagger(t) | a' \rangle. \quad (2.128)$$

Sie erfüllen die “ inverse Schrödingergleichung”

$$i\hbar \partial_t | a', t \rangle_{(H)} = -H | a', t \rangle_{(H)}. \quad (2.129)$$

Im Heisenberg-Bild nimmt die Basis-Entwicklung die Form an:

$$\underbrace{|\alpha, t_0; t \rangle_{(H)}}_{=|\alpha, t_0 \rangle} = \sum_{a'} c_{a'}(t) | a', t \rangle_{(H)} \quad (2.130)$$

mit

$$c_{a'}(t) = {}_{(H)} \langle a', t | \alpha, t_0; t \rangle_{(H)} = (\langle a' | \hat{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle). \quad (2.131)$$

Wir sehen also, dass die $c_{a'}(t)$ in Schrödinger- und Heisenberg-Bild übereinstimmen.

2.5 Der einfache harmonische Oszillator

Betrachten wir ein Teilchen der Masse m im eindimensionalen Potential $V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$. ω stellt die Kreisfrequenz dar und hat die Einheit $\frac{1}{\text{Zeit}}$. Das quadratische Potential ist oft eine gute erste Näherung (im Sinne einer Taylorentwicklung) für das Verhalten von Teilchen im stationären Punkt eines allgemeinen Potentials. Deshalb findet es Anwendung in universellem Kontext von Festkörperphysik bis hin zu Quantefeldtheorie.

Wir können den quantenmechanischen Hamilton-Operator für dieses Problem schreiben als

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}^2. \quad (2.132)$$

Es erweist sich als sinnvoll, die einheitenlosen Größen

$$\hat{\mathcal{X}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \quad \hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}, \quad (2.133)$$

zu definieren. Damit ist

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}^2) \quad (2.134)$$

mit $[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}] = i$.

2.5.1 Lösung im Operatorbild

Wir werden nun sehen, dass die Kommutatoralgebra $[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}] = i$ ausreicht, um den harmonischen Oszillator zu lösen, d.g. das Energiespektrum und die Energie-Eigenzustände anzugeben. Allerdings bedarf es hierzu eines Variablenwechsels von $\hat{\mathcal{X}}$ und $\hat{\mathcal{P}}$ zu den sogenannten *Leiteroperatoren*

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\mathcal{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad (2.135)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{i}(a - a^\dagger). \quad (2.136)$$

Diese erfüllen die Kommutatorrelation

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}] \quad (2.137)$$

$$= \frac{i}{2}([\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{X}}] - [\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}]) = 1, \quad (2.138)$$

also

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (2.139)$$

Wir schreiben den Hamiltonoperator H mithilfe der Leiteroperatoren als

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}((a + a^\dagger)^2 - (a - a^\dagger)^2) \quad (2.140)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 - a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a - (a^\dagger)^2) \quad (2.141)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger), \quad (2.142)$$

was wir noch vereinfachen können mittels $aa^\dagger = [a, a^\dagger] + a^\dagger a = 1 + a^\dagger a$ zu ³

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}). \quad (2.143)$$

Definieren wir nun den sogenannten *Besetzungszahloperator*

$$N = a^\dagger a \quad \text{mit} \quad N^\dagger = N. \quad (2.144)$$

Damit erhalten wir

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}). \quad (2.145)$$

³Alternativ können wir schreiben $H = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^\dagger - \frac{1}{2})$, aber dies führt zu leicht unkonventioneller Definition des Vakuums.

Eine entscheidende Eigenschaft von N ist, dass es nur nicht-negative Eigenwerte hat, denn

$$\forall |\psi\rangle : \quad \langle \psi | N | \psi \rangle = \langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle = \|a |\psi\rangle\|^2 \geq 0. \quad (2.146)$$

Wir finden nun die Energie-Eigenzustände und das Energie-Spektrum durch Analyse des Spektrums von N : Wenn $|n\rangle$ Eigenzustand von N mit Eigenwert n ist, also

$$N |n\rangle = n |n\rangle, \quad (2.147)$$

so ist

$$H |n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (2.148)$$

Wir wollen herausfinden, welche Besetzungszahlen n (also welche Eigenwerte von N) auftreten. Hierzu müssen wir etwas ausholen. Berechne zunächst $[N, a] = [a^\dagger a, a]$. Aus der allgemeinen Relation

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (2.149)$$

folgt

$$[N, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1} a = -a. \quad (2.150)$$

Damit haben wir insgesamt

$$[N, a] = -a \quad \text{und ebenso} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (2.151)$$

Als nächstes fragen wir uns, was $a |n\rangle$ für ein Zustand ist. Wir betrachten

$$N(a |n\rangle) = ([N, a] + aN) |n\rangle = -a |n\rangle + an |n\rangle, \quad (2.152)$$

was uns zu

$$N(a |n\rangle) = (n - 1)a |n\rangle \quad (2.153)$$

führt. Das bedeutet, dass $a |n\rangle$ Eigenzustand von N mit Eigenwert $n - 1$ ist. Ähnlich finden wir

$$Na^\dagger |n\rangle = (n + 1)a^\dagger |n\rangle \quad (2.154)$$

Wir halten fest:

$$a \quad \text{erniedrigt den EW um 1} \quad \leftrightarrow \quad \text{Vernichtungsoperator} \quad (2.155)$$

$$a^\dagger \quad \text{erhöht den EW um 1} \quad \leftrightarrow \quad \text{Erzeugungsoperator} \quad (2.156)$$

Beachte dabei, dass das Spektrum von N und damit von H nicht degeneriert ist. Der Grund dafür ist, dass a und a^\dagger eine vollständige Menge von Observablen bilden, was bedeutet, dass in diesem Problem jede Observable eine Funktion von a und a^\dagger ist. Wäre das Spektrum degeneriert, so könnte man eine weitere Observable hinzunehmen, so dass diese Degenerierung aufgehoben wird.

Es gilt deshalb

$$a^\dagger |n\rangle = c_{n+} |n+1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n| a = c_{n+}^* \langle n+1| \quad (2.157)$$

$$a |n\rangle = c_{n-} |n-1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n| a^\dagger = c_{n-}^* \langle n-1|. \quad (2.158)$$

Die Werte von $c_{n\pm} \in \mathbb{C}$ finden wir über die Normierung von $|n\rangle$. Wir beginnen mit

$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{|c_{n+}|^2} \langle n| a a^\dagger |n\rangle \quad (2.159)$$

und verwenden dafür den Standardtrick

$$\langle n| a a^\dagger |n\rangle = \langle n| ([a, a^\dagger] + a^\dagger a) |n\rangle = \langle n|n\rangle + \langle n| N |n\rangle = (n+1) \underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1}. \quad (2.160)$$

Damit erhalten wir sofort $1 = \frac{1}{|c_{n+}|^2} (1+n)$, was $c_{n+} = \sqrt{n+1}$ bedeutet (hier haben wir eine Gesamtphase entsprechend gewählt). Auf die gleiche Weise erhalten wir aus

$$1 = \langle n-1|n-1\rangle = \frac{1}{|c_{n-}|^2} \langle n| \underbrace{a^\dagger a}_N |n\rangle = \frac{n}{|c_{n-}|^2} \quad (2.161)$$

das Ergebnis $c_{n-} = \sqrt{n}$. Wir fassen dies noch einmal zusammen:

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (2.162)$$

Kehren wir nun zurück zur Frage nach den möglichen Eigenwerten n von N . Nehmen wir an, es gibt ein $n \geq 0$ so dass

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad (n \geq 0 \text{ weil } N \text{ positiv semi-definit}). \quad (2.163)$$

Wirken wir mit a auf den Zustand $|n\rangle$ so ergibt sich

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (2.164)$$

$$a^2 |n\rangle = \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle, \quad (2.165)$$

$$\vdots \quad (2.166)$$

$$a^k |n\rangle = \sqrt{n(n-1)\dots(n-k+1)} |n-k\rangle. \quad (2.167)$$

Da N keine negativen Eigenwerte hat, muss diese Reihe irgendwann abbrechen. Sei L der kleinste Wert so dass $a^L |n\rangle = 0$ mit $L \in \mathbb{N}$. Das entspricht

$$0 = a a^{L-1} |n\rangle \quad \rightarrow \quad a |n-L+1\rangle = 0. \quad (2.168)$$

Nutzen wir dies nun und schreiben

$$0 = \langle n-L+1| \underbrace{a^\dagger a}_N |n-L+1\rangle = (n-L+1) \langle n-L+1|n-L+1\rangle = n-L+1. \quad (2.169)$$

Damit $n - L + 1 = 0$ für $L \in \mathbb{N}$, muss n ganzzahlig sein. Gegeben sei also $n \in \mathbb{N}$ und damit $L = n + 1$ der minimale Wert so dass $a^L |n\rangle = 0$. Insbesondere ist $a^{L-1} |n\rangle \neq 0$,

$$0 \neq a^{L-1} |n\rangle = a^n |n\rangle = \sqrt{n!} |0\rangle \quad \text{und} \quad a |0\rangle = 0. \quad (2.170)$$

Damit ist $|0\rangle$ der minimale Besetzungszustand. Man bezeichnet ihn als Grundzustand oder Vakuum. Damit meinen wir den Zustand minimaler Energie, welches ein Teilchen im Potential des harmonischen Oszillators annehmen kann. Ausgehend von $|0\rangle$ kann jeder höhere Energiezustand durch Anwendung des Erzeugers a^\dagger erreicht werden:

$$|1\rangle = a^\dagger |0\rangle \quad (2.171)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |0\rangle. \quad (2.172)$$

$$\vdots \quad (2.173)$$

Der allgemeine Energiezustand ist also:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.174)$$

Die Energie des Zustands $|n\rangle$ ist $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Insbesondere besitzt der Grundzustand die

$$\text{Vakuumergie} \quad E_0 = \hbar\omega \frac{1}{2}. \quad (2.175)$$

Die Energie-Eigenzustände bilden eine Basis des sogenannten *Fock-Raums*.

In den Übungen zeigen wir:

Die Unschärfe im Zustand $|n\rangle$ ist

$$(\Delta x)_{|n\rangle}^2 (\Delta p)_{|n\rangle}^2 = (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2. \quad (2.176)$$

Der Grundzustand $|0\rangle$ saturiert damit die Unschärferelation. Wir weisen abschließend darauf hin, dass die Existenz der Vakuumergie als eine Folge der Unschärferelation verstanden werden kann, denn wegen $\langle \hat{p} \rangle_{|n\rangle} = 0 = \langle \hat{x} \rangle_{|n\rangle}$ ist

$$\langle E \rangle_{|n\rangle} = \frac{1}{2m} (\Delta p)_{|n\rangle}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 (\Delta x)_{|n\rangle}^2. \quad (2.177)$$

2.5.2 Darstellung im Ortsraum

Wir wollen die Wellenfunktion der Fockraum-Zustände $|n\rangle$ finden und beginnen mit dem Grundzustand, definiert als

$$a |0\rangle = 0 \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right). \quad (2.178)$$

Wir erhalten daraus

$$0 = \langle x | a | 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x | \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} | 0 \rangle. \quad (2.179)$$

Wegen $\langle x | \hat{x} | 0 \rangle = x \langle x | 0 \rangle$ und $\langle x | \hat{p} | 0 \rangle = -i\hbar \partial_x \langle x | 0 \rangle$ finden wir

$$\langle x | a | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \langle x | 0 \rangle \quad \text{mit} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (2.180)$$

Die Wellenfunktion $\psi_0(x) \equiv \langle x | 0 \rangle$ erfüllt also die DGL

$$\left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0. \quad (2.181)$$

Ihre Lösung finden wir wie folgt: Bekanntlich ist $e^{\alpha x}$ Lösung zu $\frac{d}{dx} f(x) = \alpha f(x)$. Die Lösung von $\frac{d}{dx} \psi_0(x) = -\frac{x}{x_0^2} \psi_0(x)$ ist somit

$$\psi_0(x) = N e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}. \quad (2.182)$$

Bestimmen wir nun noch die Normierung N indem wir fordern

$$1 = \int dx |\psi(x)|^2 = \int dx |N|^2 e^{-\left(\frac{x}{x_0} \right)^2}. \quad (2.183)$$

Daraus erhalten wir $N = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{x_0}}$. Damit lautet die gesamte Wellenfunktion

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}. \quad (2.184)$$

Wir sehen also, dass es sich beim Grundzustand um ein Gauß-Profil handelt. Dies war zu erwarten, weil, wie nach (2.176) beschrieben, der Grundzustand die Orts-Impuls-Unschärfe erfüllt. Nun finden wir die Wellenfunktion der angeregten Zustände $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$ durch die Wirkung von a^\dagger mit der Darstellung

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \quad (\text{im Ortsraum}). \quad (2.185)$$

Multiplikation mit $\langle x |$ ergibt

$$\langle x | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | 0 \rangle \quad (2.186)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \langle x | 0 \rangle, \quad (2.187)$$

was zu

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \quad (2.188)$$

führt. Mit $\xi = \frac{x}{x_0}$ lässt sich dies via den *Hermite-Polynomen* schreiben:

Definition 2.1. Die Hermite-Polynome sind definiert als

$$H_n(\xi) = e^{\frac{\xi^2}{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (2.189)$$

Damit werden unsere Wellenfunktionen zu

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right). \quad (2.190)$$

Explizit findet man:

$$H_0(\xi) = 1, \quad (2.191)$$

$$H_1(\xi) = 2\xi, \quad (2.192)$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad (2.193)$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \quad (2.194)$$

Beachte dabei, dass $H_{2n}(-\xi) = H_{2n}(\xi)$ sowie $H_{2n+1}(-\xi) = -H_{2n+1}(\xi)$ gilt. Induktiv findet man allgemein

$$H_{2n}(\xi) = \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \frac{(2n)!(2\xi)^{2k}}{(n-k)!(2k)!}, \quad (2.195)$$

$$H_{2n+1}(\xi) = 2\xi \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2n+1)!(2\xi)^{2n-2k}}{k!(2n-2k+1)!}. \quad (2.196)$$

Aus $\langle m|n \rangle = \delta_{nm} = \int dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)$ folgt dann

$$\int d\xi e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) = \delta_{mn} \sqrt{\pi} 2^n n!. \quad (2.197)$$

Abschließend merken wir an, dass, wie für stationäre Zustände erwartet, die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ reell ist. Dies ist im Einklang mit dem Verschwinden des Wahrscheinlichkeitsstromes \vec{j} für stationäre Zustände.

2.5.3 Lösung des Oszillators im Ortsraum

Alternativ zur Operatormethode können wir den harmonischen Oszillator auch direkt im Ortsraum lösen. Ausgangspunkt ist die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.198)$$

Mit $\xi = \frac{x}{x_0}$ für $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ folgt die *Hermitsche Differentialgleichung*

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \lambda \right) \psi(\xi) = 0. \quad (2.199)$$

Wir wenden folgende allgemeine Lösungsstrategie an:

- Finde zunächst die asymptotische Lösung $u(\xi)$ für $\xi \rightarrow \infty$,

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right)u(\xi) = 0 \quad (\lambda \ll \xi), \quad (2.200)$$

was zu $u(\xi) \cong e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ für $\xi \rightarrow \infty$ führt.

- Setze den Produktansatz: $\psi(\xi) = u(\xi)v(\xi)$ in (2.199) ein und erhalte

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \lambda - 1\right)v(\xi) = 0. \quad (2.201)$$

Die erlaubten Werte von λ ergeben sich aus der Forderung nach der Normierbarkeit der Lösung. Dies werden wir im Detail in den Übungen sehen.

Tatsächlich kann man zeigen, dass die durch $H_n(\xi) = e^{\frac{\xi^2}{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ definierten Hermiteschen Polynome Lösung der Hermiteschen DGL sind. Betrachten wir hierzu

$$S(\xi, s) = e^{-s^2 + 2s\xi}. \quad (2.202)$$

In den Übungen werden wir zeigen:

- $\frac{\partial^n}{\partial s^n} S(\xi, s)|_{s=0} = H_n(\xi)$, also $S(\xi, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} s^n H_n(\xi)$. Man bezeichnet S als *erzeugendes Funktional*.
- $H_n(\xi)$ definiert via $\frac{\partial^n}{\partial s^n} S(\xi, s)|_{s=0}$ erfüllt die hermitesche DGL.

2.5.4 Kohärente Zustände

Die Fockraum-Zustände $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n |0\rangle$ sind Energie-Eigenzustände und somit stationär:

$$|n, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |n\rangle = e^{-i\omega(n+1/2)(t-t_0)} |n\rangle. \quad (2.203)$$

Insbesondere ist zu jedem Zeitpunkt t

$$\langle \hat{x}(t) \rangle_{|n\rangle} = 0, \quad \langle \hat{p}(t) \rangle_{|n\rangle} = 0. \quad (2.204)$$

Charakteristisch für die klassische Lösung des harmonischen Oszillators ist hingegen die Oszillation von x und p mit Frequenz ω . Näher an der klassischen Lösung sind die *kohärenten Zustände*, definiert als Eigenzustände von a ,

$$a |\lambda\rangle_{\text{coh}} = \lambda |\lambda\rangle_{\text{coh}}. \quad (2.205)$$

Unser Ansatz für einen solchen Zustand lautet

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle. \quad (2.206)$$

Damit erhalten wir:

$$\lambda |\lambda\rangle = a |\lambda\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} c_{m+1} \sqrt{m+1} |m\rangle. \quad (2.207)$$

Daraus folgt, dass

$$c_{m+1} \sqrt{m+1} = c_m \lambda, \quad \text{d.h.} \quad \frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{\lambda}{\sqrt{m+1}}. \quad (2.208)$$

Mit der Wahl $c_0 = 1$ ergibt sich

$$|\lambda\rangle_{\text{coh}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (2.209)$$

Dies lässt sich formal schreiben als

$$|\lambda\rangle_{\text{coh}} = e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}. \quad (2.210)$$

Man kann zeigen, dass $\langle \mu | \lambda \rangle = e^{\mu^* \lambda}$ ist. Der normierte Zustand ist damit

$$|\lambda\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle. \quad (2.211)$$

Um eine physikalische Interpretation der kohärenten Zustände zu finden, führen wir die Zeitentwicklung durch und setzen dafür $t_0 = 0$:

$$|\lambda, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\lambda\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.212)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+1/2)t} |n\rangle \quad (2.213)$$

$$= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.214)$$

Wir haben somit gezeigt

$$|\lambda, t_0; t\rangle = e^{-i\omega t/2} |\lambda(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{\lambda(t)a^\dagger} |0\rangle \quad \text{mit} \quad \lambda(t) = e^{-i\omega t} \lambda. \quad (2.215)$$

Der Real- und Imaginärteil von λ oszillieren also mit der Frequenz ω . Als nächstes möchten wir nun die Wellenfunktion bestimmen. Dazu betrachten wir

$$(a - \lambda) |\lambda\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle x | a - \lambda | \lambda \rangle = 0. \quad (2.216)$$

Wir erhalten damit

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) - \lambda \right] \psi_{|\lambda\rangle}(x) = 0, \quad (2.217)$$

was gleichbedeutend mit

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} - \sqrt{2} \lambda \right) \psi_{|\lambda\rangle}(x) = 0 \quad (2.218)$$

ist. Diese DGL lösen wir mithilfe des Ansatzes

$$\psi_{|\lambda\rangle}(x) = N e^{-Ax^2 + Bx + C}. \quad (2.219)$$

Eingesetzt in (2.218) führt dies zu dem Ergebnis

$$\psi_{|\lambda\rangle}(x) = N_{|\lambda\rangle} e^{-\frac{1}{2x_0^2} (x - \sqrt{2} \lambda x_0)^2}. \quad (2.220)$$

Wir stellen daran folgende Beobachtungen an:

- Diese Wellenfunktion ist ein Gauß'sches Wellenpaket, welches nicht mit der Zeit zerfließt. Daher rührt der Name kohärenter Zustand.
- Das Wellenpaket ist zentriert um $\langle x(t) \rangle = \sqrt{2} x_0 \text{Re} \lambda(t)$. Damit oszilliert $\langle x(t) \rangle_{|\lambda\rangle}$ mit der Frequenz ω .

Insgesamt können wir also festhalten, dass die quantenmechanischen Zustände $|\lambda_{\text{coh}}\rangle$ in der Tat die typischen Eigenschaften klassischer Lösung des harmonischen Oszillators realisieren.

Kapitel 3

Drehimpuls und Spin

3.1 Rotationen in \mathbb{R}^3 : Lie-Gruppe und Lie-Algebra

Unser bisheriges Programm zur Definition der quantenmechanischen Observablen beruht auf der Identifikation

$$\text{Observable} \quad \leftrightarrow \quad \text{Generator einer Transformation} \quad (3.1)$$

$$\hat{p} \quad \leftrightarrow \quad \text{Translationen} \quad T = \exp(-i\Delta x \frac{\hat{p}}{\hbar}) \quad (3.2)$$

$$H \quad \leftrightarrow \quad \text{Zeitentwicklung} \quad \hat{U} = \exp(-itH/\hbar). \quad (3.3)$$

Ebenso nähern wir uns dem *Drehimpulsoperator* über Rotationen des Euklidischen Raums. Wir beginnen mit einem Exkurs über Rotationen im \mathbb{R}^3 , anhand derer wir die wichtigen Begriffe der Lie-Gruppe und Lie-Algebra kennenlernen.

3.1.1 Von $SO(3)$ zur Lie-Gruppe

Rotationen in \mathbb{R}^3 werden dargestellt als reelle 3×3 -Matrizen R , die auf Vektoren $\vec{v} \in \mathbb{R}^3$ wirken,

$$\vec{v} \mapsto \vec{v}_R = R\vec{v} \quad (3.4)$$

mit $RR^T = \mathbb{1} = R^T R$ so dass $\det R = 1$. Solche R bilden eine *Gruppe* bzgl. Multiplikation, die Drehgruppe

$$SO(3) = \{R \in \mathbb{R}^{3,3} : RR^T = \mathbb{1} \text{ mit } \det R = 1\}. \quad (3.5)$$

Wir betrachten wieder *aktive Rotationen*, d.h. das Koordinatensystem wird nicht transformiert. Die Rotation eines Vektors um einen Winkel ϕ um die z -Achse ist gegeben durch die Matrix

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Ebenso können wir die Rotationen um die x - und y -Achse beschreiben als

$$R_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad R_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Eine allgemeine Drehung $R \in SO(3)$ wird also durch reelle 3 Parameter spezifiziert, denn $R^T R = \mathbb{1}$ stellt 6 Bedingungen an 9 Matrixelemente. Wir stellen die folgenden beiden gängigen Parametrisierungen gegenüber, nämlich

- über die drei Eulerwinkel, $R = R_z(\gamma)R_y(\beta)R_z(\alpha)$ mit $0 \leq \alpha, \beta, \gamma < 2\pi$, oder als
- Drehung um Winkel α um vorgegebene Achse $\vec{n} = \frac{\vec{\alpha}}{\alpha}$. Beachte dabei, dass die Drehung um \vec{n} um Winkel α und die Drehung um $-\vec{n}$ um Winkel $2\pi - \alpha$ identisch sind. Deshalb können wir α gemäß $0 \leq \alpha \leq \pi$ einschränken, müssen aber für $\alpha = \pi$ die Drehung um \vec{n} und $-\vec{n}$ identifizieren.

Da die Gruppe $SO(3)$ *kontinuierlich* von 3 reellen Parametern abhängt, bildet sie ein Beispiel einer *Lie-Gruppe*:

Definition 3.1. *Eine Lie-Gruppe ist eine Gruppe mit der Struktur einer glatten Mannigfaltigkeit, dergestalt dass die differenzierbare Struktur mit den Gruppengesetzen verträglich ist.*

Was bedeutet dies? Zunächst einmal ist eine Mannigfaltigkeit für unsere Zwecke ein glatter Raum, der lokal aussieht wie \mathbb{R}^n . Genauer gesagt gibt es eine stetige Abbildung von \mathbb{R}^n in die Mannigfaltigkeit. Diese muss nicht global definiert sein. Aber lokal, also in offenen Umgebungen eines jeden Punktes, liefert sie eine stetige Abbildung zwischen \mathbb{R}^n und der Mannigfaltigkeit. Für eine differenzierbare Mannigfaltigkeit ist diese Abbildung differenzierbar - dies bezeichnet man mit der differenzierbaren Struktur.¹

Wir haben also einen Parameterbereich als eine Teilmenge von \mathbb{R}^n und eine Abbildung von diesem Parameterbereich auf unsere Mannigfaltigkeit. Im Falle einer Liegruppe ordnet diese Abbildung einem Element β des Parameterbereichs ein Gruppenelement zu. Sei also $g_\beta \in G$ das Gruppenelement zu Parameter β . Den Parameter können wir als Koordinate auf der Gruppenmannigfaltigkeit ansehen. Was diese Mannigfaltigkeit zu einer Gruppe macht, ist die Wirkung der Gruppenmannigfaltigkeit auf sich selbst,

$$g_{\beta_1} g_{\beta_2} = g_{\beta_3}. \quad (3.8)$$

Dies bedeutet, dass die Gruppenwirkung eine Verknüpfung zwischen Elementen des Parameterbereichs induziert. Es muss also eine glatte Abbildung f im Parameterbereich geben, so dass

$$\beta_3 = f(\beta_1, \beta_2). \quad (3.9)$$

Die glatte Funktion $f(\beta_1, \beta_2)$ muss nun verträglich sein mit

- dem Assoziativgesetz, d.h.

$$(g_{\beta_1} g_{\beta_2}) g_{\beta_3} = g_{\beta_1} (g_{\beta_2} g_{\beta_3}), \quad (3.10)$$

$$g_{f(\beta_1, \beta_2)} g_{\beta_3} = g_{\beta_1} g_{f(\beta_2, \beta_3)}, \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow f(f(\beta_1, \beta_2), \beta_3) = f(\beta_1, f(\beta_2, \beta_3)); \quad (3.12)$$

- der Existenz der Eins: Wenn $\beta = 0$ dem Element $g_{\beta=0} = \mathbb{1}$ entspricht, ist

$$f(\beta, 0) = f(0, \beta) = \beta; \quad (3.13)$$

¹Ein einfaches Beispiel einer Mannigfaltigkeit ist z.B. die Kugeloberfläche S^2 in \mathbb{R}^3 . Lokal, also in der Umgebung eines jeden Punktes, sieht S^2 aus wie \mathbb{R}^2 . Eine explizite Abbildung von \mathbb{R}^2 auf S^2 ist gegeben durch die Kugelkoordinaten $\theta, \varphi \rightarrow (\sin(\theta)\sin(\varphi), \sin(\theta)\cos(\varphi), \cos(\theta))^T$. Der notwendige Parameterbereich ist $[0, \pi] \times [0, 2\pi)$, aber es gibt immer einen Punkt, hier den Südpol, der durch diese Abbildung nicht stetig erreicht wird. Insofern ist die Abbildung nicht global definiert.

- der Existenz des Inversen:

$$(g_\beta)^{-1} =: g_{\beta^{-1}} \quad \text{mit} \quad f(\beta^{-1}, \beta) = 0. \quad (3.14)$$

Beachte:

- Rotationen um verschiedene Achsen kommutieren nicht, z.B.

$$R_x(\alpha) R_y(\beta) \neq R_y(\beta) R_x(\alpha). \quad (3.15)$$

Deshalb ist $SO(3)$ eine **nicht-abelsche** Lie-Gruppe.

- Rotationen um eine feste Achse \vec{n} bilden eine abelsche, *ein-parametrische Untergruppe*, gegeben durch Drehungen

$$R_{\vec{n}}(\phi) \quad \text{mit} \quad R_{\vec{n}}(\phi_1) R_{\vec{n}}(\phi_2) = R_{\vec{n}}(\phi_1 + \phi_2). \quad (3.16)$$

3.1.2 Von der Lie-Gruppe zur Lie-Algebra

Die grundlegende Idee der Theorie der Lie-Gruppen besteht im Studium vieler Gruppeneigenschaften anhand des Konzepts der infinitesimalen Gruppenelemente. Aufgrund der Glattheit der Gruppenmannigfaltigkeit können wir den Limes betrachten

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} g_\beta = \mathbb{1}. \quad (3.17)$$

Dies erlaubt die Definition infinitesimaler Transformationen um die $\mathbb{1}$ im Sinne einer Taylorentwicklung. Anstatt dies formal zu definieren, betrachten wir gleich das Beispiel $SO(3)$. Eine Rotationsmatrix, z.B. $R_x(\alpha)$, koennen wir in α entwickeln. Für allgemeine $R \in SO(3)$ erhält man so eine Entwicklung

$$R = \mathbb{1} + \Omega + \dots, \quad (3.18)$$

wobei $R^T R = \mathbb{1}$ erfordert, dass $\Omega^T = -\Omega$. In der Physik wählt man die infinitesimalen Rotationen vorzugsweise hermitesch durch Einfügen von Faktoren i . Für infinitesimale Rotationen um die z -Achse etwa schreibt man

$$R_z = \mathbb{1} - i\phi_z M_z, \quad (3.19)$$

wobei M_z gegeben ist durch

$$\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_z = M_z^\dagger. \quad (3.20)$$

Die infinitesimalen Gruppenelemente sind aufgrund der folgenden Beobachtung von Interesse: *Alle* Gruppenelemente, die kontinuierlich mit der $\mathbb{1}$ verbunden sind, werden durch Hintereinanderausführung infinitesimaler Transformationen erreicht.² Für $SO(3)$ etwa heißt das,

²Im allgemeinen muss die Lie-Gruppe nicht durch eine zusammenhängende Mannigfaltigkeit gegeben sein. In diesem Fall ist nur die Komponente, in der die $\mathbb{1}$ liegt, kontinuierlich mit dieser verbunden. Ein Beispiel einer nicht zusammenhängenden Gruppenmannigfaltigkeit ist die orthogonale Gruppe $O(3)$ mit den beiden Komponenten $\det O = 1$ und $\det O = -1$.

$$R_i(\phi_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i \frac{\phi_i}{N} M_i \right)^N = e^{-i\phi_i M_i}. \quad (3.21)$$

Endliche Rotationen um eine feste Achse \vec{n} lassen sich also schreiben als

$$R_{\vec{n}}(\phi) = \exp(-i\phi \vec{n} \vec{M}) \equiv \exp(-i\phi[n_x M_x + n_y M_y + n_z M_z]). \quad (3.22)$$

Die M_i bezeichnet man als *Erzeugende* von $SO(3)$. Die Hintereinanderausführung der Gruppenmultiplikation für infinitesimale Transformationen entspricht in erster Ordnung der Addition der Erzeugenden:

$$R_x(\delta\alpha)R_y(\delta\beta) = (\mathbb{1} - i\delta\alpha M_x)(\mathbb{1} - i\delta\beta M_y) \quad (3.23)$$

$$= \mathbb{1} - i(\delta\alpha M_x + \delta\beta M_y) + O(2). \quad (3.24)$$

Das bedeutet, dass die Erzeugenden M_i einen Vektorraum bezüglich der Addition bilden. Die nicht-abelsche Struktur der Gruppe ist erst in 2. Ordnung sichtbar und führt unweigerlich zum Kommutator zweier Erzeugender

$$R_x(\delta\alpha)R_y(\delta\beta)[R_y(\delta\beta)R_x(\delta\alpha)]^{-1} = -\delta\alpha \delta\beta [M_x, M_y] + O(3). \quad (3.25)$$

Der Kommutator zweier Erzeugender ist wieder Erzeugende, das Produkt hingegen nicht. Am Beispiel der $SO(3)$ sehen wir dies explizit, denn

$$(M_x M_y)^\dagger \neq (M_x M_y) \quad \text{aber} \quad (i[M_x, M_y])^\dagger = i[M_x, M_y]. \quad (3.26)$$

Der extra Faktor i ist nur in der Physik üblich, wo $M = M^\dagger$ statt $\Omega = \Omega^T$. Der Kommutator $[\ , \]$ stellt deshalb eine Abbildung dar vom Vektorraum der Erzeugenden in sich selbst. Die Erzeugenden der Lie-Gruppe bilden eine sogenannte *Lie-Algebra* bzgl. der Verknüpfung $[\ , \]$.

Definition 3.2. Eine Lie-Algebra \mathfrak{g} ist ein Vektorraum mit einer bilinearen Verknüpfung

$$\cdot : \quad \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}, \quad (3.27)$$

mit den Eigenschaften

- $A \cdot B = -B \cdot A$,
- $A \cdot (B \cdot C) + B \cdot (C \cdot A) + C \cdot (A \cdot B) = 0$.

Tatsächlich erfüllt der Kommutator $[\ , \]$ diese Eigenschaften. Für $\mathfrak{so}(3)$, die Lie-Algebra der Lie-Gruppe $SO(3)$, findet man explizit

$$[M_x, M_y] = iM_z \quad \text{oder} \quad [M_i, M_j] = i\epsilon_{ijk} M_k, \quad (3.28)$$

wobei ϵ_{ijk} der total antisymmetrische Tensor ist mit $\epsilon_{123} = 1$.

Allgemeiner ist eine endlich-dimensionale Lie-Algebra definiert durch Angabe von “ \cdot ” auf einer Basis des Vektorraums, d.h. durch Angabe der Verknüpfung

$$x_A \cdot x_B = f_{AB}^C x_C. \quad (3.29)$$

f_{AB}^C heißen *Strukturkonstanten* der Lie-Algebra. Sie erfüllen

- $f_{AB}^C = -f_{BA}^C$,
- $f_{AB}^D f_{CD}^E + f_{CA}^D f_{BD}^E + f_{BC}^D f_{AD}^E = 0$ (Jacobi-Identität).

Für $\mathfrak{so}(3)$ gilt $f_{jk}^i = i\epsilon_{ijk}$.

3.2 Vom Konzept der Darstellung zum Drehimpuls-Operator

Bislang haben wir uns mit Rotationen als Elementen einer abstrakten (Lie-)Gruppe befasst. Zu einer Rotation R wollen wir nun den entsprechenden Rotations-Operator $\mathcal{D}(R)$ untersuchen, der auf einem quantenmechanischen Zustand die Drehung R realisiert, also den Operator finden

$$|\alpha\rangle \mapsto |\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle. \quad (3.30)$$

Die Frage nach der *konkreten* Realisierung von $\mathcal{D}(R)$ stellen wir an dieser Stelle ausdrücklich hinten. Im einfachsten Beispiel etwa könnte man $\mathcal{D}(R)$ definieren als den Operator, der den Ortseigenzustand $|x, y, z\rangle$ auf den Zustand $|x, y, z\rangle_R = |x', y', z'\rangle$ abbildet mit

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Wir werden allerdings noch allgemeinere Formen des Drehoperators kennenlernen. Unabhängig von der konkreten Realisierung stellen wir die minimale Forderung, dass für $R_3 = R_1 R_2$ auch gelten soll $\mathcal{D}(R_3) = \mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)$.

Da unser momentanes Vorgehen uns noch oft in der Physik begegnen wird, halten wir kurz inne, um uns zu vergegenwärtigen, was wir konzeptionell tun:

- Wir beginnen mit einer abstrakten Gruppe G - hier der Lie-Gruppe $SO(3)$.
- Wir betrachten einen abstrakten Vektorraum V - hier den quantenmechanischen Hilbertraum der Zustände $|\alpha\rangle$.
- Zu jedem $g \in G$ - hier $R \in SO(3)$ - definieren wir einen linearen Operator

$$\mathcal{D}(g) : V \rightarrow V, \quad (3.32)$$

der die Gruppe G auf V realisiert und verträglich mit der Gruppenstruktur ist:

$$\mathcal{D}(g_1 \cdot g_2) = \mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2). \quad (3.33)$$

Insbesondere muss $\mathcal{D}(g)$ invertierbar sein und

$$\mathcal{D}(g^{-1}) = \mathcal{D}(g)^{-1}. \quad (3.34)$$

Definition 3.3. Ein $\mathcal{D}(g) : V \rightarrow V$ mit obigen Eigenschaften heißt *Darstellung* von G , der Vektorraum V ist der *Darstellungsraum*.

Das Konzept der Darstellung ist in der gesamten modernen Physik von universeller und nicht zu überschätzender Wichtigkeit:

(Lie-) Gruppe G	\leftrightarrow	Abstraktes Konzept/ "Idee" einer (kontinuierlichen) Operation
Darstellung $\mathcal{D}(g)$	\leftrightarrow	konkrete Realisierung auf physikalischem Raum

Die Frage, welche Darstellungen für eine gegebene Gruppe G möglich sind, beantwortet die mathematische Disziplin der *Darstellungstheorie*.

Kehren wir zurück zum Drehoperator. In der Quantenmechanik fordern wir Normerhalt unter Drehungen, d.h.

$$\mathcal{D}(R)^\dagger = \mathcal{D}(R)^{-1} : \quad \text{unitäre Darstellung.} \quad (3.35)$$

Tatsächlich gilt das mathematische Theorem:

Jede irreduzible³ Darstellung einer kompakten Lie-Gruppe kann unitär gewählt werden.

Ähnlich wie für die abstrakte Lie-Gruppe selbst ist es fruchtbar, zunächst die Darstellung infinitesimaler Gruppenelemente in einer Taylorentwicklung zu betrachten. Angewendet auf die Drehgruppe suchen wir deshalb zunächst $\mathcal{D}(R)$ für eine infinitesimale Rotation um Achse \vec{n} und Winkel $\delta\phi$ und entwickeln

$$\mathcal{D}(\vec{n}, \delta\phi) = \mathbb{1} - i\vec{G}\vec{n}\delta\phi \quad \text{mit} \quad \vec{G}^\dagger = \vec{G}. \quad (3.36)$$

Da klassisch der Drehimpuls der Erzeugende von Drehungen ist, definieren wir den quantenmechanischen *Drehimpuls-Operator* als

$$\hat{J} = \hbar\vec{G}, \quad \text{d.h.} \quad \mathcal{D}(\vec{n}, \delta\phi) = \mathbb{1} - i\delta\phi \frac{\hat{J}}{\hbar}\vec{n} \quad (3.37)$$

bzw.

$$\mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi)) = e^{-i\phi \frac{\hat{J}}{\hbar}\vec{n}} \quad (3.38)$$

für endliches ϕ .

Die zentrale Einsicht ist, dass wegen der Darstellungseigenschaften die infinitesimalen Darstellungsoperatoren die Kommutatorrelationen der zugrundeliegenden Lie-Algebra erfüllen. In unserem Fall also erfüllt \hat{J}_i die Kommutatorrelationen der $\mathfrak{so}(3)$ -Algebra

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k. \quad (3.39)$$

Unterscheide dabei

- die abstrakte Gruppe: $R = e^{-i\vec{\phi}\vec{M}}$ mit $[M_i, M_j] = i\epsilon_{ijk}M_k$ und die
- Darstellung $\mathcal{D}(R) = e^{-i\vec{\phi}\frac{\hat{J}}{\hbar}}$ mit $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$.

Wir werden also zunächst Darstellungen der Lie-Algebra suchen. Bis auf interessante globale Aspekte, die wir noch behandeln werden, ist dies bereits ausreichend, um auch die Darstellungen der Lie-Gruppe zu finden.

³Der Begriff der Irreduzibilität wird noch an Beispielen erläutert werden.

Wir betonen nochmals, dass die Kommutatorrelationen der Drehimpulses allgemein aus dem Zusammenhang von Drehimpuls und Rotationen folgen, unabhängig von der konkreten Realisierung des Drehimpulsoperators - d.h. unabhängig von der expliziten *Darstellung*. Wie schon erwähnt ist im einfachsten Fall der einzige Effekt der Drehung die Rotation $|x, y, z\rangle \rightarrow |x', y', z'\rangle$. Der dazugehörige Drehimpuls heißt *Bahndrehimpuls* $\vec{\hat{L}}$. Klassisch ist $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$. Quantenmechanisch ist $\vec{\hat{L}} = \hat{x} \times \hat{p}$ bzw. $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$. Aus $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ findet man leicht, dass tatsächlich

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (3.40)$$

Bald werden wir noch allgemeiner Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$ finden, in denen Rotationen zusätzliche Effekte haben (Spin).

3.3 Eigenwerte und Eigenzustände des Drehimpulses

Unabhängig von der konkreten Realisierung der Operatoren \hat{J}_i als Bahndrehimpuls oder allgemeiner (Spin), wollen wir nun alle möglichen Darstellungen der Drehgruppe (genauer: ihrer Lie-Algebra) klassifizieren. Hierzu suchen wir die möglichen Eigenwerte und -zustände der Operatoren \hat{J}_i mit Vertauschungsrelation (3.39). Da $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$, können die \hat{J}_i nicht gleichzeitig diagonalisiert werden. Betrachten wir nun allerdings den Gesamtdrehimpuls $\vec{\hat{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, stellen wir fest, dass gilt

$$[\vec{\hat{J}}^2, \hat{J}_k] = 0 \quad \forall k = 1, 2, 3, \quad (3.41)$$

denn (ab jetzt lassen wir den Hut auf \hat{J}_i weg)

$$[J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] = J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_x, J_z] + [J_y, J_z] J_y \quad (3.42)$$

$$= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y = 0. \quad (3.43)$$

Das heißt, dass \vec{J}^2 und J_k gemeinsam diagonalisierbar sind. Betrachte dazu z.B. \vec{J}^2 und J_z mit Eigenbasis

$$J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle, \quad (3.44)$$

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle. \quad (3.45)$$

Um die möglichen Werte für a, b zu bestimmen, definieren wir die Operatoren

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \text{mit } J_+^\dagger = J_-. \quad (3.46)$$

Man findet die wichtige Relation

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad [J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \quad (3.47)$$

und

$$[\vec{J}^2, J_\pm] = 0. \quad (3.48)$$

Entscheidend für unser weiteres Vorgehen ist, dass

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm \quad (3.49)$$

analog zu den bekannten Relationen des harmonischen Oszillators

$$[N, a] = -a \quad \text{und} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (3.50)$$

ist. Wie dort findet man

$$J_z J_\pm |a, b\rangle = ([J_z, J_\pm] + J_\pm J_z) |a, b\rangle = (\pm \hbar + b) J_\pm |a, b\rangle \quad (3.51)$$

Damit stellen J_\pm die Leiteroperatoren dar, da J_+ den Eigenwert von J_z erhöht und J_- den Eigenwert erniedrigt. Da $[\vec{J}^2, J_\pm] = 0$, ist auch $J_\pm |a, b\rangle$ Eigenzustand von \vec{J}^2 , denn

$$\vec{J}^2 J_\pm |a, b\rangle = J_\pm \vec{J}^2 |a, b\rangle = a J_\pm |a, b\rangle. \quad (3.52)$$

Daraus folgern wir

$$J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle, \quad J_- |a, b\rangle = c_- |a, b - \hbar\rangle. \quad (3.53)$$

Um a, b zu finden, gehen wir ähnlich vor wie beim harmonischen Oszillator. Zunächst schreiben wir

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2. \quad (3.54)$$

Daraus sehen wir, dass $\vec{J}^2 - J_z^2$ positiv-semidefinit ist, denn

$$\langle \psi | \vec{J}^2 - J_z^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | J_+ J_- + J_- J_+ | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\|J_- |\psi\rangle\|^2 + \|J_+ |\psi\rangle\|^2) \geq 0. \quad (3.55)$$

Wir haben dabei benutzt, dass $J_\pm^\dagger = J_\mp$. Damit ergibt sich dann umgekehrt

$$\langle a, b | \vec{J}^2 - J_z^2 | a, b \rangle = (a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle \geq 0, \quad (3.56)$$

was

$$a \geq b^2 \quad (3.57)$$

bedeutet. Da $J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle$, muss es einen Wert b_{\max} geben so dass $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$. Andersfalls würde b durch wiederholte Anwendung von J_+ beliebig groß werden und $a \geq b^2$ verletzen. Insbesondere ist also $J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$. Dieses Produkt können wir schreiben als

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i(J_y J_x - J_x J_y) = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z. \quad (3.58)$$

Daraus folgern wir

$$(\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle = 0, \quad (3.59)$$

was zu

$$(a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max}) |a, b_{\max}\rangle = 0 \quad (3.60)$$

führt. Das bedeutet also

$$a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar). \quad (3.61)$$

Ebenso muss es einen Wert b_{\min} geben, so dass

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0 \quad (3.62)$$

gilt. Wir argumentieren analog zu eben, dass

$$0 = J_+ J_- |a, b_{\min}\rangle = (\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |a, b_{\min}\rangle \quad (3.63)$$

$$= (a - b_{\min}^2 + \hbar b_{\min}) |a, b_{\min}\rangle, \quad (3.64)$$

was dann

$$b_{\min}(b_{\min} - \hbar) = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) \quad \text{mit } b_{\max} \geq b_{\min} \quad (3.65)$$

bedeutet. Das liefert uns die Bedingung

$$b_{\max} = -b_{\min} \quad \text{mit } b_{\max} \geq 0. \quad (3.66)$$

Dies lässt sich auch schreiben als

$$b_{\max} \geq b \geq -b_{\max}. \quad (3.67)$$

Beginnen wir nun also mit dem Zustand $|a, b_{\max}\rangle$. Wir haben gerade gesehen, dass es einen kleinsten Wert $n \in \mathbb{N}$ geben muss, so dass $J_-^{n+1} |a, b_{\max}\rangle = 0$. Das bedeutet wiederum

$$J_-^n |a, b_{\max}\rangle = |a, b_{\min}\rangle, \quad (3.68)$$

was uns mit (3.66) umgehend zu

$$b_{\max} - n\hbar = b_{\min} = -b_{\max} \quad (3.69)$$

führt. Das ist gleichbedeutend mit

$$b_{\max} = \frac{1}{2}n\hbar, \quad n \in \mathcal{N}. \quad (3.70)$$

Wir führen nun eine neue Notation ein und definieren $j = \frac{n}{2}$. In dieser Notation finden wir

$$a = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{und} \quad b = \hbar m, \quad (3.71)$$

wobei $m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\}$. Es gilt, dass entweder

$$j \in \mathbb{Z} \Rightarrow m \in \mathbb{Z} \quad \text{oder} \quad j \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2} \Rightarrow m \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}. \quad (3.72)$$

Wir haben damit alle möglichen Eigenzustände $|j, m\rangle$ von \vec{J}^2 und J_z mit $\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$ gefunden:

$$\vec{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad (3.73)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \quad (3.74)$$

wobei m und j die folgenden Bedingungen erfüllen müssen,

$$m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\} \quad \text{und} \quad j \in \mathbb{Z} \quad \text{oder} \quad j \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}. \quad (3.75)$$

Wir wollen nun noch die Koeffizienten c_{jm}^\pm in $J_\pm |j, m\rangle = c_{jm}^\pm |j, m \pm 1\rangle$ bestimmen. Wir betrachten dazu

$$\|J_+ |j, m\rangle\|^2 = |c_{jm}^+|^2 \langle j, m+1 | j, m+1\rangle = |c_{jm}^+|^2 \quad (3.76)$$

$$= \langle j, m | J_+^\dagger J_+ |j, m\rangle = \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle. \quad (3.77)$$

Verwenden wir nun $J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ so können wir die Gleichungskette (3.77) fortsetzen:

$$= \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle = (j(j+1) - m^2 - m)\hbar^2. \quad (3.78)$$

Damit haben wir die Eigenwerte c_{jm}^+ bis auf einen Phase, die wir zu 0 setzen, bestimmt:

$$|c_{jm}^+|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m(m+1)) = \hbar^2[(j-m)(j+m+1)]. \quad (3.79)$$

Wir fassen unser Ergebnis zusammen als

$$J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar |j, m \pm 1\rangle. \quad (3.80)$$

Abschließend ziehen wir folgendes Fazit:

- Die möglichen Eigenwerte von \vec{J}^2 sind $j(j+1)$ mit $j \in \mathbb{Z}$ oder $j \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}$.
- Die $(2j+1)$ orthogonalen Zustände $|j, m\rangle$ mit $m \in \{-j, \dots, j\}$ spannen den $(2j+1)$ -dimensionalen Darstellungsraum von \hat{J} auf. Man nennt diese Darstellung mit \vec{J}^2 -Quantenzahl j auch die $(2j+1)$ -dimensionale Darstellung.
- Drehungen führen aus diesem Raum nicht heraus, denn

$$\vec{J}^2 \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = j(j+1) \mathcal{D}(R) |j, m\rangle. \quad (3.81)$$

- $\langle \{j, m\} \rangle$ besitzt keine invarianten echten Unterräume unter $\mathcal{D}(R)$. Man nennt Darstellungen mit dieser Eigenschaft *irreduzibel*, d.h. der Darstellungsraum ist nicht direkte Summe invarianter Darstellungen.
- Beachte, dass in die Klassifikation nur die Lie-Algebra-Relationen (3.39) eingehen. Wir haben also alle Darstellungen der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ gefunden. Die Frage nach den Darstellungen der Lie-Gruppe werden wir später stellen.

Nun fragen wir uns, welche Werte in der Natur realisiert sind - d.h. wir fragen: In welchen Darstellungen transformiert ein Teilchen?

3.4 Bahndrehimpuls & Kugelflächenfunktionen

Wir betrachten zunächst den Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ mit Ortsraumdarstellung

$$\langle \vec{x} | L_i | \alpha \rangle = L_i \langle \vec{x} | \alpha \rangle = L_i \psi_\alpha(\vec{x}) \quad \text{für} \quad (3.82)$$

$$L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x). \quad (3.83)$$

Nach Übergang zu sphärischen Koordinaten

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \quad (3.84)$$

findet man

$$\partial_\phi = \frac{\partial x}{\partial \phi} \partial_x + \frac{\partial y}{\partial \phi} \partial_y + \frac{\partial z}{\partial \phi} \partial_z \quad (3.85)$$

$$= -r \sin \theta \sin \phi \partial_x + r \sin \theta \cos \phi \partial_y \quad (3.86)$$

$$= -y \partial_x + x \partial_y. \quad (3.87)$$

Damit ist

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (3.88)$$

Ähnlich finden wir

$$L_x = -i\hbar(-\sin \phi \partial_\theta - \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (3.89)$$

$$L_y = -i\hbar(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi). \quad (3.90)$$

Zusammen erhalten wir daraus

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) \right]. \quad (3.91)$$

Wir suchen nun die Wellenfunktionen zu $|l, m\rangle$, $\langle \vec{x} | l, m \rangle$. Da L_i unabhängig von r ist, genügt Expansion in Kugelkoordinaten θ und ϕ :

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle =: Y_l^m(\theta, \phi). \quad (3.92)$$

Aus $L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$ und $\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$ folgt die Differentialgleichung

$$-i\hbar \partial_\phi Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi), \quad \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + l(l+1) \right] Y_l^m(\theta, \phi) = 0. \quad (3.93)$$

Die Struktur der Gleichung erzwingt einen Separationsansatz

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \Phi_m(\phi) \chi_{lm}(\theta). \quad (3.94)$$

Damit folgt aus dem ersten Teil des DGL-Systems

$$\Phi_m(\phi) = N_\Phi e^{im\phi}, \quad N_\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (3.95)$$

Eingesetzt in den zweiten Teil des DGL-Systems ergibt dies

$$\left[\frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1) \right] \chi_{lm}(\theta) = 0. \quad (3.96)$$

Bevor wir die Lösung von χ_{lm} angeben, halten wir folgende wichtige Erkenntnis fest: Unter räumlicher Drehung um 2π muss der Eigenzustand $|\vec{x}\rangle = |r, \theta, \phi\rangle$ zu sich selbst zurückkommen. Das bedeutet

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \quad \Rightarrow \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (3.97)$$

Für den Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ spielen die Darstellungen mit $l \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}$ also keine Rolle. Wir lösen nun den zweiten Teil des DGL-System mit der Variablensubstitution

$$\xi = \cos\theta \quad \Rightarrow \quad \partial_\theta = -\sin\theta \partial_\xi \quad (3.98)$$

und

$$\chi_{lm}(\theta) \rightarrow P_{lm}(\xi). \quad (3.99)$$

Damit erhalten wir

$$\left(\frac{d}{d\xi} (1-\xi^2) \frac{d}{d\xi} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right) P_{lm}(\xi) = 0. \quad (3.100)$$

Lösung hiervon sind die *assozierten Legendrepolynome*

$$P_{lm}(\xi) = \frac{1}{2^l l!} (1-\xi^2)^{m/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^{l+m} (\xi^2-1)^l, \quad m \geq 0. \quad (3.101)$$

Für sie gilt

$$P_{lm}(\xi) = (1-\xi^2) \left(\frac{d}{d\xi} \right)^m P_l(\xi), \quad (3.102)$$

wobei

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^l (\xi^2-1)^l \quad (3.103)$$

die bekannten Legendre-Polynome sind. Sie sind wie folgt normiert:

$$\int_{-1}^1 d\xi P_{lm}(\xi) P_{l'm}(\xi) = \delta_{ll'} \underbrace{\frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}}_{=: |N_\chi|^{-2}} \quad (3.104)$$

Insgesamt haben wir also gefunden:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} N_{lm} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad N_{lm} = N_\phi N_\chi = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \quad (3.105)$$

Wählt man $m = 0$ so ergibt sich

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (3.106)$$

Dabei haben wir die Phase $(-1)^{(m+|m|)/2}$ so gewählt, dass

$$(L_-)^m Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^0(\theta, \phi) \quad (3.107)$$

gilt. $Y_l^m(\theta, \phi)$ sind die *Kugelflächenfunktionen*. Sie erfüllen

$$L_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi), \quad (3.108)$$

$$\vec{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (3.109)$$

Weiterhin gilt für sie

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*. \quad (3.110)$$

Zur Verdeutlichung geben wir die Kuegelflaechenfunktionen fuer die ersten Werte an:

- $l = 0$: = s-Orbital: $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
- $l = 1$: = p-Orbital: $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$, $Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
- $l = 2$: = d-Orbital: $Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \dots$

3.5 Anwendung: Zentralpotential & Coulombpotential

3.5.1 Allgemeines zum Zentralpotential

Wir betrachten ein Teilchen im radialsymmetrischen Potential $V(\vec{x}) = V(r)$. Der zugehörige Hamilton-Operator ist dann

$$H = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + V(\hat{r}), \quad (3.111)$$

wobei M die Masse des Teilchens angibt. Aufgrund allgemeiner Prinzipien stellen wir fest:

- H, \vec{L}^2, L_z sind gemeinsam diagonalisierbar. Der Grund dafür ist, dass \vec{L} Drehungen generiert und Operatoren \hat{A} transformieren wie

$$\hat{A} \rightarrow (e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \cdot \vec{L}})^\dagger \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \cdot \vec{L}} \quad (3.112)$$

beziehungsweise infinitesimal

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \delta \phi \vec{n} \cdot [\hat{A}, \vec{L}]. \quad (3.113)$$

Damit impliziert die Invarianz unter Drehungen also

$$[H, L_i] = 0 = [H, \vec{L}^2]. \quad (3.114)$$

- Die Energieeigenwerte sind entartet bezüglich der L_z -Quantenzahl m : Betrachte den Energieeigenzustand $|E_{l,m}, l, m\rangle$ mit $H|E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m}|E_{l,m}, l, m\rangle$. Wegen $[H, L_{\pm}] = 0$ ist

$$HL_{\pm}|E_{l,m}, l, m\rangle = L_{\pm}H|E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m}L_{\pm}|E_{l,m}, l, m\rangle. \quad (3.115)$$

Wir haben aber bereits gesehen, dass L_{\pm} die Quantenzahl m erhöht / erniedrigt. Deshalb müssen die Energieeigenwerte unabhängig von m sein. Umgekehrt ausgedrückt lautet dieses Argument, dass die Entartung der Energieeigenwerte bezüglich m eine weitere Erhaltungsgröße jenseits von L_z - hier L_{\pm} bzw. \vec{L} - impliziert.

Betrachten wir nun die Darstellung von H in Kugelkoordinaten. Dazu schreiben wir zunächst den Impulsoperator als

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla} = \vec{e}_r\partial_r + \vec{e}_{\theta}\frac{1}{r}\partial_{\theta} + \vec{e}_{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\partial_{\phi}. \quad (3.116)$$

Die explizite Auswertung von $\Delta = \vec{\nabla}^2$ ergibt:

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_{\phi}^2 + \frac{1}{\sin\theta}\partial_{\theta}(\sin\theta\partial_{\theta})\right]. \quad (3.117)$$

Ein Vergleich mit dem Operator \vec{L}^2 in Gleichung (3.91) führt uns sofort zu

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2\hbar^2}\vec{L}^2. \quad (3.118)$$

Damit können wir H schreiben als

$$H = \frac{1}{2M}p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{2Mr^2} + V(r), \quad (3.119)$$

wobei

$$p_r = -i\hbar\left(\partial_r + \frac{1}{r}\right) \quad (3.120)$$

der Radialimpuls ist. Die Wellenfunktionen der Energieeigenzustände erfüllen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{\vec{L}^2}{2Mr^2} + V(r)\right]\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi). \quad (3.121)$$

Die gleichzeitige diagonalisierbarkeit von \vec{L} , L_z und H erzwingt den Separationsansatz $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$. Damit erhalten wir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\partial_r + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r). \quad (3.122)$$

Der einfacheren Notation halber definieren wir nun noch $u(r) := rR(r)$. Damit lautet obige Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r). \quad (3.123)$$

Dies ist eine 1-dimensionale Schrödingergleichung mit effektivem Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \underbrace{V_{\text{zentr.}}(r)}_{\text{abstoßendes Zentrifugalpotential}} \quad \text{mit } V_{\text{zentr.}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \quad (3.124)$$

Bei geeignetem $V(r)$ existieren Bindungszustände. Diese müssen erfüllen

- Normierbarkeit:

$$\int d^3x |\psi(x)|^2 = \int d\Omega |Y_l^m|^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty, \quad (3.125)$$

woraus folgt, dass $\lim_{r \rightarrow \infty} < \frac{a}{r^{1/2}}$ gelten muss.

- Gutes Verhalten bei $r \rightarrow 0$:

$$\Delta \left(\frac{u(r)}{r} \right) = \left(\Delta \frac{1}{r} \right) u(r) + \dots \quad (\text{Produktregel}). \quad (3.126)$$

Es gilt $\Delta \frac{1}{r} = \delta^{(3)}(x)$. Das bedeutet, dass wenn $V(r) \approx \delta(r)$ gilt, $u(0) = 0$ gelten muss.

Wenden wir uns nun der Form der asymptotischen Lösung zu:

- $r \rightarrow 0$

Unter der Annahme, dass $V_{\text{zentr.}} \cong \frac{1}{r^2}$ dominiert bei $r \rightarrow 0$, wie beispielsweise für das Coulomb-Potential $\sim -\frac{1}{r}$, ergibt sich asymptotisch für $r \rightarrow 0$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right] u(r) = 0. \quad (3.127)$$

Der Lösungsansatz $u(r) = r^k$ führt zu $-k(k-1) + l(l+1) = 0$, was durch $k = l+1$ oder $k = -l$ erfüllt wird. Die allgemeine Lösung hat also die Form

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \quad (3.128)$$

aber $u(0) = 0$ erzwingt $B = 0$.

- $r \rightarrow \infty$

Unter der Annahme $V_{\text{eff}}(r) \rightarrow 0$ erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = Eu(r). \quad (3.129)$$

Für geeignete V_{eff} der Form existieren Bindungszustände mit $E < 0$, also

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = |E|u(r) \quad \Rightarrow \quad u(r) = e^{\pm \kappa r} \quad \text{mit } \kappa = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar}. \quad (3.130)$$

Die Normierbarkeit der Wellenfunktion schränkt die Lösung ein auf $u(r) = Ce^{-\kappa r}$.

3.5.2 Das Coulombpotential

Betrachte nun ein Teilchen im Potential eines Atomkerns

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} = -\frac{e_0^2 Z}{r}. \quad (3.131)$$

Wir führen die einheitenlose Kombination $\rho = \kappa r$ mit $\kappa = \frac{\sqrt{2M|e|}}{\hbar}$ ein. Damit können wir für die Bindungszustände ($E < 0$) schreiben:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u(\rho) = 0 \text{ mit } \rho_0 = e_0^2 Z \frac{\kappa}{|E|}. \quad (3.132)$$

Nun machen wir einen Ansatz für $u(\rho)$, welches dem asymptotischen Verhalten für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$ Rechnung trägt

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho). \quad (3.133)$$

Eingesetzt in die Gleichung (3.132) ergibt sich

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dw}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))w(\rho) = 0. \quad (3.134)$$

Wir machen eine Potenzreihenansatz für die Funktion $w(\rho)$,

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (3.135)$$

Wir weisen darauf hin, dass $k < 0$ direkt ausgeschlossen werden kann aufgrund des Verhaltens für $\rho \rightarrow 0$. Wir erhalten mit diesem Ansatz die Gleichung

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + (\rho_0 - 2(l+1))\rho^k] = 0. \quad (3.136)$$

Da die Gleichung für alle ρ gelten muss, müssen die Koeffizienten aller Ordnungen von ρ^k separat verschwinden. Das bedeutet

$$a_{k+1}((k+1)k + 2(l+1)(k+1)) + a_k(-2k + \rho_0 - 2(l+1)) = 0. \quad (3.137)$$

Die entspricht der Rekursionsformel

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k. \quad (3.138)$$

Wir stellen uns nun die Frage, ob die Lösung normierbar ist. Betrachten wir das asymptotische Verhalten der Reihe, welches durch $a_k, k \rightarrow \infty$ bestimmt wird. In diesem Limes gilt

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2}{k}. \quad (3.139)$$

Wir kennen dieses Verhalten von $e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} 2^k \rho^k$. Aus der Forderung nach der Normierbarkeit der Wellenfunktion folgt nun die Bedingung, dass die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ abbricht, d.h.

$$\exists N : a_k = 0 \quad \forall k \geq N + 1, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (3.140)$$

Aus der Rekursionsformel folgt damit

$$2(N + l + 1) - \rho_0 = 0. \quad (3.141)$$

Wir definieren nun die Hauptquantenzahl $n := N + l + 1$ und finden

$$\rho_0 \equiv e_0^2 Z \frac{\kappa}{|E|} = 2n \text{ mit } \kappa = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar}. \quad (3.142)$$

Die möglichen Energieeigenwerte sind quantisiert:

$$E_n = \frac{-MZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.143)$$

Das Energiespektrum ist entartet:

- Für gegebenes n sind alle Werte $l = 0, 1, \dots, n - 1$ möglich
- Für alle diese l ist $m = l, l - 1, \dots, -l$ möglich

Das bedeutet, dass es zu jedem E_n

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (3.144)$$

Eigenzustände gibt. Wir möchten dazu die folgenden beiden Anmerkungen machen:

- Die Entartung der Energien E_n bezüglich der L_z -Quantenzahl m konnte erwartet werden aufgrund der Radialsymmetrie $V = V(r)$
- Die Entartung bezüglich l gilt nur im speziellen Fall $V(r) = -\frac{1}{r}$ und deutet auf eine Symmetrie über $SO(3)$ hinaus hin.

Der zweite, eben erwähnte Punkt bedeutet, dass die $so(3)$ Quantenzahlen l, m offenbar nicht zur Spezifizierung des Eigenwertes von H genügen. Folglich gibt es einen weiteren Operator \hat{O} der

$$[H, \hat{O}] = 0 \quad (3.145)$$

erfüllt. Für $V(r) = \frac{e_0^2}{r}$ ist dies der *Lenz-Runge-Vektor*

$$\hat{A} = \frac{1}{2M} (\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p}) - \frac{e_0^2}{r} \hat{x}. \quad (3.146)$$

Für ihn kann man zeigen, dass gilt

$$[\hat{A}, H] = 0. \quad (3.147)$$

Im klassischen Coulombpotential entspricht dies der Erhaltung der Hauptachsenrichtung. Aus

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k, \quad (3.148)$$

was wir in den Übungen beweisen werden, folgt, dass \vec{A} als Vektor transformiert und A_z die Entartung der Energieeigenwerte aufhebt. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass

$$\frac{1}{2}(L_i \pm A_i) \quad (3.149)$$

eine $so(3) \times so(3)$ Algebra bilden, welche eine algebraische Lösung ermöglicht. Wir werden in den Übungen näher darauf eingehen.

Wenden wir uns nun der expliziten Lösung der Wellenfunktion zu:

Mit $\rho_0 = 2n$ kann die DGL für $w(p)$ in die Form der *Laguerre-DGL* gebracht werden:

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_r^s(x) + (s+1-x) \frac{d}{dx} L_r^s(x) + (r-s) L_r^s(x) = 0, \quad (3.150)$$

wobei wir $x = 2\rho$, $s = 2l+1$ und $r = n+l$ gesetzt haben. Die Lösung dieser DGL sind die *assozierten Laguerre Polynome*

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x) \quad (3.151)$$

mit den Laguerre Polynomen

$$L_r(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r. \quad (3.152)$$

Nun können wir die endgültige Lösung notieren:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.153)$$

mit

$$R_{nl}(r) = \frac{u(r)}{r} = -N(2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{(2l+1)}(2\kappa r), \quad (3.154)$$

wo wir $N = \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3}}$ und $\kappa = \frac{MZe_0^2}{\hbar^2 n} = \frac{Z}{na}$ benutzt haben. Dabei ist $a = \frac{\hbar^2}{Me_0^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ der Bohrsche Radius. Die Energieeigenwerte sind

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (3.155)$$

und $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.037}$ (Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante). Für das Wasserstoffatom erhalten wir mit $Z = 1$

$$E_1 = -13.6 \text{eV} = -1 \text{Ry}. \quad (3.156)$$

Die Übergangsfrequenz zwischen zwei Energieniveaus berechnet sich somit zu

$$\hbar\omega_{nm} = E_m - E_n = 1 \text{Ry} \left(-\frac{1}{m^2} + \frac{1}{n^2} \right). \quad (3.157)$$

3.6 Spin

3.6.1 Phänomenologie des Spins

Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass ein klassisches Teilchen mit Drehimpuls \vec{L} im Magnetfeld \vec{B} die Energie

$$U = -\vec{\mu}\vec{B} \quad (3.158)$$

besitzt, wobei μ das magnetische Moment

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2Mc} \vec{L} \quad (q \text{ Ladung, } M \text{ Masse}) \quad (3.159)$$

ist. Im *Stern-Gerlach-Experiment* (1922) wurde dies für Silberatome überprüft, die durch ein \vec{B} -Feld $\vec{B} = B z \vec{e}_z$ geschickt wurden.

Die klassische Kraft, die auf ein solches Silberatom wirkt, berechnet sich zu

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U = \frac{qB}{2Mc} L_z \vec{e}_z. \quad (3.160)$$

In der Quantenmechanik erwarten wir für Teilchen mit Bahndrehimpuls $|l, m\rangle$ die Kraft

$$F_z = \frac{qB}{2Mc} m\hbar \quad (3.161)$$

und somit eine $(2l + 1)$ -fache Aufspaltung des Strahls.

Die Valenzelektronen von Silber liegen in der 5s-Schale, d.h. $l = 0$. Daraus folgt, dass der Strahl ungehindert passieren sollte. Tatsächlich gefunden wurde eine 2-fache Aufspaltung des Strahls, wie man für einen halbzahligen Drehimpuls erwarten würde. Man interpretiert dieses Ergebnis wie folgt:

- Das 5s-Elektron besitzt einen Anteil am Gesamtdrehimpuls \vec{J} , der nichts mit dem Bahndrehimpuls \vec{L} zu tun hat.
- Dieser weitere Drehimpuls heißt Spin \vec{S} und muss beschrieben werden durch die Quantenzahlen

$$|s, s_z\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle. \quad (3.162)$$

Offenbar sind also die halbzahligen Darstellungen der Drehimpulsalgebra in der Natur realisiert in der Form eines "inneren Drehimpulses".

Der Spinoperator \vec{S} erfüllt alle Eigenschaften eines Drehimpulses; die $so(3)$ -Algebra ist realisiert in der $j = 1/2$ Darstellung:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}, \quad (3.163)$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k, \quad (3.164)$$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad (3.165)$$

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm\hbar S_{\pm}, \quad (3.166)$$

$$[S_+, S_-] = 2\hbar S_z. \quad (3.167)$$

Eine mögliche Darstellung und die zugehörigen Wirkungen des Spinoperators und seiner Komponenten sind gegeben durch

$$|s, s_z = +1/2\rangle = |1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle, \quad (3.168)$$

$$|s, s_z = -1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle \quad (3.169)$$

und

$$\vec{S}^2 |\uparrow\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |\uparrow\rangle, \quad \vec{S}^2 |\downarrow\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |\downarrow\rangle \quad (3.170)$$

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad (3.171)$$

$$S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle. \quad (3.172)$$

Die Operatoren S_+ , S_- , S_z können in der $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle)$ Basis durch 2×2 -Matrizen dargestellt werden:

$$\sigma_i = \frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_i | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_i | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_i | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_i | \downarrow \rangle \end{pmatrix}. \quad (3.173)$$

Wir erhalten daraus die Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.174)$$

Wir führen nun die Pauli-2-Komponenten-Notation ein:

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.175)$$

und

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i. \quad (3.176)$$

Damit können wir z.B. schreiben

$$S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.177)$$

Definition 3.4. Die $s = 1/2$ Darstellung heißt Spindarstellung. Ein Element des $s = 1/2$ Darstellungsraums heißt Spinor.

3.6.2 Ontologie des Spins

Die bisherige, phänomenologische Behandlung des Spins ist etwas ad hoc. Um zu verstehen, was Spin tatsächlich ist, müssen wir mathematisch etwas ausholen. Spin und Bahndrehimpuls stellen zwei unterschiedliche Darstellungsarten der Drehgruppe dar. Gegeben sei nun eine Rotation $g \in SO(3)$ mit Drehmatrix $R_g \equiv R(\vec{n}, \phi)$. Der Bahndrehimpuls \vec{L} generiert Transformationen, die den Eigenzustand $|x, y, z\rangle$ rotieren:

$$|x, y, z\rangle \mapsto |x', y', z'\rangle, \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R_g \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (3.178)$$

Die Wellenfunktion eines Zustands α , $\psi_{|\alpha\rangle}(\vec{x})$ transformiert unter aktiven Drehungen wie

$$\psi(\vec{x}) \mapsto \psi'(\vec{x}) = T_g \psi(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}). \quad (3.179)$$

Tatsächlich ist für $R_g = e^{-i\phi \vec{n} \vec{M}} = \mathbb{1} - i\phi \sum_i n_i M_i + \dots$ die Wirkung von R_g^{-1} infinitesimal gegeben als

$$R_g^{-1}\vec{x} = \vec{x} - \phi \vec{n} \times \vec{x}. \quad (3.180)$$

Damit ergibt sich

$$T_g \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) - \phi(\vec{n} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) + \dots \quad (3.181)$$

$$= \psi(\vec{x}) - \phi(\vec{x} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{n} \psi(\vec{x}) + \dots \quad (3.182)$$

$$= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} (\vec{r} \times \vec{p}) \right) \psi(\vec{x}) + \dots \quad (3.183)$$

Somit können wir schreiben

$$T_g \psi(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{L}} \psi(\vec{x}). \quad (3.184)$$

Eine Abbildung $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, die unter Drehung transformiert wie $\psi \mapsto T_g \psi$, heißt skalare Funktion oder *Skalarfeld*. Der Bahndrehimpuls \vec{L} liefert eine Darstellung der Drehgruppe auf dem Raum $H(\mathbb{R}^3)$ der Skalarfelder.

In der Physik spielen allgemeinere Transformationsverhalten eine wichtige Rolle. Aus der klassischen Feldtheorie kennen wir beispielsweise den Begriff des *Vektorfeldes* als Abbildung

$$\vec{v} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \vec{x} \mapsto \vec{v}(\vec{x}) \quad (3.185)$$

und dem Transformationsverhalten

$$\vec{v}(\vec{x}) \mapsto \vec{v}'(\vec{x}) := R_g \vec{v}(R_g^{-1}\vec{x}), \quad R_g = e^{-i\phi \sum_i n_i M_i}. \quad (3.186)$$

Der Raum $V = \mathbb{R}^3$ kann interpretiert werden als der 3-dimensionale Darstellungsraum der Drehgruppe $SO(3)$, entsprechend der Quantenzahlen $j = 1$, $m_z = +1, 0, -1$. Die genaue Form der Darstellung werden wir in den Übungen behandeln. Dies bezeichnet man als die *fundamentale* oder *Vektordarstellung*.

Allgemeiner können wir ein Feld mit Werten im Darstellungsraum $V_{\mathcal{D}}$ der Darstellung \mathcal{D} der Drehalgebra betrachten. Das heißt, dass wir die Darstellung $\mathcal{D} : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ und das Feld

$$v : \mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}, \quad \vec{x} \mapsto v(\vec{x}) \in V_{\mathcal{D}}, \quad (3.187)$$

betrachten, welches wie

$$v(\vec{x}) \mapsto v'(\vec{x}) = \mathcal{D}_g v(R_g^{-1}\vec{x}) \quad (3.188)$$

unter Drehungen $\vec{x} \mapsto R_g \vec{x}$ transformiert. In diesem Sinne können wir identifizieren:

$$\text{Skalarfeld} \quad \leftrightarrow \quad \text{triviale Darstellung } \mathcal{D}_g = \mathbb{1} \quad \forall g. \quad (3.189)$$

$$\text{Vektorfeld} \quad \leftrightarrow \quad \text{fundamentale / 3-dimensionale Darstellung } \mathcal{D}_g = R_g (= R(\vec{n}, \phi)). \quad (3.190)$$

Insbesondere können wir Felder mit Werten im Darstellungsraum der $s = 1/2$ Darstellung betrachten, die *Spinorfelder* $\Psi(\vec{x})$. In Pauli-Notation bedeutet das

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.191)$$

Wenn $g \in \text{SO}(3)$ der Drehung $R_g = R(\vec{n}, \phi)$ entspricht, dann ist:

$$\mathcal{D}_g = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{S}} = e^{-i \frac{\phi}{2} \vec{n} \vec{\sigma}} \quad (3.192)$$

und insgesamt transformiert $\Psi(\vec{x})$ wie

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} \mapsto e^{-i \frac{\phi}{2} \vec{n} \vec{\sigma}} \begin{pmatrix} \psi_+(e^{i\phi \vec{n} \vec{M}^\dagger} \vec{x}) \\ \psi_-(e^{i\phi \vec{n} \vec{M}^\dagger} \vec{x}) \end{pmatrix} \quad (3.193)$$

$$= e^{-i \frac{\phi}{2} \vec{n} \vec{\sigma}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{L}} \psi_+(\vec{x}) \\ e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{L}} \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.194)$$

Die genaue Form von $e^{-i \frac{\phi}{2} \vec{n} \vec{\sigma}}$ werden wir gleich behandeln.

Kehren wir aber zunächst zurück zur allgemeinen Darstellung $V_{\mathcal{D}}$: Der Raum $H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$ der Abbildungen $\mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ kann als *Tensorprodukt* aufgefasst werden:

$$H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}}) = V_{\mathcal{D}} \otimes H(\mathbb{R}^3). \quad (3.195)$$

Wir erinnern an dieser Stelle an das Tensorprodukt. Gegeben seien 2 Vektorräume V, W mit Basis $\{e_i, i = 1, \dots, \dim V\}$ und $\{\tilde{e}_i, i = 1, \dots, \dim W\}$. Dann ist das *Tensorprodukt* $V \otimes W$ der Vektorraum mit $\dim(V \otimes W) = \dim V \dim W$ und Basis $e_i \otimes \tilde{e}_j$, so dass für $v = \sum_i v_i e_i$, $w =$

$$\sum_j w_j \tilde{e}_j$$

$$V \otimes W \ni v \otimes w = \sum_{i,j} v_i w_j e_i \otimes \tilde{e}_j. \quad (3.196)$$

Für eine genauere Definition verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur zur linearen Algebra. Insbesondere, wenn $A : V \rightarrow V$ und $B : W \rightarrow W$ lineare Operatoren sind, agiert

$$A \otimes B : V \otimes W \rightarrow V \otimes W, \quad (A \otimes B)(v \otimes w) = Av \otimes Bw \quad (3.197)$$

und das Skalarprodukt auf V und W induziert ein Skalarprodukt auf $V \otimes W$,

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle_v \cdot \langle w_1 | w_2 \rangle_w. \quad (3.198)$$

Man kann sich leicht überzeugen, dass $H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}}) = V_{\mathcal{D}} \otimes H(\mathbb{R}^3)$. Beispielsweise kann man ein Spinorfeld

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (3.199)$$

schreiben als

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \psi_+(\vec{x}) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \psi_-(\vec{x}), \quad (3.200)$$

wo $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ den 2-dimensionalen Darstellungsraum zu $s = 1/2$ aufspannen. Ein Feld $v(\vec{x}) \in H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$ transformiert damit wie

$$U_g : v(\vec{x}) \mapsto U_g v(\vec{x}), \quad (3.201)$$

wobei

$$U_g = \mathcal{D}_g \otimes T_g \quad (3.202)$$

mit $\mathcal{D}_g : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ und $T_g : H(\mathbb{R}^3) \rightarrow H(\mathbb{R}^3)$. Das bedeutet

$$U_g v(\vec{x}) = \mathcal{D}_g v(R_g^{-1} \vec{x}). \quad (3.203)$$

Nun können wir beantworten, was Spin ist: Der Spinoperator \vec{S} ist definiert als Generator von \mathcal{D}_g . Infinitesimal gilt:

$$U_g \cong (\mathbb{1}_{V_{\mathcal{D}}} - \frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{S}) \otimes (\mathbb{1}_{H(\mathbb{R}^3)} - \frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{L}) \quad (3.204)$$

$$= \mathbb{1}_{V \otimes H} - \frac{i}{\hbar} \phi (\vec{n} \vec{S} \otimes \mathbb{1}_H) - \frac{i}{\hbar} \phi (\mathbb{1}_V \otimes \vec{n} \vec{L}) \quad (3.205)$$

$$\cong \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \vec{J} \quad (3.206)$$

mit dem Gesamtdrehimpulsoperator

$$\vec{J} = \vec{S} \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes \vec{L} \equiv \vec{S} + \vec{L}. \quad (3.207)$$

Die Notation $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ist gängig, aber ungenau. Da \vec{S} und \vec{L} auf unterschiedlichen Räumen wirken, ist

$$[\vec{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \vec{L}] = 0 \text{ und } [\vec{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \hat{x}] = 0 = [\vec{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \hat{p}] \text{ sowie} \quad (3.208)$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k \text{ und } [L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (3.209)$$

Die \vec{S}^2 -Quantenzahl s wird als *Spin des Feldes* bezeichnet. Man unterscheidet

Bosonische Felder	Fermionische Felder
$s \in \mathbb{Z}$	$s \in (2\mathbb{Z} + 1)/2$
$s = 0$: Skalarfeld	$s = 1/2$: Spinorfeld
$s = 1$: Vektorfeld	
\vdots	\vdots

Was ist also Spin?

Teilchen haben Spin, wenn die Wellenfunktion ein nicht-triviales Transformationsverhalten im obigen Sinne bezüglich Raumdrehungen aufweist. Dies hat kein klassisches Analogon.

Exkurs:

Im Standardmodell der Teilchenphysik wird die Materie (Elektronen, Myonen, Tauonen, Neutrinos, Quarks(u,d,c,s,t,b)) durch $s = 1/2$ -Fermionen beschrieben. Die Austauschteilchen der Wechselwirkungen sind (Photonen sowie W^\pm Z und Gluonen) sind $s = 1$ -Bosonen (Vektorbosonen). Am LHC wird fieberhaft nach dem Higgsfeld $s = 0$ -Skalar gesucht.

3.6.3 Rechnen mit Tensorprodukten für Spin-1/2-Felder

- Als Basis unseres Zustandsraumes wählen wir

$$|\vec{x}, \uparrow\rangle \equiv |\vec{x}\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\vec{x}, \downarrow\rangle \equiv |\vec{x}\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (3.210)$$

- Damit können wir die Gesamtwellenfunktion schreiben als

$$\Psi(\vec{x}) = \underbrace{\langle \vec{x}, \uparrow | \alpha \rangle}_{=: \psi_+(\vec{x})} |\uparrow\rangle + \underbrace{\langle \vec{x}, \downarrow | \alpha \rangle}_{=: \psi_-(\vec{x})} |\downarrow\rangle \quad (3.211)$$

$$= \psi_+(\vec{x}) |\uparrow\rangle + \psi_-(\vec{x}) |\downarrow\rangle \quad (3.212)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.213)$$

- Die Normierung der Wellenfunktion erhalten wir aus

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int d^3x |\psi_+(\vec{x})|^2 + \int d^3x |\psi_-(\vec{x})|^2, \quad (3.214)$$

wobei $\int d^3x |\psi_\pm(\vec{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen mit $s_z = \pm 1/2\hbar$ im Volumen V zu finden.

3.6.4 SO(3) versus SU(2)

Abschließend wollen wir noch auf eine wichtige mathematische Subtilität hinweisen, nämlich den Unterschied zwischen der Drehgruppe $SO(3)$ und ihrer sogenannten doppelten Überlagerungsgruppe $SU(2)$. Wir erinnern daran, dass $g \in SO(3)$ durch eine Drehachse \vec{n} und einen Winkel $0 \leq \alpha \leq \pi$ charakterisiert ist, wobei $(\vec{n}, \alpha = \pi)$ und $(-\vec{n}, \alpha = \pi)$ identifiziert werden.

Betrachten wir nun die $s = 1/2$ Spinordarstellung

$$\mathcal{D} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \vec{S}} = e^{-i \frac{\alpha}{2} \vec{n} \vec{\sigma}} \quad (3.215)$$

mit den bekannten Pauli-Matrizen. Explizit ergibt sich

$$\mathcal{D}(\vec{n}, \alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 - in_3 \sin \alpha/2 & -i(n_1 - in_2) \sin \alpha/2 \\ -i(n_1 + in_2) \sin \alpha/2 & \cos \alpha/2 + in_3 \sin \alpha/2 \end{pmatrix}. \quad (3.216)$$

Wir überprüfen leicht, dass $\mathcal{D}^\dagger \mathcal{D} = \mathbb{1}$ und $\det \mathcal{D} = 1$ gilt. Betrachten wir nun die Hintereinanderausführung von 2 Drehungen um den Winkel π im Spinorraum, ergibt sich

$$\underbrace{\mathcal{D}(\vec{n}, \pi)\mathcal{D}(\vec{n}, \pi)}_{2 \text{ Drehungen um } 180^\circ} = \mathcal{D}(\vec{n}, 2\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.217)$$

Da $(\vec{n}, 2\pi)$ dem Element $\mathbb{1}_{\text{SO}(3)}$ entspricht, würde die Darstellungseigenschaft

$$\mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2) = \mathcal{D}(g_1g_2) \quad (3.218)$$

erfordern, dass

$$\mathcal{D}(2\pi) = \mathbb{1}. \quad (3.219)$$

Das bedeutet, dass die $s = 1/2$ Darstellung offenbar nicht die Darstellungseigenschaft für endliche Drehungen erfüllt. Der Grund dafür ist, dass unsere Konstruktion der Darstellung nur auf den Eigenschaften der Lie-Algebra von $\text{SO}(3)$ beruhte, d.h. wir haben Darstellungen für *infinitesimale* Drehungen. Der Fall $s = (2\mathbb{Z} + 1)/2$ liefert aber keine Darstellungen der vollen Lie-Gruppe $\text{SO}(3)$. Vielmehr ist es so, dass wenn α den Bereich $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ durchläuft, $\mathcal{D}(\vec{n}, \alpha)$ die Gruppe

$$\text{SU}(2) := \left\{ U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2,2} : U^\dagger U = \mathbb{1}, \det U = 1 \right\} \quad (3.220)$$

durchläuft. Die Pauli-Matrizen sind die *Generatoren von SU(2)*, nicht von $\text{SO}(3)$. Der Zusammenhang zwischen beiden ist folgender:

- Die Lie-Algebra von $\text{SU}(2)$ und $\text{SO}(3)$ sind isomorph, d.h. beide haben die Strukturkonstanten ϵ_{ijk} .
- Der Unterschied zwischen $\text{SO}(3)$ und $\text{SU}(2)$ wird erst für endliche Rotationen sichtbar: $\forall g \in \text{SO}(3)$ gibt es 2 Elemente U und $-U \in \text{SU}(2)$, denn α und $\alpha + 2\pi$ ergeben U und $-U$. Man sagt, dass $\text{SU}(2)$ eine 2-fache Überlagerung von $\text{SO}(3)$ ist.

Übrigens haben die Gruppenmannigfaltigkeiten $\text{SU}(2)$ und $\text{SO}(3)$ eine sehr einfache Form,

$$\text{SU}(2) \cong S^3 \quad (3.221)$$

$$\text{SO}(3) \cong S^3/\mathbb{Z}_2. \quad (3.222)$$

Dass $\text{SU}(2) \cong S^3$ findet man wie folgt: Zusammen mit $\det U = 1$ erhält man aus der Bedingung $U^\dagger = U^{-1}$ für

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (3.223)$$

die Gleichungen $c = -b^*$, $d = a^*$ und $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Interpretieren wir nun $\text{Re}a$, $\text{Im}a$, $\text{Re}b$ und $\text{Im}b$ als Koordinaten im \mathbb{R}^4 , ist $|a|^2 + |b|^2 = 1$ die Gleichung für eine Kugel S^3 mit Radius 1. Dass $\text{SO}(3) \cong S^3/\mathbb{Z}_2$ folgt nun aus der Aussage, dass $\text{SU}(2)$ die doppelte Überlagerung von $\text{SO}(3)$ ist.

Kommentare

- Die Tatsache, dass die $s = 1/2$ Darstellung physikalisch relevant ist, obwohl sie keine eigentliche Darstellung der Drehgruppe $\text{SO}(3)$ darstellt, ist in der nicht-relativistischen Quantenmechanik etwas ad hoc. In der relativistischen Quantenmechanik sowie der Quantenfeldtheorie ergibt sich dies natürlich. Insofern ist Spin im eigentlichen Sinne ein relativistisches Phänomen.

- Ein berühmtes Kuriosum ist, dass die Wellenfunktion eines Spinors durch eine Rotation um 2π nicht auf sich selbst abgebildet wird, sondern eine Phase $-1 = e^{i\pi}$ erhält. Erst nach Drehungen um 4π kommen Spinoren zu sich selbst zurück.

3.7 Addition von Drehimpulsen

Der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens mit Spin \vec{S} und Bahndrehimpuls \vec{L} ist

$$\vec{J} = \vec{S} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{L} \equiv \vec{S} + \vec{L}, \quad (3.224)$$

wobei die Tensorproduktschreibweise daran erinnert, dass \vec{S} und \vec{L} auf unabhängige Freiheitsgrade wirken. Insbesondere kommutieren sie deshalb als Operatoren,

$$[\vec{S}, \vec{L}] = 0. \quad (3.225)$$

Als Basis für allgemeine Zustände bietet sich die Eigenbasis von $\{\vec{L}^2, \vec{S}^2, L_z, S_z\}$ an:

$$\{|l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle\} \equiv \{|l, s, m, s_z\rangle\}. \quad (3.226)$$

Alternativ charakterisieren wir einen Zustand durch die Quantenzahlen bezüglich des Gesamtdrehimpulses $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Beachte dabei, dass \vec{J} wegen $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ alle Eigenschaften eines Drehimpulses besitzt. Insbesondere erfüllen

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{S}\vec{L} \quad \text{und} \quad (3.227)$$

$$J_z = L_z + S_z \quad (3.228)$$

die $su(2)$ -Kommutatorrelation

$$[\vec{J}^2, J_z] = 0. \quad (3.229)$$

Wir benötigen zusätzlich zu \vec{J}^2 und J_z 2 weitere kommutierende Operatoren zur Charakterisierung eines Zustandes. L_z und S_z sind wegen

$$[\vec{J}^2, L_z] \neq 0 \neq [\vec{J}^2, S_z] \quad (3.230)$$

nicht geeignet, aber

$$[\vec{J}^2, \vec{L}^2] = 0 = [\vec{J}^2, \vec{S}^2], \quad (3.231)$$

was wir leicht durch explizites Nachrechnen prüfen können. Wir können damit jeden Zustand alternativ auch durch seine Eigenwerte bezüglich des vollständigen Sets

$$\{\vec{J}^2, J_z, \vec{L}^2, \vec{S}^2\} \quad (3.232)$$

an kommutierenden Operatoren charakterisieren. Die Eigenzustände erfüllen die folgenden Relationen

$$\vec{J}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(j+1)j |j, j_z, l, s\rangle, \quad (3.233)$$

$$J_z |j, j_z, l, s\rangle = \hbar j_z |j, j_z, l, s\rangle, \quad (3.234)$$

$$\vec{S}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(s+1)s |j, j_z, l, s\rangle, \quad (3.235)$$

$$\vec{L}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(l+1)l |j, j_z, l, s\rangle. \quad (3.236)$$

Betrachten wir nun allgemeiner 2 unabhängige Drehimpulsoperatoren \vec{J}_1, \vec{J}_2 wirkend auf unabhängige Freiheitsgrade. Ein Beispiel hierfür wären zwei verschiedene Teilchen mit ihrem jeweiligen Spin:

$$\vec{J}_1 = \vec{S}_1 \text{ und } \vec{J}_2 = \vec{S}_2. \quad (3.237)$$

Der Gesamtdrehimpuls dieses Systems ist nun

$$\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{J}_2, \quad (3.238)$$

wobei \vec{J}_1 (\vec{J}_2) auf Teilchen 1 (2) wirkt. Es gibt nun 2 verschiedene Basen für die zugänglichen Zustände:

- Die Eigenbasis von $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{z1}, J_{z2}\} : \{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$
- Die Eigenbasis von $\{\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2\} : \{|j, m, j_1, j_2\rangle\}$

Unser Ziel ist es nun einen expliziten Basiswechsel zwischen den beiden Eigenbasen zu finden. D.h. wir drücken $|j, m, j_1, j_2\rangle$ durch $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ aus und umgekehrt. Insbesondere stellen wir uns die Frage, welche Werte sich bei gegebenen j_1, j_2 für j und m ergeben. Allgemein muss gelten

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle. \quad (3.239)$$

Die Koeffizienten

$$C_{m_1 m_2}^{j m} = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle \quad (3.240)$$

nennt man *Clebsch-Gordan-Koeffizienten*.

Wir stellen folgende zwei Behauptungen auf:

- In obiger Entwicklung (3.239) treten nur Terme auf, die

$m = m_1 + m_2$	(3.241)
-----------------	---------

genügen.

- Der Gesamtdrehimpuls zu j_1 und j_2 kann die Werte

$j_1 + j_2 \geq j \geq j_1 - j_2 $	(3.242)
-------------------------------------	---------

annehmen.

Beweisen wir zunächst die erste Aussage:

Wegen $J_z = J_{z1} + J_{z2}$ gilt:

$$\langle jmj_1j_2 | J_z | j_1j_2m_1m_2 \rangle = (m_1 + m_2) \langle jmj_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle = m \langle jmj_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle. \quad (3.243)$$

Das bedeutet, dass $m = m_1 + m_2$ gilt falls $C_{m_1m_2}^{jm} \neq 0$.

Beweisen wir nun die zweite Aussage.

Seien j_1, j_2 fest vorgegeben. Dann gibt es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, da m_1 und m_2 die Werte $j_1 \geq m_1 \geq -j_1$ bzw. $j_2 \geq m_2 \geq -j_2$ annehmen können. Ferner haben wir gerade gesehen, dass die Gesamt- J_z Quantenzahl eines Zustandes $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ gegeben ist durch $m = m_1 + m_2$.

Aber da $[\vec{J}^2, J_{iz}] \neq 0$ kann $|j_1m_1\rangle \otimes |j_2m_2\rangle$ zu verschiedenen Werten von j beitragen. Anders ausgedrückt: In der Entwicklung von $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ in die Basis $|jmj_1j_2\rangle$ werden mehrere Werte für j auftreten. Diese ergeben dann die möglichen Werte für den Gesamtdrehimpuls.

Bestimmen wir zunächst die möglichen Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, die der Gesamt- J_z Quantenzahl $m = m_1 + m_2$ entsprechen (o.B.d.A. sei $j_1 \geq j_2$):

$m = m_1 + m_2$	Zustand	Anzahl
$j_1 + j_2$	$ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$	1
$j_1 + j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$	2
$j_1 + j_2 - 2$	$ j_1, j_1 - 2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 2\rangle$	3
\vdots	\vdots	\vdots
$j_1 - j_2$	$ j_1, j_1 - 2j_2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 2j_2 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 2$	\dots	$2j_2 + 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$j_2 - j_1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_2 - j_1 - 1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2$
\vdots	\vdots	\vdots
$-j_1 - j_2$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	1

Hieraus können wir die möglichen Werte für j bestimmen, indem wir fordern, dass das Set der Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ volle Multiplets $|jm, j_1, j_2\rangle$ ergeben muss, wobei m insbesondere zu jedem auftretenden j die $2j + 1$ Werte $j \geq m \geq -m$ annimmt.

Der maximale Wert für j ist deshalb $j_1 + j_2$, was dem maximalen Wert von m entspricht. Das bedeutet, dass wir insgesamt $2(j_1 + j_2) + 1$ Zustände der Form

$$|j, m, j_1, j_2\rangle \quad (3.244)$$

haben mit $j = j_1 + j_2$ und $j \geq m \geq -j$.

Betrachten wir nun den Wert $m = j_1 + j_2 - 1$. Hierzu gibt es 2 Zustände. Eine Linearkombination dieser Zustände gehört ins Multiplet gehörig zu $j = j_1 + j_2$. Die andere muss also dem Wert $(j_1 + j_2 - 1)$ für j entsprechen. Andernfalls wäre dies im Widerspruch dazu, dass sich alle $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ in volle Multiplets $|j, m, j_1, j_2\rangle$ umgruppieren lassen. Der nächste mögliche Wert für j ist also $(j_1 + j_2 - 1)$. Dies geht so weiter bis $j = j_1 - j_2$. Ab diesem Wert nimmt die Anzahl der Zustände in der Tabelle nicht weiter zu. D.h. für $m = j_1 - j_2 - 1$ sind alle Zustände bereits in Multiplets mit $j \geq j_1 - j_2$ enthalten. Deshalb sind keine niedrigeren Werte für j sind möglich. Das bedeutet

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|. \quad (3.245)$$

Führen wir noch einen Konsistenzcheck durch um unsere Rechnung zu bestätigen:

- Die Anzahl der Zustände $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ ist $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.
- Die Anzahl der Zustände $|j, m, j_1, j_2\rangle$ ist

$$\# = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j + 1) \quad (3.246)$$

$$= \sum_{k=0}^{2j_2} 2(j_1 - j_2 + k) + 1 \quad (3.247)$$

$$= (2j_2 + 1)(2(j_1 - j_2) + 1) + (2j_2 + 1)2j_2 \quad (3.248)$$

$$= (2j_2 + 1)(2j_1 + 1). \quad \checkmark \quad (3.249)$$

Nun da wir die Werte für j bestimmt haben, welche auf der rechten Seite der Entwicklung (3.239) auftreten, lassen sich die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C_{m_1 m_2}^{j m}$ rekursiv bestimmen. Für eine allgemeine Behandlung verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur, beispielsweise Sakurai, Kapitel 3.7. Wir beschränken uns auf folgende Beispiele:

2-Spin-System

Betrachte 2 Teilchen mit Spin 1/2 und Gesamtspin

$$\vec{S} = \vec{S}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}_2 \equiv \vec{S}_1 + \vec{S}_2. \quad (3.250)$$

Die Basis des Tensorproduktraumes ist dann

$$|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle \quad (3.251)$$

Für den Gesamtspin gibt es nun 2 Möglichkeiten:

- $s = 1/2 + 1/2 = 1$. Dies ist ein *Triplet* an Zuständen mit $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle$ und $|1, -1\rangle$.
- $s = 1/2 - 1/2 = 0$. Dies ist ein *Singlet* mit $|0, 0\rangle$.

Entwickeln wir nun die $|s, s_z\rangle$ in die $|\uparrow\downarrow\rangle$ -Basis:

- $|1, 1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$, weil $s_z = s_{1z} + s_{2z} = 1$.

- $|1, 0\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$.

Um a und b zu bestimmen, wirken wir mit $S_- = S_{1-} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_{2-}$ auf beide Seiten und erhalten mithilfe von (3.80)

$$S_- |1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle, \quad (3.252)$$

$$S_- |\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1-} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_{2-}) |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (3.253)$$

Das bedeutet $|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$

- $|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$.
- $|0, 0\rangle = c|\uparrow\downarrow\rangle + d|\downarrow\uparrow\rangle$.

Aus der Orthogonalität der Zustände folgt

$$0 = \langle 0, 0 | 1, 1 \rangle \text{ und } 1 = \langle 1, 1 | 1, 1 \rangle. \quad (3.254)$$

Damit können wir $|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ folgern.

Spin-Bahn-Kopplung

Betrachte $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$. Dafür erhalten wir die folgenden beiden möglichen Werte von j und zugehörige Clebsch-Gordon-Entwicklung: ⁴

- $j = l + 1/2$

$$|l + 1/2, j_z\rangle = \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle, \\ l + \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l + \frac{1}{2}), \quad (3.255)$$

- $j = l - 1/2$

$$|l - 1/2, j_z\rangle = -\sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle, \\ l - \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l - \frac{1}{2}). \quad (3.256)$$

Die Koeffizienten für $|l + 1/2, j_z\rangle$ lassen sich, wie im vorigen Beispiel, durch iterative Anwendung von $J_- = L_- + S_-$ auf

$$|l + 1/2, l + 1/2\rangle = |l, l\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \quad (3.257)$$

berechnen. Die Koeffizienten für $|l - 1/2, j_z\rangle$ folgen aus der Orthonormalität der Zustände.

⁴Die Zustände auf der rechten Seite sind $|j, j_z, l, s\rangle \equiv |j, j_z\rangle$.

Kapitel 4

Weiterführende Fragen und Anwendungen

4.1 Kopplung an das elektromagnetische Feld

4.1.1 Schrödingergleichung, Pauli-Gleichung

Unser Ziel ist die Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung für ein quantenmechanisches Teilchen. Zunächst erinnern wir an die aus der klassischen Elektrodynamik bekannten Felder

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t\vec{A} - \vec{\nabla}\phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (4.1)$$

wobei $\phi(\vec{x}, t)$ das skalare Potential und $\vec{A}(\vec{x}, t)$ das Vektorpotential ist. Die klassische Hamiltonfunktion für ein Teilchen mit Ladung e und Masse m im elektromagnetischen Feld ist

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}, t))^2 + e\phi(\vec{x}, t). \quad (4.2)$$

Während wir \vec{p} als kanonischen Impuls bezeichnen, heißt

$$m\dot{\vec{x}} = m\partial_{\vec{p}}H \equiv \vec{\Pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad (4.3)$$

kinetischer Impuls. Mit ihm können wir schreiben

$$H = \frac{1}{2m}\vec{\Pi}^2 + e\phi. \quad (4.4)$$

Quantenmechanisch werden \vec{x} und \vec{p} zu Operatoren erhoben. In der Ortsdarstellung ist $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ und es ergibt sich die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{2mc}(\vec{\nabla}\vec{A} + \vec{A}\vec{\nabla}) + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi \right] \psi(\vec{x}, t). \quad (4.5)$$

Beachte dabei, dass wegen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)) + \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t) \quad (4.6)$$

in der Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) = 0$ folgt

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{mc}\vec{A}\vec{\nabla} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi \right] \psi. \quad (4.7)$$

Betrachten wir nun als konkrete Anwendung das magnetische Moment. Dazu nehmen wir ein konstantes \vec{B} -Feld an, d.h. das Vektorpotential ist gegeben durch

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{x} \times \vec{B}), \quad (4.8)$$

so dass

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}. \quad (4.9)$$

Damit können wir den zweiten Term des obigen Hamilton-Operators schreiben als

$$\frac{i\hbar e}{mc}(\vec{A}\vec{\nabla})\psi = \frac{i\hbar e}{mc} \left(-\frac{1}{2} \right) (\vec{x} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} \psi \quad (4.10)$$

$$= \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{B} \psi \quad (4.11)$$

$$= -\frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} \psi \quad (4.12)$$

$$\equiv -\vec{\mu}_{\text{Bahn}} \cdot \vec{B} \psi. \quad (4.13)$$

Damit haben wir gefunden, dass $\vec{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$ das magnetische Moment für den Bahndrehimpuls darstellt. (Dies hatten wir bei der Diskussion des Stern-Gerlach-Experiment bereits vorweggenommen.) Man schreibt

$$\vec{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} : \text{Bohr'sches Magneton}. \quad (4.14)$$

Beachte:

- Für $\vec{B} = \vec{B}(z)$ ergeben sich höhere Korrekturen zum Term $-\vec{\mu}_{\text{Bahn}} \cdot \vec{B} \psi$ entsprechend der Multipolentwicklung der Elektrodynamik.
- Der quadratische Term $\frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$ ist meistens, d.h. außer für sehr große Feldstärken, relativ zu $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ vernachlässigbar.
- $-\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}$ ist der Bahndrehimpuls-Beitrag zum Paramagnetismus, $\frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$ der Beitrag zum Diamagnetismus.

Unsere bisherige Betrachtung berücksichtigt nur die Orts- und Impulsfreiheitsgrade eines Teilchens. Wir haben allerdings festgestellt, dass Teilchen mit Spin noch weitere Freiheitsgrade besitzen. Diese Freiheitsgrade verhalten sich mathematisch wie die Freiheitsgrade eines inneren Drehimpulses. Dass diese auch physikalisch einen Drehimpuls darstellen, zeigt sich daran, dass der Spin eine weitere Quelle des magnetischen Moments liefert,

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} \quad \text{mit} \quad \vec{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}. \quad (4.15)$$

Dies zu fordern ist naheliegend und wird, wie eben im Stern-Gerlach-Experiment, auch experimentell verifiziert. In der nicht-relativistischen Quantenmechanik ist diese Forderung allerdings

nicht mehr als ein plausibles Postulat, das nicht weiter a priori herzuleiten ist. Insbesondere muss der der sogenannte gyromagnetische oder Landé-Faktor g a priori nicht 1 sein und stellt in der nicht-relativistischen Quantenmechanik einen phänomenologischen Parameter dar. Experimentell beobachtet man für Elektronen $g \simeq 2$.

Die relativistisch-quantenmechanische Dirac-Theorie des Spin-1/2-Teilchens gestattet die Herleitung dieses Spin-magnetischen Moments für Elektronen aus der relativistischen Version der Schrödingergleichung, der Dirac-Gleichung. Dies ergibt zunächst $g = 2$, in Übereinstimmung mit dem Stern-Gerlach-Experiment. Die nicht-relativistische Schrödingergleichung für ein Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld ist die Pauligleichung

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}\vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi \right] \mathbb{1} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} - \mu_B\vec{\sigma}\vec{B} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

wobei $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$.

Bemerkung:

In der Quantenelektrodynamik (QED) ergeben sich höhere Korrekturen zu g , perturbativ als Störungsreihe schreibbar als

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0.32\dots \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 + 1.18\dots \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^3 + \dots \right) \quad (4.17)$$

$$= 2.002319304718 \quad (4.18)$$

mit der Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$.

Beispiel: Eine wichtige Anwendung des magnetischen Moments stellt der normale **Zeeman-Effekt** dar, der die Aufhebung der Energie-Degenerierung im Wasserstoffatom beim Anlegen eines äußeren Feldes beschreibt. Er wird in den Übungen behandelt.

4.1.2 Eichprinzip und kovariante Ableitung

Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass das \vec{E} - und \vec{B} -Feld invariant sind unter einer Eichtransformation

$$\vec{A}(\vec{x}, t) \rightarrow \vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x}, t) \quad (4.19)$$

$$\phi(\vec{x}, t) \rightarrow \phi'(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}, t) - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\vec{x}, t). \quad (4.20)$$

Insbesondere ist die klassische Lorentzkraft

$$\vec{F} = \frac{e}{c}(\vec{v} \times \vec{B}) + e\vec{E} \quad (4.21)$$

eichinvariant. In der Quantenmechanik hängt die Schrödingergleichung explizit von \vec{A} und ϕ ab:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\phi(\vec{x}, t) \right] \psi(\vec{x}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t). \quad (4.22)$$

Wir fordern, dass auch in der Quantenmechanik die Dynamik eichunabhängig ist. Dies erzwingt eine Transformation der Wellenfunktion unter (4.20)

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) \quad (4.23)$$

dergestalt, dass aus (4.22) folgt

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}'(\vec{x}, t) \right)^2 + e\phi'(\vec{x}, t) \right] \psi'(\vec{x}, t) = i\hbar\partial_t\psi'(\vec{x}, t). \quad (4.24)$$

D.h. wir fordern, dass (4.22) impliziert

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{x}, t) \right)^2 \psi'(\vec{x}, t) = \left(i\hbar\partial_t - e\phi(\vec{x}, t) + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda(\vec{x}, t) \right) \psi'(\vec{x}, t) \quad (4.25)$$

für jede Wahl von $\vec{A}(\vec{x}, t)$, $\phi(\vec{x}, t)$, $\Lambda(\vec{x}, t)$ und $\psi(\vec{x}, t)$. Dies ist erfüllt genau dann wenn

$$i\hbar\partial_t\psi' + \frac{e}{c}(\partial_t\Lambda)\psi' = C i\hbar\partial_t\psi \quad (4.26)$$

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda(\vec{x}, t) \right)^2 \psi' = C \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 \psi \quad \forall \vec{A}. \quad (4.27)$$

Die Lösung der ersten Gleichung ist

$$\psi'(\vec{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}\psi(\vec{x}, t), \quad (4.28)$$

denn

$$\left(i\hbar\partial_t + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda \right) \psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t). \quad (4.29)$$

Damit gilt auch

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda \right) \psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} (-i\hbar\vec{\nabla})\psi, \quad (4.30)$$

und somit ist der zweite Punkt erfüllt. Das heißt, wir haben gezeigt, dass unter einer Eichtransformation

$$\vec{A}(\vec{x}, t) \rightarrow \vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x}, t), \quad (4.31)$$

$$\phi(\vec{x}, t) \rightarrow \phi'(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}, t) - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\vec{x}, t), \quad (4.32)$$

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}\psi(\vec{x}, t) \quad (4.33)$$

die Schrödingergleichung invariant ist,

$$i\hbar\partial_t\psi = H(\vec{A}, \phi)\psi \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\partial_t\psi' = H(\vec{A}', \phi')\psi'. \quad (4.34)$$

Nun folgern wir mit der umgekehrten Logik: Wir werden zeigen, dass die Forderung nach einer Eichinvarianz der Schrödingergleichung automatisch zur korrekten Kopplung an das elektromagnetische Feld führt. Betrachten wir hierzu zunächst die freie Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x},t) \equiv \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2\psi(\vec{x},t). \quad (4.35)$$

Die freie Schrödingergleichung ist invariant unter einer *globalen* Phasentransformation

$$\psi(\vec{x},t) \rightarrow \psi'(\vec{x},t) = e^{i\lambda}\psi(\vec{x},t), \quad \lambda \in \mathbb{R} \text{ konstant}, \quad (4.36)$$

also

$$i\hbar\partial_t\psi' = \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2\psi'. \quad (4.37)$$

Dies stellt eine $U(1)$ -Symmetrietransformation dar, wobei $U(1)$ die Lie-Gruppe der unitären 1×1 -Matrizen ist,

$$U(1) = \{c \in \mathbb{C}^{1,1} \equiv \mathbb{C} \mid c^\dagger c = \mathbb{1}\} \quad (4.38)$$

$$= \{c \in \mathbb{C} \mid |c| = 1\}. \quad (4.39)$$

Da λ konstant ist, spricht man von einer *globalen Symmetrie*. Wir fragen uns, was passiert, wenn wir diese globale $U(1)$ -Symmetrie eichen, d.h. wenn wir fordern, dass die Dynamik invariant ist unter einer ortsabhängigen Phasentransformation

$$\psi'(\vec{x},t) = e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}\psi(\vec{x},t), \quad g \in \mathbb{R}. \quad (4.40)$$

Im Falle eines ortsabhängigen $\Lambda \equiv \Lambda(\vec{x},t)$ spricht man von einer *lokalen Symmetrie* oder auch einer *Eichsymmetrie*. Berechnen wir

$$\partial_t\psi'(\vec{x},t) = e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}(\partial_t + ig\partial_t\Lambda)\psi(\vec{x},t) \quad (4.41)$$

und

$$\vec{\nabla}\psi'(\vec{x},t) = e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}(\vec{\nabla} + ig\vec{\nabla}\Lambda(\vec{x},t))\psi(\vec{x},t). \quad (4.42)$$

Die Schrödingergleichung in ihrer ursprünglichen Form (4.35) ist also nicht invariant unter einer lokalen $U(1)$ -Symmetrie. Wir können allerdings eine invariante Schrödingergleichung konstruieren, indem wir - im einfachsten Fall - schlicht ∂_t und $\partial_{\vec{x}} \equiv \vec{\nabla}$ ersetzen durch die Differentialoperatoren \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\vec{x}}$ mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_t\psi(\vec{x},t))' &= e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}\mathcal{D}_t\psi(\vec{x},t), \\ (\mathcal{D}_{\vec{x}}\psi(\vec{x},t))' &= e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}\mathcal{D}_{\vec{x}}\psi(\vec{x},t). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Beachte, dass aus der zweiten Gleichung insbesondere folgt, dass auch

$$(\mathcal{D}_{\vec{x}}^2\psi(\vec{x},t))' = e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}\mathcal{D}_{\vec{x}}^2\psi(\vec{x},t). \quad (4.44)$$

Wenn wir ∂_t und $\partial_{\vec{x}}$ durch \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\vec{x}}$ mit obigem Transformationsverhalten ersetzen, können wir auf beiden Seiten den sich durch eine Eichtransformation ergebenden Faktor $e^{ig\Lambda(\vec{x},t)}$ kürzen und erhalten somit eine invariante Gleichung.

Konstruieren wir zunächst \mathcal{D}_t . Aus (4.41) schließen wir, dass wir zu ∂_t eine Größe addieren müssen, die ihrerseits unter einer Eichtransformation transformiert. Das führt uns auf den Ansatz

$$\mathcal{D}_t = \partial_t + ig\alpha(\vec{x}, t), \quad (4.45)$$

wobei unter $U(1)$ -Transformation gelten muss, dass

$$\alpha(\vec{x}, t) \rightarrow \alpha'(\vec{x}, t) = \alpha(\vec{x}, t) - \partial_t \Lambda(\vec{x}, t). \quad (4.46)$$

Auf die gleiche Weise erhalten wir

$$\mathcal{D}_{\vec{x}} = \partial_{\vec{x}} - ig\vec{\beta}(\vec{x}, t) \quad (4.47)$$

mit

$$\vec{\beta}(\vec{x}, t) \rightarrow \vec{\beta}'(\vec{x}, t) = \vec{\beta}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \Lambda(\vec{x}, t). \quad (4.48)$$

Die so definierten Differentialoperatoren erfüllen die Bedingung (4.43). Die eichinvariante Schrödingergleichung lautet deshalb

$$i\hbar \mathcal{D}_t \psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} (-i\hbar \mathcal{D}_{\vec{x}})^2 \psi(\vec{x}, t). \quad (4.49)$$

Die Einführung der Felder $\alpha(\vec{x}, t)$ und $\vec{\beta}(\vec{x}, t)$, welche lokale Freiheitsgrade darstellen, kann für die Dynamik nicht folgenlos bleiben. Tatsächlich sieht man, dass (4.49) genau die Bewegung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld beschreibt, falls wir die folgende Identifikation durchführen,

$$g = \frac{e}{\hbar c}, \quad \alpha(\vec{x}, t) = c\phi(\vec{x}, t), \quad \vec{\beta}(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t). \quad (4.50)$$

Fassen wir also zusammen:

- Die Kopplung an das elektromagnetische Feld *folgt* aus der Eichung der globalen $U(1)$ -Symmetrie der Schrödingergleichung. Elektromagnetismus ist eine $U(1)$ -Eichtheorie.
- Die Größen \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\vec{x}}$ heißen *kovariante Ableitungen*, weil $\mathcal{D}\psi$ so transformiert wie ψ .

Die Erkenntnis, dass die Eichung einer globalen Symmetrie zur Beschreibung einer Kraft führt, ist von überragender Bedeutung für die Formulierung der modernen Physik. Tatsächlich können alle vier Grundkräfte in der Natur aus diesem Eichprinzip gewonnen werden. Die Eichgruppen der übrigen drei Kräfte sind hierbei die folgenden Lie-Gruppen:

$$\text{schwache Kernkraft} \leftrightarrow \text{Eichgruppe } SU(2) \quad (4.51)$$

$$\text{starke Kernkraft} \leftrightarrow \text{Eichgruppe } SU(3) \quad (4.52)$$

$$\text{Gravitation} \leftrightarrow \text{Eichgruppe } SL(2, \mathbb{C}) \quad (4.53)$$

$$(4.54)$$

Insbesondere ist die Eichgruppe des Standardmodells der Teilchenphysik, welches den Elektromagnetismus sowie die schwache und starke Kraft beschreibt, $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$.

Abschließend möchten wir noch drei weiterführende Bemerkungen zu den Implikationen der $U(1)$ -Symmetrie des Elektromagnetismus machen:

- Die globale $U(1)$ -Symmetrie der freien Schrödingergleichung (4.35) impliziert über das Noethertheorem eine Erhaltungsgröße - die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t)$, die der Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho = \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \quad (4.55)$$

genügt, bzw. die *Ladung* $e \int d^3x \rho(\vec{x}, t)$. Daher rührt auch der Name *Noether-Ladung* für die Erhaltungsgröße einer kontinuierlichen Symmetrie.

- Im klassischen Elektromagnetismus sind nur die Feldstärken \vec{E} und \vec{B} beobachtbar, das skalare Potential ϕ sowie das Vektorpotential \vec{A} erscheinen nur als Hilfsgrößen zur Definition von \vec{E} und \vec{B} . Quantenmechanisch ist dies nicht so. Der berühmte *Aharonov-Bohm-Effekt* zeigt: Die fundamentalen physikalischen Größen in der Quantenmechanik sind nicht \vec{E} und \vec{B} sondern eichinvariante Kombinationen der Potentiale \vec{A} und ϕ , welche nicht mit den lokalen Feldstärken \vec{B} und \vec{E} im für die Wellenfunktion eines Teilchens zugänglichen Raumbereich übereinstimmen müssen. Wir werden diesen Effekt in den Übungen genau besprechen.
- Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass die elektromagnetischen Gleichungen eine deutlich symmetrischere Form annehmen, wenn in der Natur ein magnetischer Monopol existieren würde. Magnetische Monopole wurden bislang in der Natur aber nicht beobachtet. *Falls* sie jedoch existieren sollten, so folgt in der Quantenmechanik aus der Eichtransformation der Wellenfunktion die Quantisierung der elektrischen Elementarladung in Einheiten der magnetischen Monopolladung. Dieser Dirac-Monopol-Effekt wird z.B. in Sakurai, Kapitel 2.6 besprochen.

4.2 Stationäre Störungstheorie

4.2.1 Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (nicht entartet)

Bislang haben wir, z.B. im harmonischen Oszillator oder im Coulomb-Potential, eine Reihe von exakt lösbaren dynamischen Problemen kennengelernt: Dank der hohen Symmetrie des Problems war es möglich, die exakten Eigenvektoren und Eigenwerte des Hamiltonoperators zu bestimmen. In realistischen Problemen ist der Hamiltonian hierfür in der Regel zu kompliziert. In diesem Fall existieren allerdings Näherungsmethoden, die eine approximative Lösung erlauben. Das Beherrschen dieser Störungstheorie ist deshalb für konkrete Anwendungen entscheidend.

Betrachten wir einen Hamilton-Operator der Form

$$H = H_0 + \lambda H_1. \quad (4.56)$$

Dabei bezeichnet H_0 einen "ungestörten" Hamilton-Operator mit (bekannter) Eigenbasis

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad (4.57)$$

und λH_1 einen "kleinen" Störterm. Wir denken uns λ als einen freien Parameter in der Theorie, z.B. als eine Kopplungskonstante, die wir *behandeln*, als *wäre* sie eine freie tunebare Größe. Für kleine Werte von λ geht die Dynamik dann in die durch die ungestörte Schrödingergleichung beschriebene über. Ferner behandeln wir zunächst den Fall, dass H_0 ein nicht-entartetes Spektrum besitzt.

Wir sind nun daran interessiert, die Energieeigenwerte und die zugehörige Eigenbasis von H zu finden, also

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (4.58)$$

Dafür nutzen wir den folgenden Ansatz: Wir entwickeln $|n\rangle$ und E_n als *Störungsreihe in λ* um E_n^0 und $|n^0\rangle$,

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (4.59)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots \quad (4.60)$$

Dies ist nur möglich, falls sich $|n\rangle$ und $|n^0\rangle$ qualitativ nur wenig unterscheiden, denn wir behandeln λ ja als freien Parameter mit $\lim_{\lambda \rightarrow 0} H = H_0$. Ein solcher Ansatz ist z.B. nicht zulässig, wenn sich die ungestörten und gestörten Energielevels E_n^0 und E_n^i kreuzen (Level-crossing). Weiterhin können Bindungszustände nicht perturbativ aus den ungebundenen Zuständen etwa der freien Schrödingergleichung erhalten werden. Oftmals ist die Störungsreihe nicht konvergent im Sinne einer mathematischen Reihe in λ , aber Entwicklung von E_n kann in den ersten Ordnungen dennoch zu einer quantitativ guten Näherung führen. Die Konvergenzeigenschaften einer Störungsreihe zu bestimmen ist im Allgemeinen schwer.

Obiger Ansatz ergibt

$$(H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots). \quad (4.61)$$

Die Terme auf linker und rechter Seite der Gleichung müssen nach unsere Logik nun in jeder Ordnung von λ separat übereinstimmen. Damit ergibt sich

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle, \quad (4.62)$$

$$H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle, \quad (4.63)$$

$$H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle. \quad (4.64)$$

$$\dots \quad (4.65)$$

Die Normierung von $|n\rangle$ wird festgelegt auf

$$\langle n^0 | n \rangle = 1. \quad (4.66)$$

Wegen $\langle n^0 | n^0 \rangle = 1$ folgt sofort $\lambda \langle n^0 | n^1 \rangle + \lambda^2 \langle n^0 | n^2 \rangle + \dots = 0$. Da dies gemäß der Logik der Störungsreihe für alle Werte von λ gilt, erhalten wir

$$\langle n^0 | n^1 \rangle = 0 = \langle n^0 | n^2 \rangle = \dots \quad (4.67)$$

Wir wollen nun E_n^i und $|n^i\rangle$ finden.

- Berechnung von E_n^1 :

Multipliziere die Gleichung (4.63) mit $\langle n^0 |$. Damit folgt

$$\underbrace{\langle n^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{E_n^0 \langle n^0 | n^1 \rangle \equiv 0} + \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \underbrace{\langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} + E_n^1 \langle n^0 | n^0 \rangle \quad (4.68)$$

Damit erhalten wir

$$E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle. \quad (4.69)$$

- Berechnung von $|n^1\rangle$:

Wir entwickeln $|n^1\rangle$ in der ONB $\{|m^0\rangle\}$ von H_0 mit

$$H_0 |m^0\rangle = E_m^0 |m^0\rangle, \quad (4.70)$$

also $|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle$ mit $c_m = \langle m^0 | n^1 \rangle$. im kontinuierlichen Fall geht diese Summe in ein Integral über. Beachte, dass wegen der Normierungsbedingung $\langle n^0 | n^1 \rangle = 0$ nur über $m \neq n$ zu summieren ist. Multiplizieren wir nun die Gleichung (4.63) mit $\langle m^0 |$, erhalten wir

$$E_m^0 \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + \underbrace{E_n^1}_{=0} \langle m^0 | n^0 \rangle. \quad (4.71)$$

Damit folgt

$$(E_n^0 - E_m^0) c_m = \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle, \quad (4.72)$$

$$c_m = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)}, \quad (4.73)$$

da für $n \neq m$ auch $E_n^0 \neq E_m^0$ gilt. Wir haben damit gefunden:

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} |m^0\rangle. \quad (4.74)$$

- Berechnung von E_n^2 :

Multiplizieren wir nun Gleichung (4.64) mit $\langle n_0 |$ und erhalten daraus $E_n^2 = \langle m^0 | H_1 | n^1 \rangle$, also

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{(E_n^0 - E_m^0)}. \quad (4.75)$$

Insbesondere ist $E_n^2 < 0$ für den Grundzustand. Wenn alle Übergangselemente $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle$ vergleichbar sind, stammen die wichtigsten Beiträge von benachbarten Levels. Man sieht ferner, dass kein Level-crossing auftreten kann.

4.2.2 Entartete Störungstheorie

Betrachten wir nun einen Hamilton-Operator H_0 mit Entartung, also

$$H_0 |n_i^0\rangle = E_n^0 |n_i^0\rangle \text{ mit } \langle n_i^0 | m_j^0 \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij}. \quad (4.76)$$

Wie beispielsweise die Behandlung des Wasserstoffatoms gezeigt hat, sind viele exakt lösbarer Probleme entartet, denn exakte Lösbarkeit verlangt in der Regel hohe Symmetrie, was, wie wir gesehen haben, zur Degenerierung des Spektrums führt. Wir gehen analog zum vorherigen Abschnitt vor und betrachten $H = H_0 + \lambda H_1$ mit Eigenbasis

$$E_{n,i} = E_n^0 + \lambda E_{n,i}^1 + \lambda^2 E_{n,i}^2 + \dots \quad (4.77)$$

$$|n_i\rangle = |n_i^0\rangle + \lambda |n_i^1\rangle + \lambda^2 |n_i^2\rangle + \dots \quad (4.78)$$

In der Regel wird der Störterm H_1 die Degenerierung zumindest teilweise aufheben, was den Index i für die Energie-Eigenwerte erfordert. Wir legen die Normierung wiederum auf

$$\langle n_i^0 | n_i \rangle = 1 \quad (4.79)$$

fest. Dies erzwingt

$$\langle n_i^0 | n_i^1 \rangle = 0. \quad (4.80)$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung ergibt sich analog zum nicht-degenerierten Fall

$$H_0 |n_i^0\rangle = E_n^0 |n_i^0\rangle, \quad (4.81)$$

$$H_0 |n_i^1\rangle + H_1 |n_i^0\rangle = E_n^0 |n_i^1\rangle + E_{n,i}^1 |n_i^0\rangle, \quad (4.82)$$

$$H_0 |n_i^2\rangle + H_1 |n_i^1\rangle = E_n^0 |n_i^2\rangle + E_{n,i}^1 |n_i^1\rangle + E_{n,i}^2 |n_i^0\rangle. \quad (4.83)$$

$$\dots \quad (4.84)$$

Wir finden wiederum in erster Ordnung die Energiewerte

$$E_{nj}^1 = \langle n_j^0 | H_1 | n_j^0 \rangle. \quad (4.85)$$

Unser Ansatz für $|n_i^1\rangle$ lautet nun

$$|n_i^1\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_k c_{mk} |m_k^0\rangle + \sum_{j \neq i} c_{nj}^{(i)} |n_j^0\rangle. \quad (4.86)$$

Der erste Term summiert über die Basiselemente gehörig zu den Energie-Eigenwerten $E_m^0 \neq E_n^0$. Der zweite Term summiert über die zu $|n_i^0\rangle$ orthogonalen Basiselemente, welche zum selbem ungestörten Energie-Eigenwert E_n^0 gehören.

Die c_{mk} ergeben sich wie vorher durch Multiplikation von $\langle m_k^0 |$ auf (4.82) zu

$$c_{mk} = \frac{\langle m_k^0 | H_1 | n_i^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}. \quad (4.87)$$

Wenden wir stattdessen $\langle n_j^0 |$ auf diese Gleichung an, erhalten wir ($i \neq j$)

$$E_n^0 \langle n_j^0 | n_i^1 \rangle - E_n^0 \langle n_j^0 | n_i^1 \rangle = -\langle n_j^0 | H_1 | n_i^0 \rangle. \quad (4.88)$$

Das bedeutet, dass als Konsistenzbedingung gelten muss

$$\langle n_j^0 | H_1 | n_i^0 \rangle = \delta_{ij} H_{ni}^1. \quad (4.89)$$

Für eine willkürlich gewählte Basis $|n_i^0\rangle$ muss (4.89) a priori nicht gewährleistet sein. In diesem Fall muss eine neue Basis gefunden werden, welche (4.89) erfüllt. Dies zu erreichen ist immer möglich, denn

$$H_0|_{\text{spn}(|n_i^0\rangle)} = E_n^0 \mathbb{1}|_{\text{spn}(|n_i^0\rangle)} \quad (4.90)$$

eingeschränkt auf den von $\{|n_i^0\rangle\}$ eingeschränkten Unterraum. Das bedeutet, dass auf diesem Unterraum H_0 und H_1 gemeinsam diagonalisierbar sind. Wir müssen aber noch die $c_{nj}^{(i)}$ bestimmen, da sie noch nicht auf obiger Gleichung folgen. Für ihre Herleitung verweisen wir auf Sakurai, Kapitel 5.1. Das Ergebnis lautet dann

$$c_{nj}^{(i)} = \frac{1}{E_{nj}^1 - E_{ni}^1} \sum_{m \neq n} \langle n_j^{(0)} | H_1 | m \rangle \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} \langle m | H_1 | n_j^{(0)} \rangle. \quad (4.91)$$

Das heißt, dass E_{nj}^1 in erster Ordnung bestimmbar ist wie bisher solange man sicherstellt, dass (4.89) gilt.

4.2.3 Ritzsches Variationsverfahren

Das Ritzsche Variationsprinzip ist ein Methode der Störungsrechnung, welche eine Abschätzung für die Änderung der Grundzustandsenergie durch eine Störung ermöglicht, sofern wir ein gutes qualitatives Verständnis für die Auswirkung der Störung auf die Grundzustandswellenfunktion besitzen. In den Übungen zeigen wir, dass die Grundzustandsenergie E_0 immer der Schranke

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4.92)$$

genügt, wobei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand sei.

Das Ritzsche Variationsprinzip betrachtet nun einen Zustand $|\psi(\mu)\rangle$, der von einem Parameter μ abhängt, und die Größe

$$E(\mu) := \frac{\langle \psi(\mu) | H | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle}. \quad (4.93)$$

Minimierung von $E(\mu)$ liefert eine obere Schranke für E_0 .

Dies werden wir in der Übung zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des Helium-Atoms verwenden.

4.3 Relativistische Korrekturen beim Wasserstoffatom - Feinstruktur

Als Anwendung der allgemeinen stationären Störungstheorie wollen wir nun die Feinstruktur des Wasserstoffatoms betrachten. Da dies in der experimentellen Atomphysik im Detail behandelt wird, können wir uns vergleichsweise kurz fassen.

Aus der nicht-relativistischen Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom mit Hamiltonian

$$H \equiv H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{r} \quad (4.94)$$

hatten wir unter Vernachlässigung des Elektronspins die Energieeigenwerte und -eigenfunktionen wie folgt bestimmt:

$$H_0 |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle, \quad (4.95)$$

wobei die Energieeigenwerte gegeben sind durch

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2} (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} = -1\text{Ry} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (4.96)$$

Die Kernladungszahl des Wasserstoffatoms ist $Z = 1$.

Wir erweitern unser Modell des Wasserstoffatoms nun um folgende Terme:

- Hinzunahme der Spin-Quantenzahlen des Elektrons erweitert die Energie-Eigenzustände von

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s_z\rangle. \quad (4.97)$$

Die Energieeigenwerte aufgrund von H_0 sind nun $2n^2$ -fach entartet.

- Aus der relativistischen Diracgleichung des Elektrons folgen 3 Korrekturterme zu H_0 , und wir schreiben

$$H = H_0 + H^{(1)} + H^{(2)} + H^{(3)} \quad (4.98)$$

mit den folgenden Beiträgen:

- $H^{(1)}$ beschreibt relativistische Korrekturen zur kinetischen Energie. Diese werden wir in den Übungen im Detail behandeln;
- $H^{(2)}$ beschreibt den sogenannten Darwin-Term aufgrund der relativistischen 'Zitterbewegung' des Elektrons;
- $H^{(3)}$ stellt die Spin-Bahn-Kopplung dar.

Wir konzentrieren uns hier auf

$$H^{(3)} = \frac{e^2}{2M^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr} \vec{S} \vec{L} \quad \text{mit} \quad \phi(r) = -\frac{Z}{r}. \quad (4.99)$$

Heuristisch können wir diesen Term interpretieren als die Energie $H^{(3)} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \vec{B}$ aufgrund des spin-magnetischen Moments des Elektrons im \vec{B} -Feld des Protons, welches im Ruhesystem des Elektrons um dieses rotiert. Dieses \vec{B} -Feld berechnet sich klassisch zu $\vec{B} = -\vec{v} \times \frac{\vec{E}}{c}$, wobei $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi = -\frac{\vec{x}}{r} \frac{d\phi(r)}{dr}$ das \vec{E} -Feld des Protons darstellt. Aus der klassischen Elektrodynamik erinnern wir uns allerdings, dass wir dieses naive Ergebnis noch mit 2 multiplizieren müssen, denn das Ruhesystem des Elektrons stellt kein Inertialsystem dar (Stichwort: Thomas-Präzession)¹. Natürlich ist diese Interpretation nur heuristisch, da das Konzept einer festen Trajektorie und somit eines Ruhesystems des Elektrons quantenmechanisch keinen Sinn machen. Das Ergebnis (4.99) folgt allerdings durch direkte Auswertung der relativistischen Dirac-Gleichung und ist deshalb korrekt.

Wir behandeln nun $H = H_0 + H^{(3)}$ im Rahmen der entarteten Störungstheorie. Zunächst müssen wir uns fragen, ob die Bedingung (4.89) für die Basis $|n, l, m, s_z\rangle$ erfüllt ist. Wegen

$$[H^{(3)}, L_z] \neq 0 \neq [H^{(3)}, S_z] \quad (4.100)$$

sind die $|n, l, m, s_z\rangle$ nicht diagonal unter $H^{(3)}$ und deshalb nicht für die Störungsrechnung geeignet.

Wir müssen somit eine andere Basis der Eigenzustände von H_0 finden. Als weitere Möglichkeit kommen die Eigenzustände nicht von $\vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z$, sondern von $\vec{J}^2, J_z, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ in Frage mit $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ dem Gesamtdrehimpuls. Aus

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad (4.101)$$

folgern wir, dass die Eigenbasis $|n, j, j_z, l, s\rangle$ diagonal unter $H^{(3)}$ ist. Die j -Quantenzahl nimmt dabei die Werte $j = l \pm 1/2$ an. Weiterhin gilt fuer die Drehimpuls-Eigenzustände $|j, j_z, l, s\rangle$

$$\vec{S} \cdot \vec{L} |l + 1/2, j_z, l, s\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [(l + 1/2)(l + 3/2) - l(l + 1) - s(s + 1)] |l + 1/2, j_z, l, s\rangle \quad (4.102)$$

¹Siehe z.B. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, Kapitel 11.8.

und somit insgesamt

$$\vec{S} \cdot \vec{L} |l + 1/2, j_z, l, s\rangle = \frac{\hbar^2}{2} l |l + 1/2, j_z, l, s\rangle, \quad (4.103)$$

$$\vec{S} \cdot \vec{L} |l - 1/2, j_z, l, s\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (-l - 1) |l - 1/2, j_z, l, s\rangle. \quad (4.104)$$

Wir berechnen nun die Energiekorrektur aufgrund von $H^{(3)}$ in erster Ordnung Störungstheorie,

$$\Delta E_{n,l\pm 1/2,j_z,l,s}^{(3)} = \frac{Ze^2}{2M^2c^2} \underbrace{\left\langle \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} \right\rangle_{|n,l\pm 1/2,j_z,l,s\rangle}}_{\langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle_{|n,l\pm 1/2,j_z,l,s\rangle} \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl}}. \quad (4.105)$$

Mithilfe von

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{M^3 c^3 \alpha^3 Z^3}{\hbar^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \quad (4.106)$$

was wir hier ohne Beweis nutzen, erhalten wir unter Verwendung von (4.103)

$$\Delta E^{(3)} = \frac{Mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3 l(l+1/2)(l+1)} \begin{cases} l & \text{für } j = l + 1/2 \\ -l - 1 & \text{für } j = l - 1/2 \end{cases}. \quad (4.107)$$

Kommentar:

Die drei Terme $H^{(1)}$, $H^{(2)}$, $H^{(3)}$ führen insgesamt zur Feinstrukturaufspaltung mit

$$\Delta E = 1\text{Ry} \frac{Z^2(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right) \quad (4.108)$$

mit $j = l \pm 1/2$. Damit ergibt sich eine *teilweise* Aufhebung der Degenerierung. Weitere Effekte, die Einfluss auf die Energieniveaus haben, sind

- der Lambshift (ein QED-Effekt, der die Zitterbewegung aufgrund der quantenfeldtheoretischen Vakuumenergie beschreibt) sowie
- die Hyperfeinstruktur (aufgrund des kern-magnetisches Moments).

Diese Effekte werden in Vorlesungen zur Atomphysik detailliert behandelt.

4.4 Zeitabhängige Störungstheorie

4.4.1 Wechselwirkungsbild

Nun wollen wir unsere allgemeinen Betrachtungen zur Störungstheorie ausweiten auf den Fall einer zeitabhängigen Störung $V(t)$ zu einem zeitunabhängigen H_0 . Das Standardbeispiel hierzu ist etwa die Dynamik eines Atoms, welches sich in einem zeitlich veränderlichen elektromagnetischen Feld befindet.

Wir nehmen an, dass $V(t)$ zu einem Zeitpunkt $t = t_0$ eingeschaltet werde, und erhalten somit folgende Situation:

$$t < t_0 : \quad H = H_0, \quad (4.109)$$

$$t \geq t_0 : \quad H = H(t) = H_0 + V(t). \quad (4.110)$$

Die Eigenzustände für $t < t_0$ sind die Eigenzustände $H_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$ und sind als solche stationär unter der Zeitentwicklung,

$$|m, t\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |m\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle. \quad (4.111)$$

Im folgenden werden wir mit $|m, t\rangle$ immer $|m, t\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle$ meinen.

Für $t \geq t_0$ sind die $|m\rangle$ nicht mehr Eigenzustand von H ; deshalb sind die $|m, t\rangle$ nicht mehr stationär unter der Zeitentwicklung von H . Aber falls $V(t)$ klein gegen H_0 ist im Sinne der Störungstheorie, macht es Sinn, als Basis des Zustandsraums noch immer die Eigenzustände $\{|m\rangle\}$ bzw. $\{|m, t\rangle\}$ von H_0 zu betrachten und die zeitliche Änderung dieser Zustände aufgrund des eingeschalteten $V(t)$ zu berechnen. Als Beispiel denken wir uns wieder das Atom im Feld einer elektromagnetischen Welle: Anstatt die neuen, zeitabhängigen Eigenzustände von $H(t)$ zu bestimmen, rechnen wir mit den ungestörten Eigenzuständen von H_0 und berechnen die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den nun nicht mehr stationären Zuständen.

Es stellt sich dabei als vorteilhaft heraus, die Dynamik aufgrund von $V(t)$ zu isolieren durch Übergang ins *Wechselwirkungsbild* = *Diracbild*:

Definition 4.1. *Im Wechselwirkungsbild (= Interaction picture) ist der Zustand gegeben durch*

$$\underbrace{|\psi, t\rangle_I}_{\text{Interaction-Bild}} = e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{|\psi, t\rangle}_{\text{Schrödinger-Bild}}. \quad (4.112)$$

Wir erhalten damit

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle_I = -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{(H_0 + V(t)) |\psi, t\rangle}_{=i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle}, \quad (4.113)$$

wobei wir im letzten Schritt $i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle$ im Schrödingerbild verwendet haben. Wir können deshalb schreiben

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle_I = V_I(t) |\psi, t\rangle_I, \quad V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (4.114)$$

Wir lösen diese dynamische Gleichung auf die folgende Weise: Im Schrödinger-Bild hatten wir für

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle = H(t) |\psi, t\rangle \quad (4.115)$$

die Dyson-Reihe

$$|\psi, t\rangle = \left(\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) \right) |\psi, t_0\rangle. \quad (4.116)$$

gefunden Analog lösen wir in hier mit der *Neumann-Reihe*

$$|\psi, t\rangle_I = \left(\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) \dots V(t_n) \right) |\psi, t_0\rangle_I. \quad (4.117)$$

In der Störungstheorie wird diese Reihe nur bis zu endlicher Ordnung berechnet.

4.4.2 Übergänge erster Ordnung und Goldene Regel

Wir suchen die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von $|m, t\rangle \equiv e^{-iH_0 t/\hbar} |m\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle$ in den Zustand $|n, t\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$. Allgemein folgt unter Anwendung der Bornschen Regel

$$P(\text{Übergang } |\psi, t\rangle \rightarrow |n, t\rangle) = |\langle n, t | \psi, t \rangle|^2 \quad (4.118)$$

mit der Übergangsamplitude

$$\langle n, t | \psi, t \rangle = \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle \equiv \langle n | \psi, t \rangle_I. \quad (4.119)$$

Berechnung der von Neumann-Reihe zu erster Ordnung ergibt

$$|\psi, t\rangle_I = |\psi, t_0\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi, t_0\rangle_I. \quad (4.120)$$

Ferner ist nach Annahme

$$|\psi, t_0\rangle = |m, t_0\rangle = e^{-iH_0 t_0/\hbar} |m\rangle, \quad (4.121)$$

woraus folgt

$$|\psi, t_0\rangle_I \equiv e^{iH_0 t_0/\hbar} |\psi, t_0\rangle = |m\rangle. \quad (4.122)$$

Damit haben wir

$$|\psi, t\rangle_I = |m\rangle + \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |m\rangle \quad (4.123)$$

und somit

$$\langle n, t | \psi, t \rangle = \langle n | \psi, t \rangle_I \quad (4.124)$$

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | V_I(t') | m \rangle \quad (4.125)$$

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n | V(t') | m \rangle. \quad (4.126)$$

Wir können deshalb die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von $|m, t\rangle$ in $|n, t\rangle$ mit $\langle n | m \rangle = 0$ angeben als

$$P_{m,n}(t) = |\langle n, t | \psi, t \rangle|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \langle n | V(t') | m \rangle \right|^2, \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (4.127)$$

Als Anwendung berechnen wir den Übergang in ein kontinuierliches Spektrum. Wir setzen $t_0 = 0$ und betrachten den einfachsten Fall für $V(t)$ gegeben durch $V(t) = V\theta(t)$ mit $V = \text{const.}$ Damit ergibt sich

$$P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n | V | m \rangle \right|^2 \quad (4.128)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (4.129)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\sin(\omega_{nm}t/2)}{\omega_{nm}/2} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (4.130)$$

Wir sind interessiert an der Übergangsrate $\Gamma_{mn} = \frac{P_{mn}(t)}{t}$. Diese ergibt sich zu

$$\Gamma_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\omega_{nm}t/2)}{(\omega_{nm}/2)^2 t} |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (4.131)$$

Die zeitliche Abhängigkeit wird durch die Funktion $\frac{\sin^2(xt)}{\pi x^2 t}$ beschrieben. Diese ist um den Wert bei $x = 0$ zentriert. Für großes t wird diese Zentrierung immer ausgeprägter. Tatsächlich kann man durch Integration gegen eine beliebige Testfunktion zeigen, dass

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt)}{\pi x^2 t} = \delta(x). \quad (4.132)$$

Die asymptotische Übergangsrate ist deshalb

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (4.133)$$

Betrachten wir nun den Übergang in ein kontinuierliches Spektrum. Unser Ziel ist es, die Rate Γ für den Übergang von $|m, t\rangle$ in einen kontinuierlichen Bereich von Zuständen $\{|n\rangle\}$ zu berechnen. Aus Gleichung (4.133) lesen wir ab, dass diese Rate Γ im Limes $t \rightarrow \infty$ nur von Null verschieden ist, wenn $E_n = E_m$. Sei $\rho(E_n) dE_n$ die Anzahl der Zustände im Intervall $(E_n, E_n + dE_n)$. Die Rate $\Gamma(|m\rangle \rightarrow \{|n\rangle\})$ mit $E_n = E_m$ ist

$$\Gamma = \lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{mn} = \rho(E_m) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (4.134)$$

Dies bezeichnet man als ‘‘Fermis Goldene Regel’’. Zu ihrer Herleitung wurde angenommen, dass alle $|n\rangle$ in diesem Zustandsbereich mit $E_n = E_m$ dasselbe $|\langle n | V | m \rangle|^2$ besitzen. Verallgemeinern wir noch unsere Rechnung auf periodische Störungen. Sei dazu

$$V(t) = \theta(t) [F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t}]. \quad (4.135)$$

Damit erhalten wir analog zu unserer obigen Rechnung

$$\Gamma_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} [\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) |\langle n | F | m \rangle|^2 + \delta(E_n - E_m + \hbar\omega) |\langle n | F^\dagger | m \rangle|^2]. \quad (4.136)$$

Beachte, dass die Energiedifferenz der erlaubten Übergänge $E_n - E_m = \pm \hbar\omega$, was genau dem Wert der Kreisfrequenz (mal \hbar) der periodischen Störung entspricht. Es wird also durch $F e^{-i\omega t}$ positive Energie ins System gepumpt und durch $F^\dagger e^{i\omega t}$ negative. Anwendungen hierzu umfassen beispielsweise Atomübergänge im Strahlungsfeld (Dipolübergänge). Wir verweisen an dieser Stelle auf die Literatur, z.B. Schwabl 16.4.

4.5 Mess- und Interpretationsproblem

4.5.1 Dichtematrix, reiner und gemischter Zustand

Erinnern wir uns zunächst an den axiomatischen Aufbau der Quantenmechanik, welchen man in 3 Postulaten zusammenfassen kann:

- Ein physikalischer Zustand entspricht einem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (Hilbertraum) mit deterministischer Zeitentwicklung $i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$.
- Jede Messgröße (Observable) entspricht einem hermiteschen linearen Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Der Operator ist ein book-keeping device insofern die möglichen Messwerte dem Eigenwertspektrum $\{a_n\}$, $\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle$, entsprechen.
- Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit zur Messung von a_n ist gemäß der Bornschen Regel

$$P(\text{Messung von } \hat{A} \text{ auf } |\psi\rangle \text{ ergibt } a_n) = |c_n|^2 = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle, \quad (4.137)$$

wobei $\hat{P}_{|n\rangle}$ der Projektor ist auf $|n\rangle$. Die Messung von a_n führt zu einem Kollaps des Zustandes $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$.

Die zentrale Eigenschaft der Quantenmechanik besteht in ihrem intrinsischen Probabilismus: Für eine Ensemble aus Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ ist es nicht möglich, den Zufall unsere Unkenntnis des genauen Zustandes zurückzuführen, wie es für statistischen Zufall der Fall ist.

Zur Unterscheidung des intrinsisch-quantenmechanischen und es satistischen Zufalls eignet sich die *Dichtematrix* ρ , die man auch als statistischen Operator oder Dichteoperator bezeichnet. Zu $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definieren wir den linearen Operator

$$\rho_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}. \quad (4.138)$$

Alle physikalischen Größen können mit Hilfe von $\rho_{|\psi\rangle}$ bestimmt werden:

- Die Berechnung der Mittelwerte erfolgt als

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \hat{A} | \psi \rangle \quad (4.139)$$

$$= \sum_n \langle n | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle \quad (4.140)$$

$$= \sum_n \langle n | \hat{A} \rho | n \rangle. \quad (4.141)$$

Mit der Spur (“trace”) $\text{Tr} \hat{X} = \sum_n \langle n | \hat{X} | n \rangle$ für $\{|n\rangle\}$ Orthonormalbasis von H lässt sich dies kompakt schreiben als

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \text{Tr}(\hat{A}\rho_{|\psi\rangle}). \quad (4.142)$$

Beachte dabei, dass die Spur basisunabhängig ist und $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$.

- Die Wahrscheinlichkeit zur Messung von a_n ist also

$$P(a_n \text{ wird gemessen}) = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{P}_{|n\rangle}\rho). \quad (4.143)$$

Die Dichtematrix $\rho_{|\psi\rangle}$ hat folgende Eigenschaften:

- $\text{Tr}\rho_{|\psi\rangle} = 1$, denn $\text{Tr}\rho_{|\psi\rangle} = \langle 1 |_{|\psi\rangle} = 1 = \langle \psi | \psi \rangle$;
- $\rho_{|\psi\rangle}^2 = \rho_{|\psi\rangle} \Rightarrow \text{Tr}\rho_{|\psi\rangle}^2 = 1$, denn $|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$;
- $\rho^\dagger = \rho$.

Auch die Schrödinger-Zeitentwicklung kann als Gleichung für die Dichtematrix geschrieben werden. Ausgehend von der Schrödingergleichung für den Zustand

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad \text{bzw.} \quad -i\hbar\langle\psi| = \langle\psi| H \quad (4.144)$$

berechnen wir

$$i\hbar\partial_t \rho_{|\psi\rangle} = i\hbar((\partial_t |\psi\rangle)\langle\psi| + |\psi\rangle\partial_t \langle\psi|) \quad (4.145)$$

$$= H |\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi| H. \quad (4.146)$$

Das bedeutet

$$i\hbar\partial_t \rho_{|\psi\rangle} = [H, \rho] \quad \text{bzw.} \quad \partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]. \quad (4.147)$$

Die Gleichung nennt man “von-Neumann-Gleichung”.

Wir wollen uns nun erneut der Interpretation des Zufalls zuwenden. Wir erinnern uns, dass die Bedeutung des intrinsisch quantenmechanischen Zustandes wie folgt zu verstehen ist: Gegeben sei ein Ensemble von Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$. Wir messen \hat{A} N mal und erhalten N_n mal a_n , also

$$P(a_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} = |c_n|^2. \quad (4.148)$$

Ein solches Ensemble von Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ heißt *reines Ensemble* bzw. Ensemble von Teilchen in einem *reinen Zustand*.

Zusätzlich zum inhärenten Zufall für den reinen Zustand existiert der echt statistische Zufall. Betrachten wir dazu ein Ensemble von N Teilchen, von denen N_i im Zustand $|\psi_i\rangle$ seien. Dies bildet ein *gemischtes Ensemble* oder *gemischten Zustand* $p_i = \frac{N_i}{N}$ = Wahrscheinlichkeit dass ein Repräsentant des Ensembles im quantenmechanischen Zustand $|\psi_i\rangle$ ist

$$\sum_i p_i = 1. \quad (4.149)$$

Dem Gemisch ordnet man die Dichtematrix

$$\rho_G = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \equiv \sum_i p_i \rho_i \quad (4.150)$$

zu. Noch immer gilt:

- $\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}(\hat{A}\rho_G)$, denn

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i p_i \langle\hat{A}\rangle_{|\psi_i\rangle} = \sum_i p_i \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle \quad (4.151)$$

$$= \sum_i p_i \text{Tr}(\rho_i \hat{A}) = \text{Tr}\left(\sum_i p_i \rho_i \hat{A}\right) = \text{Tr}(\rho_G \hat{A}) \quad (4.152)$$

- $P(a_n) = \text{Tr}(\hat{P}_{|n\rangle}\rho_G)$, denn für $|\psi_i\rangle = \sum_n c_n^i |n\rangle$ ist

$$P(a_n) = \sum_i \underbrace{p_i}_{\text{statistischer Zufall}} \underbrace{|c_n^i|^2}_{\text{intrinsischer Zufall}} = \sum_i p_i \text{Tr}(\hat{P}_{|n\rangle}\rho_i) \quad (4.153)$$

- $\text{Tr}(\rho_G) = 1$

- $\rho_G^\dagger = \rho_G$

Aber: $\rho_G^2 \neq \rho_G$ sofern $p_i \neq 0$ für mehr als ein i , denn

$$\rho_G^2 = \left(\sum_i p_i \rho_i\right)\left(\sum_j p_j \rho_j\right) \neq \rho_G. \quad (4.154)$$

Insbesondere ist

$$\text{Tr}\rho_G^2 < 1. \quad (4.155)$$

Dies ergibt das folgende Entscheidungskriterium zur Abgrenzung von reinen und gemischten Zuständen:

$$\text{Reiner Zustand: } \text{Tr}\rho^2 = 1 \quad \leftrightarrow \quad \text{gemischter Zustand: } \text{Tr}\rho_g^2 < 1. \quad (4.156)$$

Die Unterscheidung zwischen reinen und gemischten Zuständen ist extrem wichtig, denn sie entspricht der Unterscheidung zwischen der echt quantenmechanischen Superposition und dem klassischen Mischen von Teilchen mit bestimmten Eigenschaften in einem Ensemble:

- Die quantenmechanische Superposition von Zuständen $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ führt zu einem reinen Zustand

$$\rho_{|\psi\rangle} = \sum_{n,m} c_n c_m^* |n\rangle\langle m|. \quad (4.157)$$

- Ein statistisches Gemisch führt zu

$$\rho_G = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|. \quad (4.158)$$

Der Unterschied zwischen beiden ist, dass $|\psi\rangle\langle\psi|$ Nichtdiagonaleinträge $|n\rangle\langle m|$ besitzt. Diese sind verantwortlich für Interferenz. In statistischen Gemischen gibt es keine Interferenz zwischen den Zuständen $|n\rangle$.

Betrachten wir hierzu das Beispiel eines Spin-1/2-Systems. Unser Ensemble sei gegeben durch einen Elektronenstrahl. Der Unterschied zwischen einem reinen und gemischten Ensemble ist dann folgender:

- Im ersten Experiment werde der Elektronenstrahl durch einen Polarisator geschickt, welcher nur Elektronen durchlässt, deren Spin in x -Richtung polarisiert sei. D.h. in der Basis $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ von S_z sind hinter dem Polarisator alle Elektronen im Strahl im Superpositionszustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$. Dies ein reiner Zustand. Die Dichtematrix dieses Systems ist gegeben durch $\rho_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|)$.
- Im zweiten Experiment werde der ursprüngliche Strahl in 2 Strahlen gleicher Intensität geteilt. Der erste Strahl wird durch einen $|\uparrow\rangle$ -Polarisator geschickt, der zweite durch einen $|\downarrow\rangle$ -Polarisator. Danach werden beide Strahlen wieder zusammengeführt. Dies ergibt ein statistisches Gemisch aus Elektronen, von denen 50% der Elektronen im Zustand $|\uparrow\rangle$ und zu 50% im Zustand $|\downarrow\rangle$ sind. Für dieses finden wir $\rho_G = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$.

Berechnen wir nun den Erwartungswert eines Operators \hat{A} , so wird der Unterschied zwischen beiden deutlich:

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2}(\langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle + \underbrace{2\text{Re}\langle\uparrow|\hat{A}|\downarrow\rangle}_{\text{Interferenzterm}}), \quad (4.159)$$

$$\langle\hat{A}\rangle_G = \frac{1}{2}(\langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle). \quad (4.160)$$

Abschließend sei bemerkt, dass eine wichtige Anwendung der Dichtematrix in der Quantenstatistik zum Tragen kommt. Die *von-Neumann Entropie*

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad (4.161)$$

misst die Entropie bzw. Unsicherheit aufgrund unserer Unkenntnis des Zustandsvektors eines gemischten Ensembles. Dies wird in der Vorlesung zur Statistischen Theoretischen Physik im Detail behandelt werden.

4.5.2 Dichtematrix gekoppelter Systeme

Betrachten wir nun ein physikalisches Gesamtsystem S mit Subsystemen S_1 und S_2 . Der Gesamthilbertraum \mathcal{H} ist das Tensorprodukt der zu S_i gehörigen Einzelhilberträume \mathcal{H}_i ,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \quad (4.162)$$

Seien $\{|1n\rangle\}$ eine ONB zu \mathcal{H}_1 und $\{|2m\rangle\}$ eine ONB zu \mathcal{H}_2 . Ein allgemeiner normierter Zustand von H lässt sich expandieren als

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} \underbrace{|1n\rangle \otimes |2m\rangle}_{\equiv |1n\rangle|2m\rangle}, \quad \sum_{n,m} |c_{nm}|^2 = 1. \quad (4.163)$$

Die zu diesem reinen Zustand gehörige Dichtematrix können wir damit schreiben als

$$\rho_{|\psi\rangle} = \sum_{n,m} \sum_{n',m'} c_{nm} c_{n'm'} |1n\rangle |2m\rangle \langle 1n'| \langle 2m'|. \quad (4.164)$$

Wir können uns leicht davon überzeugen, dass es sich um einen reinen Zustand handelt, indem wir

$$\rho_{|\psi\rangle}^2 = \rho_{|\psi\rangle} \quad (4.165)$$

berechnen.

Wir kommen nun zum wichtigen Konzept der Messung nur am Teilsystem S_1 . Stellen wir uns vor, wir interessieren uns in einer Messung nur für die Eigenschaften von System S_1 und wollen die Freiheitsgrade von S_2 nicht berücksichtigen. Etwas präziser formuliert heißt das, dass wir eine Observable $\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1}_2$ mit $\hat{A}_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$ messen. Ein entscheidendes Resultat ist, dass sich der Erwartungswert von \hat{A} darstellen lässt als Spur nur über Subsystem S_1 ,

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}_1(\hat{\rho} \hat{A}_1), \quad (4.166)$$

mithilfe der *reduzierten Dichtematrix*

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \rho = \sum_{n,m,n'} c_{nm} c_{n'm'} |1n\rangle \langle 1n'|. \quad (4.167)$$

Beweisen wir zunächst diese Aussage. Dazu schreiben wir

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{A}) = \sum_{n,m,n',m'} c_{nm} c_{n'm'} \underbrace{\text{Tr}(|1n\rangle \langle 2m| \langle 1n'| \langle 2m'| \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1})}_{(*)}. \quad (4.168)$$

Den mit (*) gekennzeichneten Teil können wir berechnen zu

$$(*) = \text{Tr}(|1n\rangle \langle 1n'| \hat{A}_1 \otimes |2m\rangle \langle 2m'| \mathbb{1}_2). \quad (4.169)$$

Da allgemein

$$\text{Tr}(\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2) = \sum_{n,m} \langle 1n| \langle 2m| \hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2 |1n\rangle |2m\rangle \quad (4.170)$$

$$= \sum_{n,m} |1n\rangle \hat{O}_1 \langle 1n| |2m\rangle \hat{O}_2 \langle 2m| \quad (4.171)$$

$$= \text{Tr}_1 \hat{O}_1 \text{Tr}_2 \hat{O}_2 \quad (4.172)$$

gilt, vereinfachen wir dies weiter zu

$$(*) = \text{Tr}_1(|1n\rangle \langle 1n'|) \underbrace{\text{Tr}_2(|2m\rangle \langle 2m'|)}_{=\delta_{mm'} \text{ für } \{|2m\rangle\} \text{ ONB}}. \quad (4.173)$$

Beachte, dass im letzten Schritt die Orthogonalität der Basis $\{|2m\rangle\}$ eine wichtige Rolle spielt. Damit ist die Aussage gezeigt.

Wir wissen nun also, dass wir zu einer Messung, die nur an System S_1 stattfindet, die reduzierte Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \rho \quad (4.174)$$

benötigen. Im Allgemeinen ist $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$, was man durch explizite Rechnung zeigen kann. Die Ausnahme, dass $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ gilt, findet man nur in dem speziellen Fall, in dem $|\psi\rangle$ faktorisiert als $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ ist (im Gegensatz zur allgemeineren Form $|\psi\rangle = \sum_{n,m} |\psi_1^n\rangle \otimes |\psi_2^m\rangle$). Das

bedeutet, dass wir zu Zwecken der Messung an S_1 unter Vernachlässigung von S_2 den Zustand effektiv durch den gemischten Zustand $\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \rho$ beschreiben. Diesen Punkt werden wir im nächsten Kapitel noch weiter ausbauen.

4.5.3 Das Messproblem und einige Lösungsansätze

Das Messproblem besteht- vereinfacht gesprochen - in folgendem Paradox:

- Quantenmechanische Systeme untergehen Superposition $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ und interferieren.
- Klassische Systeme zeigen keine Interferenz.

Wie ist also der Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Welt und vor allem der Verlust der quantenmechanischen Interferenz im Makroskopischen zu beschreiben?

Erinnern wir uns zunächst an die sogenannte Standardinterpretation der Quantenmechanik, der wir bislang in dieser Vorlesung gefolgt sind: Diese postuliert, dass die Messung des Wertes “ a_n ” der Observablen \hat{A} zum Kollaps der Wellenfunktion auf den entsprechenden Eigenzustand führt,

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \xrightarrow{\text{“Messung”}} |n\rangle. \quad (4.175)$$

Der nicht-deterministische Charakter der Quantenmechanik rührt demnach genau von diesem postulierten Sprung in der ansonsten reversiblen und unitären Zeitentwicklung eines Zustandes her. Wie wir gesehen haben, führt diese Sichtweise zu einer empirisch korrekten Beschreibung der Naturphänomene. Dennoch ist heutzutage weitgehend anerkannt, dass diese Interpretation aus verschiedenen Gründen unbefriedigend ist.

Ein offensichtlicher Mangel dieser Sichtweise ist, dass nicht definiert wird, was eine “Messung” genau ausmacht. In der Kopenhagenschen Variante der Standardinterpretation wird eine strikte Separierung der Welt in eine quantenmechanische und eine klassische angenommen; eine Messung sei demnach ein echt klassischer Vorgang mit entsprechenden Konsequenzen für ein quantenmechanisches System. Dem wird in modernerer Sichtweise in der Regel entgegengehalten, dass alle Vorgänge in der Natur auf eine rein quantenmechanische Beschreibung zurückführbar sein sollten, denn die gesamte Makrophysik sollte aus der Mikrophysik ohne Sprünge folgen. Es bleibt also die Frage, was die Messung genau ausmacht, d.h. wann genau oder warum kollabiert die Wellenfunktion - oder kollabiert sie womöglich gar nicht?

Eine Beantwortung dieser Frage erfordert zunächst eine präzisere Formulierung des Messvorgangs, die 1932 durch von Neumann gegeben wurde. Betrachten wir ein System S mit Hilbertraum \mathcal{H} . Unser Ziel ist die Messung des Operators \hat{O}_S mit Eigenbasis $\{|s_n\rangle\}$. Beachte, dass S nur dann einen definierten Wert der Observablen \hat{O}_S besitzt, wenn es sich in einem Eigenzustand $|s_n\rangle$ befindet.

Die Messung eines solchen Eigenzustandes erfordert, dass wir das quantenmechanische System S an einen Messapparat (Zeiger) \mathcal{A} mit Hilbertraum $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ koppeln. Hierzu muss es makroskopisch unterscheidbare Zeigerpositionen $\{|a_n\rangle\}$ geben. Damit eine Messung an S durch Ablesen des Zustandes (Zeigerposition) von \mathcal{A} möglich ist, müssen beide verschränkte Zustände wie folgt bilden: Wenn vor der Kopplung von S und \mathcal{A} beide Systeme im Zustand $|s_n\rangle$ bzw. $|a_0\rangle$ sind, führt die Kopplung zum Übergang

$$|s_n\rangle \otimes \underbrace{|a_0\rangle}_{\text{urspr. Zeigerzustand}} \xrightarrow{\text{Schrödingerevolution}} |s_n\rangle \otimes \underbrace{|a_n\rangle}_{\text{ablesbar}}. \quad (4.176)$$

Beachte, dass diese Kopplung wie alles quantenmechanisch zu beschreiben ist und somit der Schrödingerentwicklung genügt. Das Ablesen von $|a_n\rangle$ erlaubt den Rückschluss auf $|s_n\rangle$. Das Messproblem hat nun seinen Ursprung in der Linearität der Schrödingergleichung. Denn Anwendung obiger Kopplungsregel auf den Superpositionszustand $|\psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle$ ergibt - allein wegen Linearität der Schrödingerentwicklung -

$$\left(\sum_n c_n |s_n\rangle\right) \otimes |a_0\rangle \xrightarrow{\text{S.E.}} \sum_n c_n |s_n\rangle \otimes |a_n\rangle. \quad (4.177)$$

Das heißt, dass gemäß der Schrödingerevolution das System $S+\mathcal{A}$ in einem Überlagerungszustand ist. Dies wird aber offensichtlich nicht beobachtet - wie im berühmten Paradox von Schrödingers Katze ausgeschlachtet wird.

Die Lösung des Problems ist hochkontrovers und reicht von der Leugnung des Problems bis hin zu einer völligen Umformulierung der Quantenmechanik².

Dekohärenz

Beginnen wir mit einem pragmatischen Zugang zum Messproblem über das Phänomen der *Dekohärenz*.³ Die physikalische Bedeutung der Dekohärenz als solche gilt in der Literatur als unstrittig und kann wie folgt umschrieben werden:

- Jede Messung führt unweigerlich zu einer Kopplung von S und \mathcal{A} an die Umwelt \mathcal{E} , welche ebenfalls quantenmechanisch beschrieben wird mithilfe des Hilbertraums $\mathcal{H}_{\mathcal{E}}$. Sei $|e_n\rangle$ eine Basis von $\mathcal{H}_{\mathcal{E}}$. Sei $|\psi\rangle_S = \sum_n c_n |s_n\rangle$. Dann muss der Messprozess ausgeweitet werden auf die Verschränkung von $S, \mathcal{A}, \mathcal{E}$ von der Form

$$\sum_n c_n |s_n\rangle \otimes |a_0\rangle \otimes |e_0\rangle \xrightarrow{\text{S.E.}} \sum_n c_n |s_n\rangle \otimes |a_n\rangle \otimes |e_n\rangle. \quad (4.178)$$

- Die Messung einer Observablen \hat{O} an S und \mathcal{A} ignoriert unweigerlich die (meisten Freiheitsgrade) der Umwelt. Das heißt wir messen eigentlich $\hat{O} = \hat{O}_{S+\mathcal{A}} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{E}}$ an $S + \mathcal{A} + \mathcal{E}$.
- Das bedeutet, dass die Messung von \hat{O} am System $S + \mathcal{A}$ *effektiv* durch die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}$ beschrieben wird,

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}_{S+\mathcal{A}}(\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}} \hat{O}_{S+\mathcal{A}}). \quad (4.179)$$

²Einen Überblick über verschiedene Ansätze bietet z.B. der Review-Artikel H. Schlosshauer "Decoherence, the measurement problem, & interpretations of quantum mechanics" (<http://arxiv.org/abs/quant-ph/0312059>).

³H.D. Zeh, Heidelberg 1970; W. Zurek, 1981.

Da wir de fakto immer die Umwelt \mathcal{E} ignorieren, müssen wir “for all practical purposes” die Physik des Systems $S + \mathcal{A}$ durch die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}$ ausdrücken.

Konkret: A priori liefert die Kopplung von $S, \mathcal{A}, \mathcal{H}$ den reinen Zustand

$$\sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle \quad (4.180)$$

mit Dichtematrix

$$\rho_{S+\mathcal{A}+\mathcal{E}} = \sum_{n,m} c_n c_m^* |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle \langle s_m| \langle a_m| \langle e_m|. \quad (4.181)$$

Die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{E}} \rho_{S+\mathcal{A}+\mathcal{E}}$ hingegen beschreibt einen gemischten Zustand

$$\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}} = \sum_{n,m} c_n c_m^* |s_n\rangle |a_n\rangle \langle s_m| \langle a_m| \underbrace{\sum_k \langle e_k|e_n\rangle \langle e_m|e_k\rangle}_{\langle e_m|e_n\rangle}. \quad (4.182)$$

Beachte dabei, dass im allgemeinen $\langle e_m|e_n\rangle$ nicht unbedingt $\sim \delta_{nm}$ sein muss. Denn die Zustände $|e_m\rangle$ sind spezielle Zustände des Hilbertraums $\mathcal{H}_{\mathcal{E}}$, definiert durch die genaue Kopplung (4.178). Diese ist natürlich abhängig vom konkreten untersuchten System bzw. Prozess. Explizite Modellrechnungen der Dekohärenzforschung zeigen hingegen, dass generisch die Kopplung von $S + \mathcal{A}$ an \mathcal{E} so ist, dass nach extrem kurzer Dekohärenzzeit t_d

$$\langle e_m|e_n\rangle(t) \xrightarrow{t_d} \delta_{nm}. \quad (4.183)$$

Das heißt, dass

$$\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}} \xrightarrow{t_d} \hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}^d = \sum |c_n|^2 |s_n\rangle |a_n\rangle \langle s_n| \langle a_n|. \quad (4.184)$$

Die nicht-diagonalen Einträge klingen exponentiell in t ab, desto schneller, je

- größer die Anzahl N der angekoppelten Freiheitsgrade der Umwelt \mathcal{E} ist und je
- stärker die physikalische Kopplung ist.

Damit ist effektiv Interferenzfähigkeit verloren. Das entspricht klassischem Verhalten. Beachte dabei, dass Dekohärenz omnipräsent ist - sie kann nur durch quasi perfekte Isolation eines quantenmechanischen Systems vermieden werden. Eine “Beobachtung” (z.B. Kopplung an Photonen) reicht immer aus, um Interferenzfähigkeit for all practical purposes zu unterdrücken. Gleichwohl findet durch Dekohärenz keinerlei “Kollaps” statt - das Gesamtsystem $S + \mathcal{A} + \mathcal{E}$ bleibt zu allen Zeiten in einem reinen Zustand; jedoch sind Interferenzen im System $S + \mathcal{A}$ effektiv nicht beobachtbar, weil dieses for all practical purposes der Dynamik eines gemischten Zustandes folgt. Das bedeutet, dass die Unitarität der Zeitentwicklung erhalten bleibt und gleichzeitig effektive Klassizität beobachtet wird.

Die Frage ist nun, ob die Dekohärenz das Messproblem völlig löst. Benennen wir einige Einwände:

- Für eine große, aber endliche Anzahl von angekoppelten Freiheitsgraden von \mathcal{E} ist der Übergang zur Diagonalmatrix $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}} \rightarrow \hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}^D$ nur asymptotisch für $t \rightarrow \infty$. Nach endlichen Zeiten ist die Interferenzfähigkeit sehr klein, aber strenggenommen nicht null.
- Selbst wenn wir den Unterschied zwischen einem asymptotischen und einem exakt diagonalen $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}^D$ ignorieren und mit $\hat{\rho}_{S+\mathcal{A}}^D = |c_1|^2 \rho_1 + |c_2|^2 \rho_2 + \dots + |c_n|^2 \rho_n$ für $\rho_i = |s_i\rangle |a_i\rangle \langle s_i| \langle a_i|$ arbeiten: Tatsächlich wird nur ein $|s_j\rangle |a_j\rangle$ beobachtet. Wir fragen uns, was hierüber entscheidet. Und was “passiert” mit den anderen “Branches”? Dieses Frage bleibt in der Dekohärenztheorie unbeantwortet.

Vielwelten-Interpretation

Gemäß der Vielwelten-Interpretation der Quantenmechanik ⁴ findet kein Kollaps der Wellenfunktion statt. Stattdessen sind alle Zweige $|s_n\rangle|a_n\rangle$, d.h. alle möglichen Messausgänge, tatsächlich real und realisiert - jeder in einer anderen Welt. Das führt zu einer ständigen Verzweigung der Gesamtwellenfunktion des Universums, die alle Möglichkeiten realisiert. Unser Bewusstsein “sieht” aber jeweils nur einen bestimmten Zweig. Demnach wäre der Kollaps der Wellenfunktion nur eine Illusion, die darauf beruht, dass die anderen Verzweigungen dem Beobachter nicht zugänglich sind. Der subjektiv wahrgenommene Probabilismus ergibt sich daraus, dass, ähnlich wie bei einem Galton-Brett, der Beobachter auf jedem Pfad der Wellenfunktion nach einer hinreichend großen Anzahl entsprechend präparierter Messungen die einzelnen Abzweigungen entsprechend oft genommen hat, jede gewichtet mit $|c_n|^2$. Obwohl kein Kollaps der Wellenfunktion stattfindet, ist doch gewährleistet, dass bei der zweiten Messung unmittelbar nach der ersten mit Wahrscheinlichkeit 1 dasselbe Ergebnis gemessen wird.

Ein populärer Zugang zum Messproblem besteht also darin, mithilfe von Dekohärenz den Verlust der Interferenzfähigkeit im Makroskopischen und mithilfe der Vielweltentheorie dann die Frage nach der Auswahl der einzelnen Zweige in der reduzierten Dichtematrix zu erklären.

Weitere Lösungsideen zum Messproblem

Neben den eben angeführten Ideen gibt es weitere, die versuchen das Messproblem zu lösen. Zu ihnen gehören

- die dynamische Kollpastheorie: Ausgangspunkt ist die Tatsache, dass es die *Linearität* der Schrödingerevolution ist, welche erst das Messproblem entstehen lässt, siehe Gl. (4.177). Eine Möglichkeit, dies zu umgehen, besteht deshalb in einer nicht-linearen Modifikation der Schrödingergleichung. Ein Beispiel hierfür ist die *Ghirardi-Rimini-Weber-Theorie* (GRW).
- die *Bohmsche Mechanik*/DeBroglie-Bohm-Führungswellen-Theorie: Hier wird die Wellenfunktion als Führungsfeld für realistische Teilchentrajektorien interpretiert. Das Geschwindigkeitsfeld $\vec{v} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} S(\vec{x}, t)$, welches wir im Zusammenhang mit der Kontinuitätsgleichung formal aus Gl. (2.82) gefolgert hatten, wird hier also wörtlich als Tangentiale zur Teilchentrajektorie interpretiert. Diese Formulierung ist manifest nichtlokal, was im Einklang mit der bekannten Nichtlokalität der nicht-relativistischen Quantenmechanik steht. Ein Nachteil dieser Formulierung ist, dass sie in konkreten Anwendungen relativ kompliziert zu handhaben ist, und, trotz Fortschritten in der jüngeren Zeit, eine Ausweitung auf relativistische Quantenmechanik nicht-trivial ist.

Zusammenfassung:

- Die Quantenmechanik funktioniert auf praktischem Level bereits in der Standardinterpretation hervorragend. Das erklärt den “Shut-up-and-calculate”-Approach vieler Physiker.
- Das Messproblem ist ein konzeptionelles, kein praktisches Problem. Aber als konzeptionelles Problem ist es genauso ernst zu nehmen, wie wenn es ein praktisches wäre.
- Alle obigen Ansätze sind bislang empirisch äquivalent zur Standardformulierung.

Die einzige empirisch ausgeschlossene “Lösung” des Messproblems ist die Beschreibung des Zustandes durch Hinzunahme *lokale* “Hidden variables”, welche die Wellenfunktion komplettieren.

⁴Hugh Everett, 1957

Die Existenz solcher lokalen versteckten Variablen ist durch die *Bellsche Ungleichungen*⁵ ausgeschlossen.⁶

4.6 Pfadintegralformulierung und Streutheorie

Abschließend sei noch auf die folgenden beiden wichtigen Themenkreise hingewiesen, die später unter anderem in der Quantenfeldtheorie nochmals behandelt werden. Sie können aber schon im Rahmen der Quantenmechanik verstanden werden:

- **Das Feynman-Pfadintegral**

In der Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik wird der Propagator $G(x', t', x, t)$, definiert in Gl. (2.59), durch die Summation über alle möglichen Wege von (x', t') nach (x, t) berechnet, salopp formuliert als

$$G(x', t', x, t) = \sum_{\text{alle Wege}} e^{iS[x(t)]/\hbar}. \quad (4.185)$$

Die Ersetzung der Summe durch ein Integral gibt diesem ausgesprochen nützlichen Zugang seinen Namen. Das Pfadintegral wird gemäß einer Sattelpunktapproximation dominiert von den klassischen Wegen, für welche die Wirkung $S[x(t)]$ stationär ist. Die klassisch verbotenen Pfade tragen mit entsprechender Gewichtung allerdings auch bei. Im Limes $\hbar \rightarrow 0$, oder besser gesagt für $S[x(t)] \gg \hbar$ ergibt sich klassisches Verhalten, weil die klassisch verbotenen Pfade stark unterdrückt sind.

Eine geeignete Einführung in dieses Thema findet sich beispielsweise in “Principles of Quantum Mechanics” von Shankar (Kapitel 8 und 21).

- **Streutheorie**

Hier wird die Streuung von Wellenfunktionen an einem Potential behandelt. Eines der zentralen Ergebnisse der Streutheorie ist das optische Theorem. Eine leicht verdauliche Einführung hierzu findet sich beispielsweise in Schwabl, Kapitel 16.

⁵Siehe z.B. J.Bell: “Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics”.

⁶Anders als oftmals fälschlicherweise behauptet ist die oben umrissene Bohmsche Mechanik hiervon nicht betroffen, denn in dieser sind die Teilchenpositionen manifest nicht-lokal, was nicht im Widerspruch mit den Bellschen Ungleichungen steht.