

Quantenmechanik

Vorlesungsnotizen zum Kurs von A. Hebecker, Sommersemester 2018 und 2019

Diese Vorlesung wird besonders stark durch die Bücher [1–3] und die Skripte [4,5] beeinflusst werden. Es gibt natürlich eine sehr große Zahl verschiedenartiger, ausgezeichneter Lehrbücher (z.B. [6–14] und für tiefere mathematische Aspekte [15–18]), die ich zum Teil auch benutzen werde. Es wird leider nicht immer möglich sein, auf die beste Herleitung und das beste weiterführende Buch zu einem gewissen Thema zu verweisen. Bitte suchen Sie selbst mit!

Inhaltsverzeichnis

1 Materiewellen und Schrödingergleichung	4
1.1 Motivation	4
1.2 Materiewellen	5
1.3 Schrödingergleichung	7
1.4 Die neue Weltansicht der Quantenmechanik	9
1.5 Wahrscheinlichkeitsstromdichte	12
1.6 Erwartungswerte von Observablen	13
2 Das 2-Zustands-System und andere endlich-dimensionale Modelle	16
2.1 2- und mehr-Zustands-Systeme	16
2.2 Endlichdimensionale komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt	18
2.3 Erste Schritte zur Physik des Zwei-Zustands-Systems	20
2.4 Adjungierte und Hermitesche Operatoren	23
2.5 Eigenwerte, Diagonalisierbarkeit, unitäre Operatoren	26
2.6 Zeitentwicklung mit konstantem H	29
2.7 Zeitentwicklung allgemein	30
2.8 Postulate der Quantenmechanik	32
3 Der harmonische Oszillator	33
3.1 Vorbemerkungen	33
3.2 Algebraische Lösung	34
3.3 Hermite-Polynome	36
3.4 Kohärente Zustände	38

4	Weitere eindimensionale Systeme	40
4.1	Das freie Teilchen auf der S^1	40
4.2	Das freie Teilchen	41
4.3	Heisenberg-Algebra und Translations-Symmetrie	43
4.4	Zerfließendes Wellenpaket	46
4.5	Die Heisenbergsche Unschärferelation	48
4.6	Der Potentialtopf	49
4.7	Tunneln am Beispiel der Potentialschwelle	52
5	Drehimpuls	54
5.1	Motivation aufgrund des Zentralkraftproblems	54
5.2	Beziehung zum Laplace-Operator	55
5.3	Die Drehimpulsalgebra	56
5.4	Abstrakte Darstellungen der Drehimpulsalgebra	57
5.5	Darstellung durch Funktionen auf der Sphäre	61
5.6	Kugelflächenfunktionen	64
5.7	Parität und Laplace-Operator auf der Sphäre	66
6	Das Wasserstoffatom	68
6.1	Zusammengesetzte Systeme	68
6.2	Unterscheidbare Teilchen und Zweikörperproblem	69
6.3	Das quantenmechanische Zentralkraftproblem	71
6.4	Das Wasserstoff-Spektrum	72
6.5	Unendlichdimensionale Hilberträume	76
7	Spin	79
7.1	Das Fehlen von halbzahligen Drehimpuls-Darstellungen	79
7.2	Wirkung von Symmetrien auf Felder und Quantenmechanik mit allgemeinem Spin	81
7.3	Spin $1/2$	83
7.4	$SO(3)$ und $SU(2)$	84
7.5	Clebsch-Gordan-Koeffizienten - Allgemeines	87
7.6	Clebsch-Gordan-Koeffizienten und Drehimpuls-Addition	89
7.7	Identische Teilchen – Spin und Statistik	92

7.8	Kopplung an Magnetfelder	95
8	Weitere konzeptionelle Themen	95
8.1	Heisenberg-Bild	95
8.2	Zeitunabhängige Störungstheorie	98
8.3	Zeitabhängige Störungstheorie	101
8.4	Kanonische Quantisierung	102
8.5	Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld	104
8.6	Die Dichtematrix	107
8.7	Dekohärenz, Messprozess, Interpretationen der Quantenmechanik	108
8.8	Pfadintegralzugang	111

1 Materiewellen und Schrödingergleichung

1.1 Motivation

Die Quantenmechanik ist experimentell motiviert. Mir ist kein überzeugendes theoretisches Argument bekannt, aus dem sie (gegeben z.B. ein gutes Verständnis der klassischen Mechanik und Feldtheorie) abgeleitet werden könnte.

Dass etwas mit dem rein klassischen Weltbild ‘nicht stimmt’ kann man aber durchaus theoretisch argumentieren: Nehmen wir dazu die Gleichverteilung der Energie im thermodynamischen Gleichgewicht auf alle Freiheitsgrade eines Systems an und betrachten einen evakuierten Hohlraum. Dessen Freiheitsgrade sind die darin anregbaren stehenden elektromagnetischen Wellen. Davon gibt es (bei sehr kurzen Wellenlängen) unendlich viele. Demnach würde der Hohlraum bei Kontakt mit einem Wärmebad pro Freiheitsgrad $kT/2$ und somit unendlich viel Energie aufnehmen (**UV Katastrophe**). Natürlich kann man dem ausweichen, indem man die Gleichverteilungsannahme anzweifelt und man lernt auch nicht, *wie* die Theorie zu modifizieren ist.

Ein anderes Problem der rein klassischen Physik ist die divergierende Selbstenergie bzw. Selbstwechselwirkung des Elektrons (**self-force, radiation-reaction, Abraham-Lorentz force**). Dieses Problem hat zwei Aspekte: Einerseits die oben angesprochene Divergenz (der Masse), die auftritt, wenn man von einer kontinuierlichen Ladungsverteilung ausgeht und diese auf einen Punkt konzentriert. Andererseits das Auftreten von Akausalem Verhalten und ‘Runaway solutions’, die in etwa einer Beschleunigung des Elektrons durch sein eigenes Feld entsprechen. Einige Bemerkungen dazu finden sich in [19, 20] (siehe auch http://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_28.html und https://en.wikipedia.org/wiki/Abraham-Lorentz_force). Es sind dies allerdings Probleme der klassischen Feldtheorie, nicht der klassischen Mechanik.

Aber, wie schon gesagt, die obigen Versuche der theoretischen Motivation sind sekundär gegenüber der direkten experimentellen Evidenz. Einige dieser historisch wichtigen **experimentellen Befunde** waren:

(1) Quantisierung (der Energie) des Lichts gemäß

$$E = \hbar\omega, \tag{1.1}$$

wie sie z.B. aus dem photoelektrischen Effekt folgt.

(2) Die Stabilität und Energiequantisierung des H-Atoms.

(3) Das Stern-Gerlach-Experiment (Spin-Quantisierung).

(4) Das Doppelspalt-Experiment.

Wir wollen nun möglichst einfach und anschaulich zu den zentralen theoretischen Ideen gelangen und anschließend die Theorie selbstkonsistent entwickeln (natürlich auch mit Blick auf die experimentelle Anwendung).

Dazu wollen wir uns $E = \hbar\omega$ (was sich als zentral erweisen wird) merken, aber von den Photonen Abstand nehmen. Diese sind die Quanten des elektromagnetischen Feldes und ein echtes Verständnis würde dessen Quantisierung (also die Entwicklung der Quantenfeldtheorie) erfordern. Das ist uns im Moment zu kompliziert. Stattdessen betrachten wir nichtrelativistische

(Punkt-)Teilchen, speziell das Doppelspaltexperiment.

1.2 Materiewellen

Der Befund des Doppelspaltexperiments sollte vertraut sein: Teilchenstrahlen interferieren wie Wellen, insbesondere auch (oder gerade dann) wenn die Intensität so klein ist, dass zu jedem gegebenen Zeitpunkt nur ein Elektron in der Anordnung ist (Abb. 1).

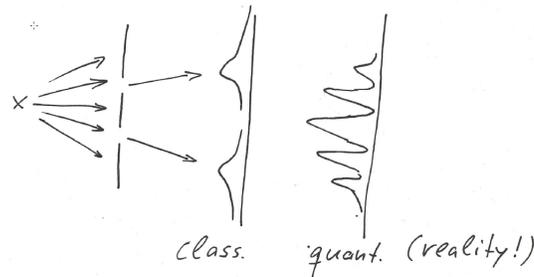


Abbildung 1: Doppelspaltexperiment.

Sie sollten sich jetzt erinnern, wie das Doppelspaltexperiment mit (klassischem) Licht oder Wasserwellen mathematisch beschrieben wird. Das übertragen wir auf unsere zu entwickelnde Theorie und lernen somit:

(1) Teilchen werden durch Wellen beschrieben:

$$\psi(\vec{x}, t) \sim e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}. \quad (1.2)$$

(2) Das Superpositionsprinzip gilt: $\psi_{ges.} = \psi_1 + \psi_2$.

(3) Die Intensitätskurve auf dem Schirm entspricht der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens, welche demnach (damit unsere Wellen-Interpretation funktioniert) durch das Betragsquadrat der Amplitude gegeben ist:

$$\text{Aufenthaltswahrscheinlichkeit} \sim |\psi(\vec{x}, t)|^2. \quad (1.3)$$

Klarerweise ist der experimentelle Input eigentlich detaillierter, als wir es hier darstellen. Man könnte z.B. rein qualitativ ein ähnliches Bild erhalten, wenn man in der letzten Formel $|\psi|^\alpha$ mit $\alpha \neq 2$ schreiben würde. Aber das ist nicht, was die Daten sagen. Man könnte auch versuchen, mit einer reellen (Sinus-)Welle zu arbeiten. Aber dann gäbe es Stellen entlang der Ausbreitungsrichtung des Strahls, an denen der Sinus verschwindet und wo demnach das Teilchen nie sein kann. Das ist zumindest unschön. Wir behaupten hier nicht, (1) bis (3) in einem mathematischen Sinne abgeleitet zu haben – wir haben aber eine sehr einfache und überzeugende Motivation.

Wir akzeptieren die obigen Schlussfolgerungen aus dem Doppelspaltexperiment, nehmen noch $E = \hbar\omega$ hinzu und argumentieren jetzt als Theoretiker: Zunächst bemerken wir, dass die drei Parameter \vec{p} (der Impuls) des Teilchens den 4 Parametern \vec{k} und ω der Welle gegenüberstehen. Wir erwarten, dass sich dies mathematisch durch Funktionen $\vec{k} = \vec{k}(\vec{p})$ und

$\omega = \omega(\bar{p})$ darstellen lässt. Außerdem wird man i.A. die erste Beziehung auch zu $\bar{p} = \bar{p}(\bar{k})$ invertieren können. Damit ließe sich dann auch $\omega = \omega(\bar{p}(\bar{k}))$ bzw. $\omega = \omega(\bar{k})$ (Dispersionsrelation) schreiben. Die genauen Formeln wollen wir jetzt herleiten.

Dazu beschreiben wir ein Teilchen, welches räumlich lokalisiert ist, als **Wellenpaket**:

$$\psi(\bar{x}, t) = \int d^3k f_{\bar{k}_0}(\bar{k}) e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega(\bar{k})t)}. \quad (1.4)$$

Hier ist $f_{\bar{k}_0}$ eine Funktion, die bei \bar{k}_0 ihr Maximum hat und davon entfernt schnell abfällt (z.B. eine 3d Gauß-Kurve). Dann ist ψ bei $t = 0$ die Fourier-Transformierte von f und somit ebenfalls eine Gauß-Kurve, beschreibt also ein lokalisiertes Teilchen mit Impuls ungefähr gleich \bar{k}_0 .

Die Geschwindigkeit, mit der sich das Wellenpaket (also das Teilchen) bewegt, ist die **Gruppengeschwindigkeit**

$$\bar{v} = \nabla_{\bar{k}} \omega. \quad (1.5)$$

Des Weiteren haben wir

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\bar{p}^2}{2m\hbar}. \quad (1.6)$$

Wir nehmen $\bar{p} = \bar{p}(\bar{k})$ an und rechnen:

$$\frac{p_i}{m} = v_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i} = \frac{\partial \omega}{\partial p_j} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial k_i} = \frac{p_j}{m\hbar} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial k_i}. \quad (1.7)$$

Es muss also $\partial p_j / \partial k_i = \delta_{ij} \hbar$ und somit

$$\bar{p} = \hbar \bar{k} \quad (1.8)$$

gelten. Die Dispersionsrelation ist

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} \bar{k}^2. \quad (1.9)$$

Jetzt kommen wir zur einzelnen, unendlich ausgedehnten Welle,

$$\psi(\bar{x}, t) \sim e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega t)}, \quad (1.10)$$

zurück und stellen fest, dass sie offensichtlich die Differentialgleichung

$$-i\hbar \nabla \psi(\bar{x}, t) = \bar{p} \psi(\bar{x}, t) \quad (1.11)$$

erfüllt. Genaugenommen sind dies natürlich 3 Gleichungen:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\bar{x}, t) = p_i \psi(\bar{x}, t), \quad (1.12)$$

für $i = 1, 2, 3$.

Zur Vereinfachung wollen wir uns für den Moment eine eindimensionale Welt vorstellen, in der es nur eine Koordinate x gibt, so dass

$$\psi(x, t) \sim e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.13)$$

und

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = p \psi(x, t). \quad (1.14)$$

Dies ist eine **Eigenwertgleichung** analog zu

$$M_{ij} y_j = \lambda y_i, \quad (1.15)$$

wobei $i, j \in \{1, \dots, n\}$ und \vec{y} ein Eigenvektor der Matrix (des Operators) M zum Eigenwert λ ist. Allerdings ist unserem Fall der Operator ein Differentialoperator und der Vektorraum ist der Raum von Funktionen ψ . Diese mathematische Struktur werden wir noch viel genauer diskutieren.

Im Moment merken wir uns, dass der Operator $-i\hbar \partial/\partial x$ sehr eng mit dem Impuls p zusammenzuhängen scheint, zumindest für eine ebene Welle (bzw. ein Teilchen in einem Zustand, der einer ebenen Welle entspricht). In 3 Dimensionen hängt $-i\hbar \nabla$ auf ebendiese Weise mit \vec{p} zusammen.

1.3 Schrödingergleichung

Die oben hergeleitete Differentialgleichung ist zwar interessant, aber sie beinhaltet keine Zeitableitungen. Im Gegensatz zu den zentralen Differentialgleichungen der klassischen Mechanik und Feldtheorie, erlaubt sie also keine Vorhersage der Zeitentwicklung.

Allerdings erfüllt die ebene Welle (wir bleiben zunächst in einer Dimension) natürlich noch eine andere, interessantere Differentialgleichung: die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t). \quad (1.16)$$

Wir haben hier schlicht die Dispersionsrelation

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{oder auch} \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad (1.17)$$

durch die passenden Differentialoperatoren ausgedrückt. Dabei haben wir, aufgrund des wellentypischen Faktors $\exp(-i\omega t)$, die Kreisfrequenz ω durch eine Zeitableitung gewonnen.

Wir können dies leicht verallgemeinern, indem wir zulassen, dass unsere Welle/Teilchen auf ihrem Weg durch einen Bereich mit nichtverschwindendem Potential kommt (Abb. 2). Wenn wir unsere obigen Überlegungen im Bereich mit $V = 0$ voraussetzen, dann wird unser Teilchen im Bereich mit $V > 0$ die kleinere kinetische Energie $E - V$ und damit auch ein entsprechend kleineres p bzw. k haben. Dem in der obigen Differentialgleichung Rechnung zu tragen ist einfach: Wir wollen physikalisch die Ersetzung

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1.18)$$

durchführen. Dadurch wird sichergestellt, dass in Bereichen mit größerem V der Impuls p bzw. die Wellenzahl k kleiner wird. Im Kontext unserer Differentialgleichung entspricht dies der Ersetzung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (1.19)$$

In 3 Dimensionen folgt damit unser zentrales Resultat, die **Schrödingergleichung**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \psi(\bar{x}, t). \quad (1.20)$$

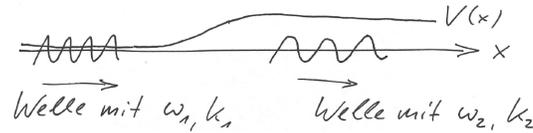


Abbildung 2: Welle in langsam variierendem Potential.

Zusammen mit der Interpretation von $|\psi(\bar{x}, t)|^2$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort \bar{x} zur Zeit t , ist damit eigentlich alles Grundsätzliche gesagt: Der Rest ist mathematische Formalisierung (Hilbertraum etc.), Anwendung (Oszillator, H-Atom und vieles mehr), sowie Verallgemeinerungen (Teilchen mit Spin, mehrere Teilchen etc.). Aber es wäre falsch, das zu unterschätzen: Die völlig neue Struktur der obigen Gleichung (im Vergleich zur klassischen Theorie) birgt sehr viel Interessantes.

Am Rande sei bemerkt, dass unsere Herleitung des $V(x)$ -Terms nicht völlig überzeugend war, weil wir z.B. von ebenen Wellen gesprochen, aber dann verschiedene Wellenzahlen in verschiedenen Raumbereichen zugelassen haben. Man kann das viel besser machen, indem man Wellenpakete in einem langsam veränderlichen Potential untersucht. Dies führt zu einer interessanten Beziehung zwischen dem Fermatschen Prinzip (Licht nimmt immer den extremalen Weg) und dem Wirkungsprinzip der klassischen Mechanik (siehe z.B. [2]). Die Schrödingergleichung folgt so zumindest technisch aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung. Aber wir wollen das hier nicht weiter ausführen. Schlussendlich ist die Schrödingergleichung das grundlegendere Prinzip und die klassische Mechanik folgt in einem gewissen Limes (wie wir später noch genauer verstehen werden).

Zum Abschluss dieses Unterkapitels geben wir noch eine zum tieferen Verständnis sehr nützliche, andere Schreibweise für die Schrödingergleichung an:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \hat{H} \psi(\bar{x}, t), \quad \text{wobei} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad (1.21)$$

und

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \nabla. \quad (1.22)$$

Hier haben wir die bereits erwähnte besondere Beziehung zwischen \bar{p} und dem Differentialoperator $-i\hbar \nabla$ formalisiert, in dem wir den zu \bar{p} gehörigen Differentialoperator \hat{p} (eigentlich 3 Differentialoperatoren) definiert haben. Damit haben wir einen Differentialoperator für die kinetische Energie und einen (allerdings ‘nullter Ordnung’) für die potentielle Energie. Die Summe ist ein Differentialoperator für die Energie, der sogenannte Hamilton-Operator \hat{H} . Wir werden den ‘hat’ immer als Notation für Operatoren benutzen.

Wir wir sehen, definiert der Hamilton-Operator die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion. Das ist die Schrödinger-Gleichung.

1.4 Die neue Weltsicht der Quantenmechanik

Wir wollen bereits jetzt ein paar erste zaghafte Schritte zur Formalisierung und konzeptionellen Klärung gehen. Wir erinnern daran, dass ein physikalischer Zustand in der klassischen Hamilton-Mechanik durch einen Punkt im Phasenraum ($2n$ Koordinaten) gegeben war. Die zeitliche Entwicklung folgt einem System von i.A. nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung. Letztere werden durch die Hamilton-Funktion definiert.

Jetzt wird der Zustand durch eine Funktion (die Schrödinger-Wellenfunktion $\psi(x, t)$ mit festem t) auf dem Konfigurationsraum (nicht dem Phasenraum!) beschrieben.¹ Die Zeitentwicklung folgt diesmal aus einer linearen (allerdings partiellen) Differentialgleichung. Das entscheidende Objekt, das diese Gleichung definiert, ist der aus der Hamilton-Funktion folgende Hamilton-Operator. Im Moment folgt er einfach durch die Ersetzung $p \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$. Das dem zugrunde liegende tiefere Konzept lernen wir später.

Aufgrund der Linearität der Schrödinger-Gleichung, sind Summen von Lösungen und Produkte mit komplexen Zahlen wieder Lösungen. Es macht also Sinn, die Lineare Struktur des Raumes der Wellenfunktionen zu betonen. Dazu konzentrieren wir uns zunächst auf die Zustände, wir schreiben also

$$\psi(\cdot, t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto \psi(x, t), \quad (1.23)$$

oder vielleicht etwas eleganter

$$\psi_t : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto \psi_t(x) \equiv \psi(x, t). \quad (1.24)$$

Wir betrachten den Vektorraum \mathcal{H} der Funktionen ψ_t :

$$\psi_t \in \mathcal{H}. \quad (1.25)$$

Das ‘ \mathcal{H} ’ steht natürlich für Hilbert-Raum, aber mit der genauen Definition warten wir noch. Im Moment sind es einfach die (‘erlaubten’) Wellenfunktionen (immer bei festem t), die offensichtlich die Vektorraum-Axiome erfüllen. Wir denken uns diese als komplexe Vektoren in einem unendlichdimensionalen Raum. Man kann das sehr konkret machen, indem man sich x diskretisiert vorstellt:

Zum Beispiel betrachte man ein Teilchen, das auf einem Kreis läuft, welcher durch $x \in (0, 2\pi R)$ parametrisiert ist. Dann diskretisiere man, indem man nur die x -Werte $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ betrachtet, mit $x_0 \equiv x_N = 2\pi R$ und $x_{i+1} - x_i = 2\pi R/N$. Unsere Wellenfunktion wird nun zu einem (sogar endlichdimensionalen) komplexen Vektor, $\psi = \{\psi(x_1), \dots, \psi(x_N)\}$. Jetzt können wir Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzen und damit \hat{H} explizit als einen Matrix-Operator auf diesem Raum definieren. Die Zeitentwicklung ist dann nichts anderes als die Bewegung (aufgrund einer linearen Differentialgleichung) eines Vektors. Dies gilt natürlich auch für den technisch komplizierteren Fall des ‘Vektors’ $\psi(x)$ im unendlichdimensionalen Raum $L_2(\mathbb{R})$. Konzeptionell bleibt alles sehr einfach!

Wir gehen nun einen entscheidenden neuen Schritt, indem wir auf \mathcal{H} ein **(komplexes) Skalarprodukt** definieren:

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad (\psi, \chi) \mapsto \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\chi(x) \equiv \langle \psi | \chi \rangle. \quad (1.26)$$

¹Wir schreiben alles für $d = 1$, aber die Zahl der Raumdimensionen ist hier beliebig wählbar.

Hier haben wir das Zeitargument zur Vereinfachung unterdrückt. Die sogenannte ‘bra’ (für $\langle\psi|$) und ‘ket’ ((für $|\chi\rangle$)) Notation, abgeleitet vom englischen ‘bracket’ \equiv Klammer, ist im Moment nur eine Kurzform für das oben definierte Skalarprodukt.

Wir wollen, ohne uns jetzt schon in zu viel Mathematik zu verstricken, betonen, dass dieses Skalarprodukt die grundlegende lineare Struktur von \mathcal{H} respektiert: Es ist eine Sesquilinearform (eine Verallgemeinerung von Bilinearform) auf \mathcal{H} :

$$\langle\psi|\alpha_1\chi_1 + \alpha_2\chi_2\rangle = \alpha_1\langle\psi|\chi_1\rangle + \alpha_2\langle\psi|\chi_2\rangle, \quad \alpha_{1,2} \in \mathbb{C}, \quad (1.27)$$

$$\langle\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2|\chi\rangle = \alpha_1^*\langle\psi_1|\chi\rangle + \alpha_2^*\langle\psi_2|\chi\rangle. \quad (1.28)$$

Man sagt auch, dass das Skalarprodukt antilinear bzgl. des ersten und linear bzgl. des zweiten Arguments ist. Dies ergibt sich in unserem speziellen Fall natürlich aus der in (1.26) enthaltenen komplexen Konjugation. Allgemeiner gesprochen (mit Blick auf anders definierte Skalarprodukte auf komplexen Vektorräumen) ist die Sesquilinearität notwendig, damit die für jeden Vektor in \mathcal{H} durch

$$\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (1.29)$$

definierte **Norm** reell sein kann.

Wir warten mit der präzisen Definition von \mathcal{H} bis wir genug Beispiele haben, um Details zu würdigen. Klar ist jetzt schon, dass wir nicht alle Funktionen sondern nur die **quadratintegriblen** zulassen. Man schreibt auch $\psi \in L_2(\mathbb{R})$.

Physikalisch sind das eben eingeführte Skalarprodukt und die damit definierte Norm von überragender Bedeutung. Sie ermöglichen es uns, die eingangs gemachte Annahme, dass $|\psi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort x charakterisiert, zu formalisieren. Dazu wollen wir zunächst grundsätzlich festlegen, dass physikalische Zustände stets durch (auf Eins) **normierte** Wellenfunktionen dargestellt werden:

$$\psi \in \mathcal{H} \quad \text{mit} \quad \|\psi\| = 1 \quad (\text{bzw.} \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1). \quad (1.30)$$

Falls uns jemand einen nicht normierten Zustand $\psi_1 \in \mathcal{H}$ gibt, so können wir diesen jederzeit durch Multiplikation mit einer passenden Zahl normieren. Explizit ist z.B.

$$\psi(x) = \frac{\psi_1(x)}{\|\psi_1\|} \quad (1.31)$$

automatisch auf Eins normiert, wie man leicht nachrechnen kann.

Nach obigen Vorbemerkungen definieren wir jetzt die zu einem normierten Zustand ψ gehörende **Wahrscheinlichkeitsdichte**

$$\rho(x) \equiv \psi^*(x)\psi(x) \quad (1.32)$$

für die Position des Teilchens auf der x -Achse. Wir stellen fest, dass die Normierungsbedingung $\|\psi\| = 1$ gerade dem zweiten Kolmogorov-Axiom² entspricht:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\psi(x). \quad (1.33)$$

²Nur als sehr grobe Erinnerung an / Vorgriff auf eine detailliertere Diskussion der Wahrscheinlichkeitsrechnung: Seien A Untermengen der Gesamtmenge M (bei uns ist $M = \mathbb{R}$), so sind die Kolmogorov-Axiome

- (1) $w(A) \geq 0$,
- (2) $w(M) = 1$,
- (3) für disjunkte A_i ($i \in I$) gilt: $w(\cup_i A_i) = \sum_i w(A_i)$.

Die Wahrscheinlichkeit für das Auffinden des Teilchens im Intervall $[a, b]$,

$$w([a, b]) = \int_a^b dx \rho(x) = \int_a^b dx |\psi(x)|^2, \quad (1.34)$$

ist natürlich stets kleiner oder gleich Eins, wie es sein muss.

Die Bedeutung des Skalarproduktes geht noch viel weiter: Gegeben einen beliebigen Zustand ψ , wollen wir wissen, wie groß die Wahrscheinlichkeit dafür ist, das Teilchen in einem sehr kleinen Intervall $[a, a + \Delta a]$ zu finden. Die Antwort ist natürlich ein Spezialfall der obigen Formel, aber es ist nützlich, sie anders zu schreiben. Dazu definieren wir eine Wellenfunktion χ dadurch, dass

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Delta a}} \quad \text{falls} \quad x \in [a, a + \Delta a], \quad (1.35)$$

und anderenfalls $\chi(x) = 0$. Dieser Zustand beschreibt ein bei a lokalisiertes Teilchen (Abb. 3). Wir berechnen nun

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi^*(x) \psi(x) = \int_a^{a+\Delta a} dx \frac{\psi(x)}{\sqrt{\Delta a}} \simeq \sqrt{\Delta a} \psi(a), \quad (1.36)$$

sowie

$$|\langle \chi | \psi \rangle|^2 \simeq \Delta a |\psi(a)|^2. \quad (1.37)$$

Letzteres entspricht aber gerade der nach (1.34) berechneten Wahrscheinlichkeit, ein durch ψ charakterisiertes Teilchen im Intervall $[a, a + \Delta a]$ zu finden. Damit haben wir eine erste Motivation für die Gültigkeit der sogenannten **Bornschen Regel**:

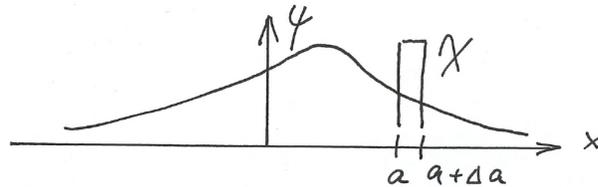


Abbildung 3: Allgemeine (ψ) und eng lokalisierte (χ) Wellenfunktion.

Sei ein physikalisches System in einem Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ gegeben und sei $\chi \in \mathcal{H}$ ein anderer möglicher Zustand. Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand χ zu finden, durch $w = |\langle \chi | \psi \rangle|^2$ gegeben.

Man mache sich klar, was für eine gewaltige Abweichung vom der klassischen Intuition bzgl. des Begriffs eines physikalischen Zustandes das mit sich bringt!

Bevor wir dieses sehr grundlegende Unterkapitel abschließen und mehr ins Detail gehen, noch ein paar Worte zur Notation. Die für das Skalarprodukt schon eingeführte **Bra-Ket**-Schreibweise lässt sich noch viel universeller einsetzen: Um Zustände $\psi, \chi \in \mathcal{H}$ zu bezeichnen, werden wir in Zukunft oft

$$|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.38)$$

schreiben. Des Weiteren bezeichnen wir mit

$$\langle \psi|, \langle \chi| \in \mathcal{H}^* \quad (1.39)$$

Elemente des Dualraums, also lineare Funktionale auf \mathcal{H} . Wir meinen damit z.B. für $\langle\psi|$ das lineare Funktional, welches durch die Wirkung von ψ auf χ gemäss (1.26) definiert ist. Die schon benutzte Notation

$$\langle\psi|\chi\rangle \equiv \langle\psi|\left(|\chi\rangle\right) \quad (1.40)$$

ist damit sehr intuitiv: Sie beschreibt die mathematisch natürliche Art, aus einem Element von \mathcal{H}^* und einem Element von \mathcal{H} durch Anwendung einer komplexen Zahl zu gewinnen.

1.5 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Im letzten Unterkapitel haben wir statt $\psi(x, t)$ nur $\psi(x)$ geschrieben, da wir uns für die Wahrscheinlichkeits-Interpretation der Wellenfunktion zu einem festen Zeitpunkt interessiert haben. Aber natürlich ist auch die der Schrödinger-Gleichung gehorchende Zeitentwicklung von $\psi(x, t)$ und damit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t)$ interessant. Wir wollen in diesem Abschnitt auch wieder explizit im \mathbb{R}^3 arbeiten: $x \rightarrow \bar{x}$. Es gilt also

$$\rho(\bar{x}, t) = \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t), \quad (1.41)$$

so dass

$$w(V, t) = \int_V d^3x \rho(\bar{x}, t) \quad (1.42)$$

die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, das Teilchen zum Zeitpunkt t im Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$ zu finden.

Wir fragen nun nach der zeitlichen Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\bar{x}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\bar{x}, t) \right) \psi(\bar{x}, t) + \psi^*(\bar{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) \right) = \psi^*(\bar{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) \right) + \text{c.c.} \quad (1.43)$$

Die hier auftretende Zeitableitung von ψ können wir mit der Schrödingergleichung berechnen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \psi(\bar{x}, t), \quad (1.44)$$

so dass folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \left[\frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi^* \psi \right] + \text{c.c.} = \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \text{c.c.} \quad (1.45)$$

Wir haben hier benutzt, dass V reell ist. Des Weiteren können wir umschreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla(\psi^* \nabla \psi) - (\nabla \psi^*)(\nabla \psi) \right] + \text{c.c.} \quad (1.46)$$

Der zweite Term in der Klammer ist aber reell, was zusammen mit dem expliziten imaginären Vorfaktor einen rein imaginären Beitrag ergibt. Dieser fällt nach Addition des komplex konjugierten Terms weg. Wir haben also

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla(\psi^*(\nabla \psi)) - \nabla((\nabla \psi^*)\psi) \right]. \quad (1.47)$$

Dies können wir als Kontinuitätsgleichung (vgl. Hydrodynamik) auffassen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \bar{j} = 0, \quad \text{wobei} \quad \bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left[(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla\psi) \right]. \quad (1.48)$$

die **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** ist.

Damit ist intuitiv sofort klar, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit, so wie die Gesamtmasse einer strömenden Flüssigkeit, erhalten ist. Formal folgt dies durch Integration der Kontinuitätsgleichung über den gesamten Raum und Anwendung des Gaußschen Satzes. (Wir müssen dabei annehmen, dass ψ im Unendlichen hinreichend schnell abfällt, so dass wir den Oberflächenterm vernachlässigen können.) Natürlich erwarten wir das auch physikalisch, da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen *irgendwo* zu finden, stets Eins belieben muss.

Technisch haben wir bewiesen, dass die Zeitentwicklung des Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gemäß Schrödinger-Gleichung die Norm dieses Vektors (denn genau das war ja die Gesamtwahrscheinlichkeit) nicht verändert.

Es sei noch erwähnt, dass man ρ und \bar{j} im Fall eines geladenen Teilchens als Ladung und Stromdichte auffassen kann, was den obigen Erhaltungssatz auf ein noch fundamentaleres Niveau hebt. Schließlich ist für die Intuition noch nützlich, den Fall einer ebenen Welle zu betrachten. Es gilt dann $\psi \sim \exp(i\bar{k}\bar{x})$ und somit $\nabla\psi = i\bar{k}\psi$. Daraus folgt

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} 2(-i\bar{k}) \psi^*\psi = \frac{\bar{p}}{m} \rho = \bar{v}\rho, \quad (1.49)$$

wie man auch naiv erwarten würde.

1.6 Erwartungswerte von Observablen

Was schon vielfach erwähnt bzw. angedeutet wurde, soll jetzt noch einmal ganz klar gesagt werden: In der Quantenmechanik ist in vielen Fällen die exakte Vorraussage eines Messergebnisses nicht möglich - nur statistische oder Wahrscheinlichkeitsaussagen können gemacht werden. Unser intuitives Standardbeispiel ist der Detektionsort des Teilchens auf dem Schirm des Doppelspalt-experiments. Allgemeiner wollen wir schlicht von dem Ort x eines Teilchens in einer Dimension sprechen. Nehmen wir zur Vereinfachung an, der Ort sei diskret, es gäbe also nur eine gewisse Zahl von Punkten x_i ($i = 1, \dots, N$), an denen das Teilchen sein könnte.

Wir bereiten das Teilchen viele Male exakt gleich vor (z.B. mit dem Durchgang durch den Doppelspalt) und sehen dann nach, wo es ist. Der **Mittelwert** des Ortes bei einer solchen Messreihe ist, wie Sie schon wissen,

$$\bar{x} \equiv \frac{\sum_i n_i x_i}{\sum_i n_i}, \quad (1.50)$$

wobei n_i die Zahl der Versuche ist, bei denen wir den Ort x_i gefunden haben. (Achtung, der Strich in \bar{x} steht hier für Mittelwert, nicht für Vektor.) Der **Erwartungswert** ist

$$\langle x \rangle = \sum_i w_i x_i, \quad \text{wobei} \quad \sum_i w_i = 1 \quad (1.51)$$

die Normierung der Wahrscheinlichkeiten beschreibt. Der Mittelwert sehr großer Messreihen wird diesen Erwartungswert immer besser reproduzieren.

Die Quantenmechanik kann uns nicht den einzelnen Versuchs-Ausgang sondern nur die Wahrscheinlichkeiten w_i liefern. In unserem diskreten Spielzeugmodell wäre dies

$$w_i = |\psi_i|^2 \quad (1.52)$$

wobei $|\psi\rangle \equiv \{\psi_1, \dots, \psi_N\}^T \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^N$ die Wellenfunktion ist. Da ihr Argument i (äquivalent zu den Positionen x_i) nur endlich viele Werte annehmen kann, ist dies schlicht ein auf Eins normierter komplexer Vektor:

$$\sum_i \psi_i^* \psi_i = 1. \quad (1.53)$$

Der Erwartungswert des Ortes ist im Spielzeugmodell

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i w_i = \sum_i x_i \psi_i^* \psi_i \quad (1.54)$$

oder, im jetzt offensichtlichen Kontinuumsfalls,

$$\langle x \rangle = \int dx x \rho(x) = \int dx \psi^*(x) x \psi(x). \quad (1.55)$$

In der letzten Formel haben wir x in die Mitte geschrieben, da wir folgende sehr wichtige Interpretation dieser Formel geben wollen:

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle. \quad (1.56)$$

Hierbei ist \hat{x} ein (sehr einfacher) Operator: Er ordnet der komplexen Funktion ψ durch Multiplikation mit der reellen Funktion (der Identität) f ($f(x) = x$) eine neue komplexe Funktion zu:

$$\hat{x} |\psi\rangle : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto x\psi(x). \quad (1.57)$$

Der Operator \hat{x} ist ein linearer Operator auf \mathcal{H} :

$$\hat{x} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle \mapsto \hat{x} |\psi\rangle. \quad (1.58)$$

Mit unserer Bra-Ket Notation ist jetzt klar, dass

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx (\psi(x))^* (x\psi(x)) = \int dx \psi^*(x) x \psi(x) \quad (1.59)$$

gilt, wie eingangs behauptet.

Ab sofort werden wir versuchen, die in (1.55) benutzte Schreibweise $\langle x \rangle$ für den Erwartungswert einer physikalischen, reellen Variablen zu vermeiden. Unsere neue Denk- und Sprechweise wird sein:

Der **Observablen** ‘**Ort**’ wird in der Quantenmechanik ein gewisser linearer Operator auf \mathcal{H} zugeordnet. Der Erwartungswert der Ortsmessung ist durch

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle \quad (1.60)$$

gegeben. Der erste Ausdruck ist hierbei wiederum ungenau und sollte vermieden werden. Im zweiten Ausdruck wird durch den Index klargemacht, in welchem Zustand der Erwartungswert berechnet werden soll. Der rechts stehende Ausdruck ist schliesslich bereits eine eindeutige Rechenvorschrift. (Dazu müssen wir natürlich wissen, was die Bra-Ket-Notation bedeutet und wie das Skalarprodukt auf \mathcal{H} definiert ist.)

Der Übergang zum \mathbb{R}^3 macht keine Probleme:

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int d^3x \psi^*(\bar{x}) \bar{x} \psi(\bar{x}). \quad (1.61)$$

Wir müssen uns nur stets im Klaren sein, dass wir es hier mit drei unabhängigen Operatoren (Multiplikation mit x^1 , mit x^2 und mit x^3) und demnach mit drei Gleichungen zu tun haben.

Den Operator zur **Observable Impuls** kenne wir schon:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla. \quad (1.62)$$

Wir hoffen jetzt natürlich, dass

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle, \quad (1.63)$$

wenn wir für $|\psi\rangle$ eine ebene Welle mit Wellenvektor \bar{k} nehmen, gerade $\hbar\bar{k}$ sein wird. Aber dies ist leider nicht so einfach, weil eine ebene Welle nicht normierbar ist (das Integral von $\psi^*\psi$ über den ganze Raum divergiert). Die Komplikation ist jedoch gering, da wir auch gut mit einem Wellenpaket arbeiten können:

$$\psi(\bar{x}) = \int d^3k f(\bar{k}) e^{i\bar{k}\bar{x}}. \quad (1.64)$$

Hier sei f eine im Unendlichen schnelle abfallende Funktion mit scharfem Maximum bei \bar{k}_0 sei.

Wir überzeugen uns zunächst, dass ψ normierbar ist:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3x \psi^*(\bar{x}) \psi(\bar{x}) \quad (1.65)$$

$$= \int d^3x \int d^3k f^*(\bar{k}) e^{-i\bar{k}\bar{x}} \int d^3q f(\bar{q}) e^{i\bar{q}\bar{x}} \quad (1.66)$$

$$= \int d^3k \int d^3q f^*(\bar{k}) f(\bar{q}) \int d^3x e^{i(\bar{q}-\bar{k})\bar{x}} \quad (1.67)$$

$$= \int d^3k \int d^3q f^*(\bar{k}) f(\bar{q}) (2\pi)^3 \delta^3(\bar{q}-\bar{k}) \quad (1.68)$$

$$= (2\pi)^3 \int d^3k |f(\bar{k})|^2. \quad (1.69)$$

Dies kann, wenn f passend gewählt ist, offensichtlich normiert auf Eins normiert werden. Wir nehmen ab sofort an, dass dies geschehen ist.

Nun wiederholen wir die Rechnung für $\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$. Dies ist aber äußerst einfach, da $-i\hbar\nabla$ bei der Wirkung auf die Exponential-Funktion schlicht einen Faktor $-i\hbar(i\bar{q}) = \hbar\bar{q}$ erzeugt. Nach der δ -Funktions-Integration finden wir also

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = (2\pi)^3 \int d^3k \hbar\bar{k} |f(\bar{k})|^2 \simeq \hbar\bar{k}_0 (2\pi)^3 \int d^3k |f(\bar{k})|^2 = \hbar\bar{k}_0. \quad (1.70)$$

Hier haben wir im zweiten Schritt benutzt, dass $|f(\bar{k})|^2$ nur in der Nähe von \bar{k}_0 signifikant von Null verschieden ist. Das hat uns erlaubt, \bar{k} durch \bar{k}_0 zu ersetzen. Im letzten Schritt haben wir von der angenommenen Normierung Gebrauch gemacht.

Damit haben wir also bestätigt, dass $-i\hbar\nabla$ zur physikalischen Observablen Impuls gehört. Wie am Anfang schon erwähnt, ist damit auch klar, dass

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (1.71)$$

also der Hamilton-Operator, zur Observablen Energie gehört. Die Wirkung von $V(\bar{x})$ ist, wie schon bei x^1 , x^2 und x^3 , schlicht die Multiplikation mit der reellen Funktion $V(\bar{x})$.

2 Das 2-Zustands-System und andere endlich-dimensionale Modelle

Mit dem ersten Kapitel sind wir aus mathematischer Sicht ohne jede Vorbereitung ins kalte Wasser gesprungen: Der von uns als physikalisch interessant erkannte Raum von Funktionen $\psi(x)$ ist (selbst im eindimensionalen Fall) kompliziert. Das gilt auch für seine verschiedenen Unterräume (z.B. der normierbaren Funktionen). Wir haben dennoch so angefangen, weil unsere Intuition für die klassische Bewegung eines Teilchens in einer Dimension besonders gut entwickelt ist. Demnach ist der fundamentale Schritt von der klassischen Position x und dem Impuls p zur Wellenfunktion $\psi(x)$ (und damit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\psi(x)|^2$) besonders beeindruckend. Aber die Observablen (die Operatoren \hat{x} and $\hat{p} = -i\hbar\nabla$) sowie die durch \hat{H} definierte Dynamik sind sicherlich noch sehr unintuitiv. Bevor uns dem weiter zuwenden (und das werden wir in großem Detail tun!), wollen wir ein anderes System einführen. Der Vorteil ist seine enorme Einfachheit, der Nachteil ist, dass es kein klassisches Pendant hat. Wir werden es benutzen, um die Intuition für Hilbert-Räume, Operatoren, die Schrödinger-Gleichung und den Messprozess in der Quantenmechanik zu entwickeln.

2.1 2- und mehr-Zustands-Systeme

Wir betrachten ein physikalische System, welches nur zwei linear unabhängige³ Zustände hat. Ein Art, sich so etwas vorzustellen, ist unser ‘diskretisierter’ eindimensionaler Raum aus Abschnitt 1.6:

$$\psi = \{\psi_1, \psi_2\}^T \in \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2. \quad (2.1)$$

Ein Vorschlag zur Anschauung wäre vielleicht auch, an ein Teilchen in einer Doppelmulde (Abb. 4) zu denken, wobei wir nur die Information behalten, in welcher der beiden Mulden es ist (nicht, ob es dort ruht, oszilliert etc.).

Das populärste und praktisch interessanteste solche System ist jedoch das eines Teilchens mit Spin. Das Problem ist hier, dass Spin ein relativ kompliziertes Konzept ist und erst spät

³Warum dieser mathematische Begriff hier auftaucht wird sehr bald klar werden.

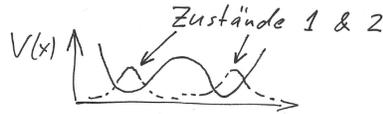


Abbildung 4: Doppelmulde als Modell für ein 2-Zustands-System. Der Hilbert-Raum besteht hier nur aus Linearkombinationen der zwei gestrichelt skizzierten Funktionen.

in unserer Vorlesung überzeugend eingeführt werden kann. Wir wollen den Begriff dennoch hier schon benutzen. Wir machen dabei mathematisch keinen Fehler - es ist nur etwas ad hoc.

Also: Gewisse Teilchen haben einen inneren Freiheitsgrad, der nichttrivial unter räumlichen Drehungen transformiert. Sie kennen schon die zwei Polarisierungen des Photons. Dies ist natürlich für uns nicht optimal, weil es keinen nichtrelativistischen Limes gibt. Die Rotation eines kleinen Balls um eine gewisse Achse ist sehr anschaulich, aber hier nicht perfekt, da der Ball verschieden schnell rotieren und die Drehachse in verschiedene Richtungen zeigen kann. Dieser Fall ist schlicht 'zu klassisch'. Das eigentlich gute Beispiel ist ein neutrales Teilchen, z.B. Atom (mit Spin 1/2 - aber das können Sie jetzt noch nicht verstehen). Wir wollen die vertikale Achse auszeichnen und nur den Drehimpuls (Spin) entlang dieser Achse betrachten. Der angekündigte ad hoc Fakt ist, dass dieses System für Spin-1/2-Teilchen nur zwei linear unabhängige Zustände hat. Wir nennen diese 'Spin Up' und 'Spin Down', so dass

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.2)$$

der allgemeine Zustand ist. Wir können diesen Raum natürlich mit \mathbb{C}^2 identifizieren:

$$\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \quad \leftrightarrow \quad \{\alpha, \beta\}^T \in \mathbb{C}^2. \quad (2.3)$$

Wir können uns noch mehr dieser sogenannten 2-Zustands-System überlegen, aber sie sind alle äquivalent. Mathematisch liegt das daran, dass alle N -dimensionalen komplexen Vektorräume isomorph sind (für fest gewähltes N). Die im Hamilton-Operator \hat{H} kodierte Dynamik kann natürlich sehr verschieden sein. Im ersten Fall kann dies das 'Tunneln' von einer Mulde zur anderen, im zweiten die Beeinflussung des Teilchens durch Magnetfelder etc. sein. (Rufen Sie sich das vermutlich aus der Experimentalphysik bekannte Stern-Gerlach-Experiment ins Gedächtnis, aber sehen sie von den vielen nichttrivialen technischen Details ab.)

Der Übergang zu Mehr-Zustands-Systemen ist offensichtlich: Es gäbe z.B. drei (wie auch immer geartete) linear unabhängige Zustände, $|1\rangle$, $|2\rangle$, und $|3\rangle$. Dann sind die abstrakte und die \mathbb{C}^3 -Beschreibung des allgemeinen Zustands

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle + \gamma|3\rangle \quad \leftrightarrow \quad \{\alpha, \beta, \gamma\}^T \in \mathbb{C}^3. \quad (2.4)$$

Schließlich sei noch angemerkt, dass mit einer für viele Zwecke ausreichenden Präzision das kompliziertere System eines Teilchens im Ortsraum in unserem Satz von Modellen enthalten ist: Man denke sich den Ortsraum einfach sehr groß aber endlich (z.B. mit hohen Potentialbarrieren am Rand oder $x \in S^1$) und sehr fein diskretisiert. Dann ist zwar obiges n sehr groß, aber es bleibt prinzipiell bei dem Zustandsraum \mathbb{C}^n .

2.2 Endlichdimensionale komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt

Man könnte auch endlichdimensionale Hilberträume sagen, aber ich wollte zumindest in der Überschrift vorsichtig sein, weil manche Autoren mit Hilbertraum immer etwas unendlichdimensionales (z.B. einen Funktionen-Raum) meinen. Im Folgenden werde ich den Begriff Hilbertraum aber, wie in der Physik üblich, auch im endlichdimensionalen Fall benutzen.

Ziel dieses Kapitels soll es sein, einige (meist schon gut bekannte) Begriffe und Fakten zusammenzustellen.

Der erste Begriff ist der des **Vektorraums** \mathbb{V} . Der relevante Körper ist für uns in der Quantenmechanik immer \mathbb{C} . Die Axiome werde ich nicht wiederholen - bitte schlagen Sie diese nach. Was eine **Basis** ist, sollte auch bekannt sein. Der Vektorraum heißt **endlichdimensional**, wenn es eine endliche Basis gibt. Die Zahl der Basis-Elemente heißt Dimension von \mathbb{V} . Dies macht natürlich nur Sinn, weil jede Basis die gleiche Zahl von Elementen hat. Jedes \mathbb{V} der Dimension N ist zu \mathbb{C}^N isomorph. Wie man dies mittels Zerlegung in die Basis zeigt, wurde oben schon gesagt.

Die quantenmechanische Interpretation erfordert ein positiv definites Skalarprodukt. Wenn dieses vorliegt, wollen wir von \mathcal{H} (für Hilbertraum) sprechen. Das Skalarprodukt ist eine Abbildung

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \{\psi, \chi\} \mapsto \langle \psi | \chi \rangle, \quad (2.5)$$

welche im ersten Argument antilinear und im zweiten linear (siehe oben) und **hermitisch** ist:

$$\langle \psi | \chi \rangle^* = \langle \chi | \psi \rangle. \quad (2.6)$$

Letzteres impliziert, dass $\langle \psi | \psi \rangle$ reell ist. Positiv definit heißt, dass

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad \text{und} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = \mathbf{0}. \quad (2.7)$$

Wir erinnern daran, dass die Null in einem Vektorraum eindeutig ist.

Dies sind genau die Eigenschaften, die wir in der Quantenmechanik brauchen werden, so dass wir jetzt definieren: **Ein endlichdimensionaler Hilbertraum⁴ ist ein Vektorraum über \mathbb{C} mit positiv definitem Skalarprodukt.**

Es gibt in solchen Räumen Orthonormalbasen. (Mittels Gram-Schmidt-Verfahren kann man aus einer gegebenen Basis eine Orthonormalbasis konstruieren.) Eine solche Basis erfüllt

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.8)$$

Man prüft leicht nach, dass für eine orthonormale Basis und mit

$$|\psi\rangle = \psi^i |e_i\rangle \quad \text{etc.} \quad (2.9)$$

das Skalarprodukt ausgedrückt durch die Komponenten dem kanonischen Skalarprodukt auf \mathbb{C}^N entspricht:

$$\langle \psi | \chi \rangle = \psi^{*i} \chi^j \delta_{ij} = \bar{\psi}^* \cdot \bar{\chi}. \quad (2.10)$$

⁴Wie schon erwähnt, manche Autoren reservieren den Begriff Hilbertraum ausschließlich für unendlichdimensionale Räume. In der Physik ist unsere Definition und Sprechweise aber sehr verbreitet.

Wie schon erwähnt, ist es bequem, auch die Notation

$$\langle \psi | \in \mathcal{H}^* \quad (2.11)$$

zu benutzen. Der Dualraum \mathcal{H}^* ist der Raum der Linearen Funktionale auf \mathcal{H} . Das Objekt $\langle \chi |$ definiert eine solche Abbildung durch

$$\langle \psi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\chi\rangle \mapsto \langle \psi | \chi \rangle. \quad (2.12)$$

Es ist also per Definition Element des Dualraums. Wie auch im Reellen ist es bequem, den Dualraum im Fall von \mathbb{C}^N (mit kanonischem Skalarprodukt) mit den Zeilenvektoren zu identifizieren.

Wir sollten vielleicht noch bemerken, dass es zwar zu jedem endlichdimensionalen Vektorraum einen Dualraum von gleicher Dimension gibt, aber es gibt im Allgemeinen keine kanonische Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$. Wenn es allerdings ein Skalarprodukt gibt, dann gibt es auch eine solche kanonische Abbildung: $|\psi\rangle \mapsto \langle \psi |$.

Ein nützlicher Fakt ist die **Schwarzsche Ungleichung**:

$$|\langle \psi | \chi \rangle| \leq \|\psi\| \|\chi\|. \quad (2.13)$$

Sie besagt etwas, was für reelle Vektoren anschaulich völlig klar ist: Der Betrag des Skalarproduktes ist kleiner oder gleich dem Produkt der Beträge der Vektoren. Der allgemeine Beweis beruht auf einer sehr einfachen Idee, aufbauend auf der Erfahrung mit reellen Vektoren: Die Ungleichung gilt, weil die Vektoren i.A. nicht parallel sind. Ein Maß dafür ist, dass z.B. die Projektion von $|\psi\rangle$ auf die $|\chi\rangle$ -Richtung nicht mit $|\psi\rangle$ übereinstimmt. Also schreiben wir die Differenz zwischen $|\psi\rangle$ und dieser Projektion hin,

$$|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle \langle \chi | \psi \rangle}{\|\chi\| \|\chi\|}, \quad (2.14)$$

und analysieren die (natürlich korrekte!) Aussage, dass ihr Betragsquadrat nicht negativ ist:

$$\left(\langle \psi | - \frac{\langle \psi | \chi \rangle \langle \chi |}{\langle \chi | \chi \rangle} \right) \left(|\psi\rangle - \frac{|\chi\rangle \langle \chi | \psi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} \right) \geq 0. \quad (2.15)$$

Daraus folgt durch Ausmultiplizieren

$$\langle \psi | \psi \rangle - \frac{\langle \chi | \psi \rangle \langle \psi | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} \geq 0, \quad (2.16)$$

und daraus durch Umstellen und Wurzelziehen die Schwarzsche Ungleichung.

Ein weiterer nützlicher Fakt ist die **Dreiecksungleichung**:

$$\|\psi + \chi\| \leq \|\psi\| + \|\chi\|, \quad (2.17)$$

was wiederum völlig der reellen Anschauung entspricht. Der Beweis besteht im Ausmultiplizieren von

$$\|\psi + \chi\|^2 = \langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle, \quad (2.18)$$

dem Benutzen von

$$\langle \psi | \chi \rangle + \langle \chi | \psi \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle \psi | \chi \rangle \leq 2 |\langle \psi | \chi \rangle|, \quad (2.19)$$

und der Anwendung der Schwarzschen Ungleichung. Die Durchführung überlassen wir den Übungen.

Bitte beachten Sie, dass obige Beweise die endliche Dimension von \mathcal{H} nicht benutzt haben - die Ungleichungen gelten also auch in 'echten' Hilbert-Räumen.

Schließlich wollen wir noch an den Begriff des linearen Operators auf einem Vektorraum erinnern: Ein Operator ist eine lineare Abbildung

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle. \quad (2.20)$$

Wichtig ist, dass die Menge solcher Operatoren selbst ein Vektorraum ist (weil man Operatoren addieren und mit Zahlen multiplizieren kann). Darüberhinaus ist sie sogar eine **Algebra**, weil man Operatoren auch Multiplizieren kann und dabei wieder einen Operator bekommt. Die Multiplikation ist durch Hintereinanderausführung definiert:

$$(AB) : |\psi\rangle \mapsto A(B|\psi\rangle). \quad (2.21)$$

Es ist klar, dass die Multiplikation bzgl. der beiden Argumente linear ist, wie es nach Definition einer Algebra auch sein muss.

Operatoren können im endlichdimensionalen Fall mit Matrizen identifiziert werden. Dies ist klar, weil endlichdimensionale Vektorräume mit \mathbb{C}^N indentifiziert werden können, und lineare Operatoren auf \mathbb{C}^N Matrizen sind.

2.3 Erste Schritte zur Physik des Zwei-Zustands-Systems

Bevor wir den Formalismus weiterentwickeln, wollen erste physikalische Anwendungen besprechen. Wir werden dabei vom Spin-Up/Spin-Down System sprechen, aber jeder darf sich ein Zwei-Zustands-System seiner Wahl vorstellen - sie sind mathematisch alle gleich.

Wir erinnern an unsere Erfahrung mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ des Teilchens. Wenn x diskret wird, haben wir keine Wahrscheinlichkeitsdichte sondern einen diskreten Satz von Wahrscheinlichkeiten $|\psi_i|^2$. Im Fall von $N = 2$ ist

$$|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle, \quad w_\uparrow = |\alpha|^2, \quad w_\downarrow = |\beta|^2, \quad (2.22)$$

wobei wir die Basis als orthonormal definieren wollen ($\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$ und $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$). Die Bedingung, dass sich die Wahrscheinlichkeiten zu Eins addieren entspricht gerade der Normierung von $|\psi\rangle$.

Die naheliegende Messgröße oder Observable ist natürlich der Spin. Sagen wir, wir messen $+1/2$ falls der Zustand $|\uparrow\rangle$ vorliegt und $-1/2$ bei $|\downarrow\rangle$. Welchen Operator S könnten wir wählen, so dass $\langle \psi | S | \psi \rangle$, wie im Wellenfunktions-Fall, den richtigen Erwartungswert reproduziert? Die Wahl ist sehr naheliegend: Wir benutzen die Komponenten-Schreibweise

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

und definieren

$$S = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Man rechnet sofort nach, dass

$$\langle \psi | S | \psi \rangle = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 = \frac{1}{2}w_{\uparrow} - \frac{1}{2}w_{\downarrow} \quad (2.25)$$

ist. Der letzte Ausdruck beschreibt, wie gefordert, den Erwartungswert einer Spin-Messung bei der mit der Wahrscheinlichkeit w_{\uparrow} der Wert $1/2$ und mit der Wahrscheinlichkeit w_{\downarrow} der Wert $-1/2$ gefunden wird. Also ist S der zum Spin gehörige Operator und wir haben ein weiteres, sehr einfaches Beispiel für die **wichtige Grundregel**, dass der Operator ‘zwischen Bra und Ket eines Zustands $|\psi\rangle$ den Erwartungswert der Messung in diesem Zustand liefert.

Wichtig ist auch, wie der Zustand nach der Messung aussieht. Im ursprünglichen Beispiel eines Teilchens ist uns klar, dass das Teilchen unmittelbar nach der Detektion an dem Ort ist, wo es detektiert wurde (z.B. in dem Szintillator, der einen Lichtblitz abgestrahlt hat). Aus der Wellenfunktion $\psi(x)$ ist also (wenn wir vom Normierungsproblem absehen) so etwas wie $\delta(x-x_0)$ geworden, wobei x_0 den Ort des betreffenden Szintillators bezeichnet.

Hier heißt dies, dass nach der Spin-Messung im Fall des Ergebnisses $+1/2$ anschließend **mit Sicherheit** der Zustand $|\uparrow\rangle$ vorliegt, im Fall von $-1/2$ **mit Sicherheit** $|\downarrow\rangle$. Wir lernen also: **In der Quantenmechanik beeinflusst der Messprozess zwingenderweise das System.** Genauer gesagt, die Messung entspricht einer **Projektion auf den zum Messwert gehörenden Eigenvektor des relevanten Operators.**

Letzteres Bedarf der Erläuterung: Ein Operator A hat einen Eigenvektor $|a\rangle$ zum Eigenwert a falls

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (2.26)$$

gilt. Demnach hat also S zwei Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\pm 1/2$:

$$S|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \quad S|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle. \quad (2.27)$$

Vor der Messung haben wir $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$, nach der Messung entweder $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$.

Dies wird noch klarer, wenn wir den Begriff des Projektionsoperators oder Projektors einführen: Ein Operator P heißt Projektor, falls $P^2 = P$ gilt. Ein einfaches Beispiel ist der auf reelle 3-Vektoren wirkende Operator

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

welcher offensichtlich auf die x - y -Ebene projiziert. Die Bedingung $P^2 = P$ sagt aus, dass nochmaliges Projizieren nichts mehr ändert: Der Vektor ist schon in der x - y -Ebene und bleibt dann unverändert.

Wir können nun S als Linearkombination der Projektoren auf den Up- und den Down-Zustand schreiben:

$$S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}P_{\uparrow} - \frac{1}{2}P_{\downarrow}. \quad (2.29)$$

So eine Zerlegung gibt es für jede Observable (ggf. natürlich mit mehr Projektoren - einer für jedes mögliche Messergebnis bzw. jeden Eigenwert. Eine Messung mit Resultat $\pm 1/2$ beeinflusst die $|\psi\rangle$ so, wie die Wirkung von P_\uparrow bzw. P_\downarrow . Dabei ist natürlich zu beachten, dass man anschließend neu normieren muss, weil sich durch das Nullsetzen z.B. des Down-Anteils die Norm verändert hat:

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \quad \rightarrow \text{Messung mit Ausgang } +1/2 \rightarrow \quad \alpha|\uparrow\rangle \quad (2.30)$$

$$\rightarrow \text{Normierung} \rightarrow \quad |\uparrow\rangle. \quad (2.31)$$

Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom **Kollaps der Wellenfunktion** (auf die Komponente, die dem Messergebnis entspricht). Es ist hierin, im Gegensatz zu dem, was gelegentlich gesagt wird, nichts mysteriöses: Der Messprozess beinhaltet selbst eine oft sehr nichttriviale Dynamik, von der man abstrahiert, und stattdessen mit den sehr viel einfacheren Projektionsoperatoren arbeitet. Das Neu-Normieren wird erforderlich, weil wir durch Kenntnis des Messergebnisses den Anteil $|\beta|^2$ der Gesamtwahrscheinlichkeit eliminiert haben. Was übrigbleibt, muss jetzt wieder auf Wahrscheinlichkeit Eins normiert werden.⁵

Erwähnenswert ist noch eine sehr naheliegende andere Schreibweise für Projektoren auf einen bestimmten, auf Eins normierten Vektor:

$$P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.32)$$

Machen wir uns zunächst klar, wie P_ψ als Operator aufzufassen ist:

$$P_\psi : |\chi\rangle \mapsto |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle. \quad (2.33)$$

Prüfen wir, dass P_ψ ein Projektor ist:

$$P_\psi^2|\chi\rangle = P_\psi(|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle) = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = P_\psi|\chi\rangle. \quad (2.34)$$

Diese Vorarbeiten erlauben uns eine sehr schöne und intuitive Darstellung für eine Observable im Fall, dass ihre Eigenvektoren und Eigenwerte bekannt sind:

$$S = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|. \quad (2.35)$$

Benutzen Sie diese Schreibweise, um $\langle\psi|S|\psi\rangle$ zu berechnen - das ist ausgesprochen bequem!

Betrachten wir nun gleich noch eine weitere Observable, den Energie- oder Hamilton-Operator. Wir haben bisher die Dynamik unseres Systems noch nicht spezifiziert - wir haben alle Freiheit und wollen diese jetzt nutzen: Wir **wählen** den Hamilton-Operator

$$H = \begin{pmatrix} E_\uparrow & 0 \\ 0 & E_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Mit anderen Worten, wir legen fest, dass der Spin-Up- und dem Spin-Down-Zustand jeweils gewisse, feste Energien haben, die verschieden sein können. (Technisch realisiert man das z.B.

⁵Wer zurecht trotzdem etwas unzufrieden ist, weil er gerne in ein und derselben Analyse sehen würde, was mit dem $|\downarrow\rangle$ -Anteil der Wellenfunktion passiert, der muss sich gedulden. Wir kommen dazu, wenn wir später genauer über Messprozess, Dekohärenz, sowie über die verschiedenen sogenannten 'Interpretationen' der QM sprechen.

durch ein passendes Magnetfeld.) Es sollte klar sein, dass man H mit den gleichen Projektionsoperatoren schreiben kann wie S . Nur die zugehörigen Eigenwerte sind andere.

Wir können nun die Schrödinger-Gleichung,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (2.37)$$

sofort lösen, indem wir den völlig allgemeinen Ansatz

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|\uparrow\rangle + \beta(t)|\downarrow\rangle \quad (2.38)$$

machen. (Wir haben in der Schrödinger-Gleichung keine partielle Ableitung geschrieben, da hier t die einzige Variable ist. Ebenso verzichten wir auf das 'hat'-Symbol, wenn es außer Frage steht, dass H ein Operator ist.)

Es folgt

$$i\hbar(\dot{\alpha}|\uparrow\rangle + \dot{\beta}|\downarrow\rangle) = E_{\uparrow}\alpha|\uparrow\rangle + E_{\downarrow}\beta|\downarrow\rangle. \quad (2.39)$$

bzw. wegen der linearen Unabhängigkeit der beiden Basis-Vektoren

$$i\hbar\dot{\alpha} = E_{\uparrow}\alpha \quad \text{und} \quad i\hbar\dot{\beta} = E_{\downarrow}\beta. \quad (2.40)$$

Die Lösungen sind natürlich Exponential-Funktionen, die Exponenten liest man ohne Mühe ab. Wir fassen gleich beide Lösungen zusammen:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(0)e^{-iE_{\uparrow}t/\hbar}|\uparrow\rangle + \beta(0)e^{-iE_{\downarrow}t/\hbar}|\downarrow\rangle. \quad (2.41)$$

Dabei erkennen wir unser grundlegendes Postulat $E = \hbar\omega$ bzw. $\omega = E/\hbar$ wieder. Wir sehen, dass jeder der beiden Energie-Eigenzustände nur seine Phase verändert. Die Phase rotiert um so schneller, je größer die Energie ist. Mehr passiert nicht - insbesondere bleiben die durch $|\alpha|^2$ und $|\beta|^2$ gegebenen Wahrscheinlichkeiten für jeden der beiden Anteile gleich. Noch eindringlicher: Wenn man mit einem bestimmten Energie-Eigenzustand (z.B. $|\uparrow\rangle$) startet, dann bleibt dieser in der Zeitentwicklung erhalten. Nur seine Phase rotiert.

Die Übertragung auf einen N -dimensionalen Hilbert-Raum ist offensichtlich, so lange wir eine Basis $\{|i\rangle\}$ von Eigenvektoren von H kennen:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(0) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle, \quad \text{wobei} \quad H|i\rangle = E_i|i\rangle. \quad (2.42)$$

Die Quantendynamik ist in diesem Sinne von erstaunlicher Einfachheit - nur die Phasen der Energie-Eigenvektoren drehen sich. Die Schwierigkeit wird darin bestehen, eine solche Basis zu finden und einen gegebenen Anfangs-Vektor in diese zu zerlegen.

2.4 Adjungierte und Hermitesche Operatoren

Es ist jetzt Zeit, wieder einiges von dem gelernten zu formalisieren. In diesem Abschnitt ist wichtig, dass \mathcal{H} endlichdimensional ist. Sonst wären zentrale Aspekte von dem, was jetzt folgt, wesentlich komplizierter.

Betrachten wir einen linearen Operator $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, wobei \mathcal{H} ein Hilbertraum ist. Wir definieren den zu A **adjungierten Operator** A^\dagger durch

$$\langle A^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \psi | A \chi \rangle. \quad (2.43)$$

Hier benutzen wir die Bra-Ket-Notation nur zur Darstellung des Skalarproduktes. Wir meinen also links das Produkt von $A^\dagger |\psi\rangle$ mit $|\chi\rangle$ und rechts das Produkt von $|\psi\rangle$ mit $A|\chi\rangle$.

Nochmal in Worten: Zu jedem A gibt es eine Operator A^\dagger , so dass die Wirkung von A auf den rechten Vektor im Skalarprodukt ersetzt werden kann durch die Wirkung von A^\dagger auf den linken Vektor im Skalarprodukt.

Überzeugen wir uns zunächst, dass (2.43) tatsächlich einen Operator A^\dagger auf \mathcal{H} definiert: Die rechte Seite (2.43) definiert offensichtlich ein lineares Funktional auf Vektoren $|\chi\rangle$. Also definiert sie ein Element von \mathcal{H}^* . Da nun aber \mathcal{H}^* zu \mathcal{H} auf eine kanonische Weise isomorph ist, definiert sie einen Vektor $A^\dagger |\psi\rangle$.

Eine äquivalente Art, den adjungierten Operator zu definieren, ist die folgende: Wir definieren zunächst eine Wirkung von beliebigen Operatoren auf Bra-Vektoren von rechts:

$$A : \mathcal{H}^* \rightarrow \mathcal{H}^* , \quad \langle \psi | \mapsto \langle \psi | A. \quad (2.44)$$

Dabei ist $\langle \psi | A \in \mathcal{H}^*$ durch

$$\langle \psi | A : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} , \quad |\chi\rangle \mapsto \langle \psi | A \chi \rangle \quad (2.45)$$

definiert. Dies ermöglicht uns, Skalarprodukte mit Operatoren beliebig zu klammern:

$$\langle \psi | A | \chi \rangle \equiv \langle \psi | (A | \chi \rangle) \equiv (\langle \psi | A) | \chi \rangle. \quad (2.46)$$

Wir definieren nun A^\dagger als den Operator, welcher folgende Aussage wahr macht:

$$A | \psi \rangle = | \chi \rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle \psi | A^\dagger = \langle \chi |. \quad (2.47)$$

In Worten: Die Wirkung mit A von links auf \mathcal{H} entspricht der Wirkung mit A^\dagger von rechts auf \mathcal{H}^* (gegeben unseren kanonischen Isomorphismus).

Jetzt übersetzen wir das ganze in Matrix-Sprache, wobei wir eine Orthonormalbasis $|e_i\rangle \equiv |i\rangle$ benutzen. Dazu erinnern wir zunächst daran, wie man einen Vektor $|\psi\rangle$ in diese Basis zerlegt:

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle. \quad (2.48)$$

Wir behaupten, dass man die so definierten Komponenten gemäß

$$\psi_i = \langle i | \psi \rangle \quad (2.49)$$

berechnen kann. Dazu müssen wir z.B. nachrechnen, dass (2.48) aus (2.49) folgt. Dazu wiederum genügt es, (2.48) für die Projektion auf jedes Element der dualen Basis zu prüfen:

$$\text{Links: } \langle j | \psi \rangle \quad \text{Rechts: } \langle j | \sum_i \psi_i |i\rangle = \sum_i \psi_i \delta_{ij} = \psi_j = \langle j | \psi \rangle, \quad (2.50)$$

was zu beweisen war.

Damit entspricht jeder Operator A der Matrix

$$A_{ij} = \langle i|A|j\rangle. \quad (2.51)$$

Um das zu zeigen, bestimmen wir die Komponenten von $A|\psi\rangle$:

$$\langle i|A|\psi\rangle = \langle i|A \sum_j |j\rangle\psi_j = \sum_j A_{ij}\psi_j. \quad (2.52)$$

Der letzte Ausdruck beschreibt nun aber gerade die Matrixmultiplikation von A_{ij} mit dem Spaltenvektor $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}^T$.

Jetzt werten wir (2.43) für Basiselemente, $|\psi\rangle = |l\rangle$ und $|\chi\rangle = |k\rangle$, aus. Es gilt zunächst

$$A^\dagger|\psi\rangle = (A^\dagger)_{ij}\psi_j|i\rangle = (A^\dagger)_{ij}\delta_{kj}|i\rangle = (A^\dagger)_{ik}|i\rangle. \quad (2.53)$$

Wir haben oben zur Abkürzung die Einsteinschen Summenkonvention benutzt und werden dies auch weiterhin tun. Die linke Seite von (2.43) lautet damit

$$((A^\dagger)_{ik})^* \langle i|l\rangle = (A^\dagger)_{ik}^*. \quad (2.54)$$

Die rechte Seite ist einfach

$$\langle k|A|l\rangle = A_{kl}. \quad (2.55)$$

Wir sehen, dass die Matrizen zu A und A^\dagger durch vertauschen der Indizes und komplexe Konjugation ineinander übergehen, also

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*. \quad (2.56)$$

Wenn wir gleichzeitig mit Matrizen und Operatoren arbeiten wollen, dann ist es bequem, die Operatoren mit einem ‘Hut’ zu versehen und die zugehörige Matrix durch das gleiche Symbol ohne Hut zu bezeichnen.

Es gilt dann: Wenn \hat{A}^\dagger der zu \hat{A} **adjungierte Operator** ist, so erfüllen die zugehörigen Matrizen

$$A^\dagger = (A^T)^* = (A^*)^T. \quad (2.57)$$

Man sagt auch, dass A^\dagger die zu A **adjungierte** (oder **hermitesch konjugierte** oder auch **hermitesch transponierte** Matrix ist. Wir werden in Zukunft das Symbol \dagger sowohl für den abstrakten adjungierten Operator als auch für die adjungierte Matrix benutzen. Die Äquivalenz des Adjungierens zum Adjungieren von Matrizen impliziert natürlich sofort $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.

Auch (2.47) impliziert, dass die Matrix zum adjungierten Operator schlicht die hermitesch transponierte Matrix ist. Prüfen Sie dies selbst nach, indem Sie wie oben eine Orthonormalbasis benutzen.

Ein Operator A auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum heißt **hermitesch**, wenn

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (2.58)$$

gilt. Er entspricht damit einer **hermiteschen Matrix**, also einer Matrix, welche

$$(A^*)^T = A \quad (2.59)$$

erfüllt. Solche Operatoren werden für uns im Folgenden eine zentrale Rolle spielen, weil für **hermitesche Operatoren** stets **reelle Erwartungswerte** haben. Unsere **Observablen** werden also stets aus dieser Operatorklasse kommen.

Bevor wir die Realität der Erwartungswerte beweisen, wollen wir einen anderen sehr nützlichen Fakt herleiten:

$$\langle \chi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \chi \rangle. \quad (2.60)$$

Dazu benutzen wir die zweite Definition des adjungierten Operators, also die beiden Gleichungen (2.47), und multiplizieren jeweils mit $\langle \rho |$ bzw. $|\rho\rangle$. Es folgt

$$\langle \rho | A | \psi \rangle = \langle \rho | \chi \rangle \quad \text{und} \quad \langle \psi | A^\dagger | \rho \rangle = \langle \chi | \rho \rangle. \quad (2.61)$$

Da die rechten Seiten zueinander komplex konjugiert sind, gilt dies auch für die linken Seiten, also

$$\langle \rho | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \rho \rangle. \quad (2.62)$$

Nach Umbenennung $\rho \leftrightarrow \chi$ ist dies gerade die gewünschte Aussage aus Gl. (2.60).

Wenn nun A hermitesch und $|\psi\rangle = |\chi\rangle$ ist, so folgt

$$\langle \psi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \psi \rangle. \quad (2.63)$$

Die ist aber gerade die Behauptung, dass hermitesche Operatoren reelle Erwartungswerte (und damit natürlich auch reelle Eigenwerte) haben.

Die obige Rechnung wird besonders anschaulich, wenn man mit Matrizen arbeitet. Dazu seien jetzt ψ und χ (ohne Bra bzw. Ket) Spalten-Vektoren. Außerdem wollen wir stets (für beliebige $(n \times m)$ Matrizen) die notation $M^{*T} \equiv M^\dagger$ benutzen. Es gilt dann

$$\langle \psi | A | \chi \rangle^* = (\psi^\dagger A \chi)^* = (\psi^\dagger A \chi)^\dagger = \chi^\dagger A^\dagger \psi = \langle \chi | A^\dagger | \psi \rangle, \quad (2.64)$$

wie schon in (2.62) gezeigt.

2.5 Eigenwerte, Diagonalisierbarkeit, unitäre Operatoren

Wir waren im letzten Abschnitt sehr ausführlich, obwohl ein Großteil des gesagten natürlich schon aus der Linearen Algebra bzw. Theorie I/II bekannt sein sollte. Wichtig war für uns die Gewöhnung an die Bra-Ket-Schreibweise. Wenn man den Übergang zwischen dieser abstrakten Notation und gewöhnlichen komplexen Matrizen bzw. Vektoren einmal gewohnt ist, kann man sich mehr und mehr schlicht auf elementare Algebra berufen. Das wollen wir im Folgenden auch tun.

Wir erinnern uns: $|\psi\rangle$ heißt Eigenvektor zu \hat{A} zum Eigenwert λ , falls

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad \text{bzw.} \quad A_{ij}\psi_j = \lambda\psi_i \quad (2.65)$$

gilt.⁶ Beliebige Operatoren können Eigenwerte und Eigenvektoren haben. Einen Eigenvektor findet man immer, wie gleich klar werden wird. Für uns entscheidend ist, dass **hermitesche**

⁶Wir haben den Eigenwert hier nicht, wie sonst üblich, mit ψ bezeichnet, weil wir dieses Symbol auch schon für den \mathbb{C}^N -Vektor und dessen Elemente verwenden.

Operatoren stets eine Basis aus Eigenvektoren haben, in der sie demnach als Matrix diagonal sind. Der Übergang zu dieser Basis wird durch eine unitäre Transformation bzw. unitäre Matrix realisiert.

Die Herleitung obiger Aussage war Gegenstand des Kapitels 3.3 der Theorie II (und ist vermutlich noch besser aus der linearen Algebra bekannt). Wir erinnern deshalb nur kurz an die Beweisidee. Sei \hat{H} unser hermitescher Operator und H die entsprechende Matrix. Die Gleichung

$$\det(H - \lambda \mathbb{1}) = 0, \quad (2.66)$$

deren linke Seite man auch als charakteristisches Polynom (in der Variablen λ) bezeichnet, hat stets eine Lösung λ_1 . Die Gleichung

$$(H - \lambda_1 \mathbb{1})x = 0 \quad (2.67)$$

hat demnach stets einen Lösungs-Vektor x_1 , der dann ein Eigenvektor zu λ_1 ist. Unter Ausnutzung der Hermitizität von H zeigt man, dass das Orthogonale Komplement von x_1 durch H auf sich selbst abgebildet wird. H ist auf diesem Unterraum wieder hermitesch und wir können unser Argument wiederholen. Dann finden wir noch einen Eigenwert, Eigenvektor, usw. usf. Am Ende haben wir eine Basis von Eigenvektoren zu Eigenwerten λ_i , die wir normieren und mit

$$\{ |\lambda_i\rangle \} \quad (2.68)$$

bezeichnen wollen.

Die obige Herleitung liefert automatisch auch, dass die Eigenvektoren alle orthogonal sind. Trotzdem ist es sinnvoll, auch unabhängig davon beweisen zu können, **dass Eigenvektoren hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten stets orthogonal sind**. Man sieht dies, weil

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a_1 | O | a_2 \rangle - \langle a_1 | O | a_2 \rangle = \langle a_1 | O^\dagger | a_2 \rangle - \langle a_1 | O | a_2 \rangle = (\langle a_2 | O | a_1 \rangle)^* - \langle a_1 | O | a_2 \rangle \\ &= (\langle a_2 | a_1 \rangle a_1)^* - \langle a_1 | a_2 \rangle a_2 = a_1^* \langle a_1 | a_2 \rangle - \langle a_1 | a_2 \rangle a_2 = (a_1 - a_2) \langle a_1 | a_2 \rangle, \end{aligned} \quad (2.69)$$

so dass für $a_1 - a_2 \neq 0$ die Orthogonalität folgt.

Wir wollen nun noch über den Basiswechsel zwischen ursprünglicher Basis und Eigenvektorbasis sprechen. Dazu zerlegen wir letztere in unsere ursprüngliche Basis:

$$|\lambda_i\rangle = |j\rangle U_{ji}. \quad (2.70)$$

Es gilt

$$\delta_{ij} = \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = U_{ki}^* \langle k | l \rangle U_{lj} = U_{ki}^* U_{kj} = U_{ik}^\dagger U_{kj} = (U^\dagger U)_{ij}. \quad (2.71)$$

Dies definiert aber gerade eine **unitäre Matrix**: U ist unitär, falls

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (2.72)$$

Wir benutzen die gleiche Definition für einen **unitären Operator**:

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (2.73)$$

Wir haben gesehen, dass man eine unitären Matrix zum Wechsel zwischen Orthonormalbasen benutzen kann.

Die entscheidende Eigenschaft unitärer Operatoren ist ihre Kompatibilität mit dem Skalarprodukt:

$$\langle \hat{U}\psi | \hat{U}\chi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle. \quad (2.74)$$

Als Spezialfall gilt insbesondere: Die Anwendung eines unitären Operators läßt die Norm von Vektoren unverändert.

Wir wollen den obigen Basis-Wechsel auch noch in abstrakter Operator-Sprache formulieren. Dazu berechnen wir gemäß (2.70) die k -te Komponente von $|\lambda_i\rangle$:

$$(|\lambda_i\rangle)_k = \langle k | \lambda_i \rangle = U_{ki} = U_{kl} \delta_{li} = U_{kl} (|i\rangle)_l. \quad (2.75)$$

In Operator-Sprache impliziert dies

$$|\lambda_i\rangle = \hat{U} |i\rangle, \quad (2.76)$$

so dass wir sagen können, der Operator \hat{U} überführt unsere Ausgangs-Basis in die Eigenwert-Basis. Die Elemente von H in dieser neuen Basis sind

$$\langle \lambda_i | \hat{H} | \lambda_i \rangle = \lambda_j \delta_{ij}, \quad (2.77)$$

H ist also diagonal. Umgekehrt gilt natürlich auch: Jeder Operator, der in irgendeiner Basis diagonal mit reellen Eigenwerten ist, ist hermitesch.

Diese besondere Beziehung zwischen Hermitizität und Realität der Eigenwerte (und damit aller Erwartungswerte) gibt uns Anlass, hermiteschen Operatoren physikalisch eine ganz zentrale Rolle zuzuordnen:

Wir postulieren: Jeder physikalischen Observablen ist ein hermitescher Operator zuzuordnen – jeder hermitesche Operator definiert eine Observable.

Das Obige trifft natürlich speziell auf den Hamilton-Operator zu, welcher der Observablen Energie entspricht. Er ist also hermitesch und damit stets diagonalisierbar. Falls er nicht explizit von der Zeit abhängt (was, wie in der Mechanik, oft der Fall sein wird), so kann man also eine für alle Zeiten gültige Eigenvektorbasis finden. In dieser Basis besteht die gesamte Dynamik, wie weiter oben hergeleitet, nur in der Phasen-Rotation der Summanden, welche einen Zustand in der Eigenvektorbasis darstellen. Diese äußerst einfache Dynamik ist also fast völlig allgemein.

Zurück zur allgemeinen Observablen \hat{O} (die jetzt, wie gesagt, hermitesch ist) und einem beliebigen Zustand $|\psi\rangle$: Wie gerade beim Hamiltonian diskutiert, können wir $|\psi\rangle$ stets als

$$|\psi\rangle = \psi_i |o_i\rangle, \quad (2.78)$$

schreiben, wobei $|o_i\rangle$ die Eigenvektoren von \hat{O} zu den Eigenwerten o_i sind. Der Erwartungswert von \hat{O} ist dann

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \sum_{ij} \psi_i^* \langle o_i | \hat{O} | o_j \rangle \psi_j = \sum_i |\psi_i|^2 o_i. \quad (2.79)$$

Die Wahrscheinlichkeiten sind zu den einzelnen Messwerten o_i sind $|\psi_i|^2$. Falls man ein gewisses o_i gefunden hat, dann ist der Zustand nach der Messung der entsprechende Eigenzustand $|o_i\rangle$. Die Operation der Messung entspricht der Wirkung des Projektors

$$\hat{P}_i = |o_i\rangle \langle o_i|, \quad (2.80)$$

wobei in der obigen Formel **nicht** über i summiert wird.

Erwähnenswert ist noch der Spezialfall, dass zwei oder mehr Eigenwerte degeneriert sind. Das heißt, es gibt mehrere linear unabhängige Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert. Unsere obige Diagonalisierungsprozedur liefert dann zwar auch eine Eigenvektor-Basis, aber diese ist nicht eindeutig. Es gibt, z.B. im einfachsten Fall doppelter Degeneriertheit, einen zweidimensionalen Unterraum in welchem **jeder** Vektor ein Eigenvektor ist. Wir illustrieren das am Beispiel des Operators

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

mit $a_2 = a_3$. Beliebige unitäre Transformationen im 2-3-Unterraum werden die Diagonalform nicht ändern, da A auf diesen Unterraum als $a_2 \mathbb{1}$ wirkt.

2.6 Zeitentwicklung mit konstantem H

Jetzt wollen wir uns wieder der Physik zuwenden, noch nicht konkreten Beispiel-Systemen, sondern zunächst einem quantenmechanischen System im Allgemeinen. Die grundlegende Aufgabe in der theoretischen Physik besteht in der Berechnung der Zeitentwicklung bei gegebenen Anfangsbedingungen. In unserem Fall ist dies das Lösen der Schrödingergleichung,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle. \quad (2.82)$$

Wir haben in den letzten Kapiteln gelernt, dass man es hier im endlichdimensionalen Fall bei $|\psi(t)\rangle$ schlicht mit einem zeitabhängigen komplexen Vektor und bei H mit einer hermiteschen Matrix zu tun hat. Den unendlichdimensionalen Fall (z.B. Funktionen $\psi(\vec{x}, t)$) wollen wir uns im Moment als durch große, endlichdimensionale Systeme genähert denken. (Mit tieferer Mathematik kann man das Folgende aber auch direkt im unendlichdimensionalen Fall begründen.)

Wir haben die obige **zeitabhängige** Schrödinger-Gleichung in (2.42) schon gelöst, wobei wir die Diagonalisierbarkeit von H angenommen hatten. Mit einer geringfügigen Änderung der Notation wiederholen wir unser Ergebnis (mit Summenkonvention):

$$|\psi(t)\rangle = \psi_i(t) |i\rangle = \psi_i(0) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle. \quad (2.83)$$

Hier sind ψ_i die Komponenten von $|\psi\rangle$ in der Eigenbasis von H und E_i die entsprechenden Eigenwerte. Da wir jetzt wissen, dass H stets diagonalisierbar ist, sind wir fertig.

Wegen der Wichtigkeit des Ergebnisses, wollen wir das Gleiche nochmal etwas anders sagen: Wir machen den Produktansatz

$$|\psi\rangle = f(t)|\chi\rangle \quad (2.84)$$

für $|\psi\rangle$, wobei $|\chi\rangle$ zeitunabhängig sei. Einsetzen in die zeitabhängige Schrödingergleichung liefert

$$i\hbar \dot{f}(t) |\chi\rangle = f(t) H|\chi\rangle. \quad (2.85)$$

Wenn nun $|\chi\rangle$ ein Eigenvektor zu H zum Eigenwert E ist, dann folgt

$$i\hbar \dot{f}(t) |\chi\rangle = f(t) E|\chi\rangle, \quad (2.86)$$

bzw.

$$i\hbar \dot{f}(t) = E f(t) \quad \text{und somit} \quad f(t) = f(0) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.87)$$

Die dabei benutzte entscheidende Aussage, dass $|\chi\rangle$ ein Eigenvektor zu H ist,

$$H|\chi\rangle = E|\chi\rangle, \quad (2.88)$$

bezeichnet man als **zeitunabhängige** Schrödingergleichung. Diese muss man lösen, um alle Eigenvektoren und Eigenwerte zu bestimmen. Die oben schon hingeschriebene allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung ist eine Superposition von Lösungen vom Typ $f(t)|\chi\rangle$.

Es ist oft nützlich, die Lösungen der Schrödingergleichung mit Hilfe des sogenannten Zeitentwicklungsoperators $U(t)$ zu beschreiben. Dazu fassen wir $|\psi(t)\rangle$ als Spaltenvektor auf,

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow \psi(t) \equiv (\psi_1(t), \psi_2(t), \dots)^T, \quad (2.89)$$

und formulieren unsere oben gefundene Lösung als

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) \quad \text{wobei} \quad U(t) = \text{diag}(e^{-iE_1t/\hbar}, e^{-iE_2t/\hbar}, \dots). \quad (2.90)$$

In der Eigenvektorbasis von H ist der Zeitentwicklungsoperator also schlicht eine Diagonalmatrix aus den Phasenfaktoren zu den einzelnen Energieeigenvektoren.

Es gilt weiterhin

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar}, \quad \text{wobei} \quad H = \text{diag}(E_1, E_2, \dots). \quad (2.91)$$

Die Exponentialfunktion eines Operators (einer Matrix) ist hier wie üblich über die Taylor-Reihe definiert. Die Richtigkeit der Aussage $U = e^{-iHt/\hbar}$ folgt, weil beim Ausmultiplizieren der Terme in der Taylor-Reihe immer erster Eigenwert auf ersten Eigenwert trifft, zweiter Eigenwert auf zweiten Eigenwert usw. Rechnen Sie das mit 2×2 - Matrizen nach, wenn es nicht offensichtlich ist.

Entscheidend ist nun, dass das, was man in einer bestimmten Basis gezeigt hat, immer auch ganz allgemein gilt. Wir haben also, jetzt ganz abstrakt mit Hilbertraum-Operatoren, die Schrödinger-Gleichung gelöst –

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \quad \text{mit} \quad U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (2.92)$$

– zumindest für Hamilton-Operatoren, die nicht explizit von der Zeit abhängen. Wichtig ist, was wir mit der Bezeichnung U schon angedeutet haben, dass die Zeitentwicklung unitär ist, $U(t)^\dagger = U(t)^{-1}$. Dies impliziert, dass sich die Norm von $|\psi\rangle$ nicht ändert und somit die Summe der Wahrscheinlichkeiten Eins bleibt. Die Unitarität einer Diagonalmatrix aus Phasenfaktoren ist offensichtlich.

2.7 Zeitentwicklung allgemein

Aber nichts spricht dagegen, auch den Fall zeitabhängiger Hamilton-Operatoren, $H = H(t)$, zuzulassen. Wir erwarten, dass es immer noch einen unitären Zeitentwicklungsoperator geben

wird. Wir bezeichnen diesen jetzt besser mit $U = U(t, t_0)$, da es uns nicht mehr freisteht, $t_0 = 0$ zu setzen. Schließlich ist die Dynamik jetzt zu jedem Zeitpunkt anders.

Wir machen also den Ansatz

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (2.93)$$

wobei $U(t, t) \equiv \mathbb{1}$ für jedes t . Wir setzen in die Schrödingergleichung ein,

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = H(t) U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (2.94)$$

und sehen, dass U die Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (2.95)$$

erfüllen muss. Unser altes Ergebnis, $e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$, löst dies, falls H zeitunabhängig ist. In diesem Fall müssen wir die Taylor-Reihe der Exponentialfunktion einfach ausschreiben und Term für Term ableiten. Die Rechnung ist völlig analog zur Rechnung mit Zahlen, weil nur der Operator H vorkommt, und der kommutiert natürlich mit sich selbst. Genau an dieser Stelle geht aber etwas schief, wenn wir $H(t)$ zulassen.

Ein Weg, sich an die Lösung heranzutasten, besteht darin, das Zeitintervall in viele kleine Abschnitte der Länge Δ zu zerlegen und anzunehmen, dass sich $H(t)$ innerhalb eines solchen Abschnitts nicht stark ändert. Dann gilt dort die alte, zeitunabhängige Dynamik und wir haben

$$U(t, t_0) \simeq e^{-iH(t-\Delta)\Delta} \dots e^{-iH(t_0+2\Delta)\Delta} e^{-iH(t_0+\Delta)\Delta} e^{-iH(t_0)\Delta}, \quad (2.96)$$

wobei wir im Moment $\hbar = 1$ setzen um Schreibarbeit zu sparen (das kann man durch passende Wahl der Einheiten stets erreichen). Falls jedes $H(t')$ mit jedem $H(t'')$ vertauscht, dürfen wir rechnen, wie mit Zahlen. Dann wäre

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &\simeq \exp\left(-iH(t-\Delta)\Delta + \dots - iH(t_0+\Delta)\Delta - iH(t_0)\Delta\right) \\ &\simeq \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt' H(t')\right). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Dies ist i.A. zwar falsch, aber der Fehler läßt sich leicht beheben, in dem wir schreiben

$$U(t, t_0) = T \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt' H(t')\right), \quad (2.98)$$

wobei T der sogenannte **Zeitordnungsoperator** ist. Dies bedeutet, dass in allem, was rechts von T steht, beliebige Produkte von $H(t_1)$, $H(t_2)$, $H(t_3)$ etc. so zu ordnen sind, dass spätere Zeiten weiter links stehen. Das entspricht genau dem, was wir hatten, bevor wir die vielen Intervall-Entwicklungen zusammengefasst haben.

Wir erklären T gleich genauer und beweisen bei der Gelegenheit auch die bisher eher geratene als hergeleitete Lösung. Dazu schreiben wir nach Taylor

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U_n \quad \text{mit} \quad U_n = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n). \quad (2.99)$$

In jedem U_n integrieren wir über einen n -dimensionalen Würfel, der durch $\{t_1, \dots, t_n\}$ parametrisiert ist. In diesem Würfel gibt es einen Unterraum, in welchem $t_1 > t_2 > \dots > t_n$ gilt. Natürlich gibt es auch andere Unterräume mit anderer Zeitordnung, z.B. $t_2 > t_1 > t_3 > t_4 > \dots > t_n$. Es gibt so viele solcher Unterräume wie Permutationen, also $n!$. Natürlich trägt aus Symmetriegründen (der Integrand ist wegen T in den Argumenten symmetrisch) jeder Unterraum gleich zu U_n bei (vgl. Fig. 5). Wir können also den Faktor $1/n!$ weglassen und uns auf den ersten Unterraum beschränken. Das ist bequem, weil in diesem Unterraum T unnötig wird – die Reihenfolge stimmt ohnehin:

$$U_n = (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n). \quad (2.100)$$

Damit haben wir die U_n und damit $U(t, t_0)$ sauber definiert. Die Darstellung von $U(t, t_0)$ als Reihe der so definierten U_n heißt **Dyson-Reihe**.

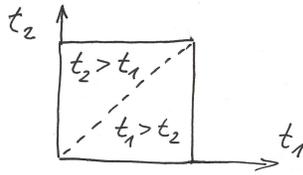


Abbildung 5: Aufteilung in des Integrationsbereichs in Teile mit verschiedener Zeitordnung im Fall $n = 2$.

Man rechnet nun mit dem Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung nach (t_1 -Integral weglassen und $t_1 = t$ setzen), dass

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} U_n &= (-i)^n \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t) H(t_2) \cdots H(t_n) \\ &= -iH(t) (-i)^{n-1} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-2}} dt_{n-1} H(t_1) \cdots H(t_{n-1}) = -iH(t) U_{n-1}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Im letzten Schritt wird benutzt, dass man die Integrationsvariablen gemäß $t_2 \rightarrow t_1, t_3 \rightarrow t_2$ etc. umbenennen darf. Damit das auch für $n = 0$ und $n = 1$ gilt, müssen wir $U_0 \equiv \mathbb{1}$ und $U_{-1} \equiv 0$ definieren.

Nunmehr berechnet man

$$\frac{d}{dt} U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} U_n = -iH(t) \sum_{n=0}^{\infty} U_{n-1} = -iH(t) \sum_{n=1}^{\infty} U_{n-1} = -iH(t) \sum_{n=0}^{\infty} U_n = -iH(t) U(t, t_0), \quad (2.102)$$

was (nach Wiedereinführung von \hbar durch $H \rightarrow H/\hbar$) genau die gewünschte Differentialgleichung ist.

2.8 Postulate der Quantenmechanik

Wir wollen das Folgende eher als Zusammenfassung des bisher Gelernten denn als ernsthaften Versuch einer Axiomatik betrachten. Wir folgen hier in etwa Schwabl, aber es gibt auch viele

andere Versionen und Formulierungen dieser Postulate oder Axiome in der Literatur. Das Ganze ist also eher eine ‘Axiomatik’ im Sinne des Physikers als des Mathematikers.

(1) Der Zustand eines physikalischen Systems ist vollständig durch einen Hilbertraumvektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ bestimmt.

(2) Jeder physikalischen Observablen ist ein hermitescher Operator A zugeordnet und umgekehrt. Die Eigenwerte sind die möglichen Messergebnisse.

(3.a) Gegeben einen Zustand $|\psi\rangle$, ist die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|\chi\rangle$ zu finden, durch

$$w(\psi, \chi) = |\langle\psi|\chi\rangle|^2 \quad (2.103)$$

gegeben (Bornsche Regel).

(3.b) Der Erwartungswert einer Messung von A ist

$$\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle. \quad (2.104)$$

Wird der Eigenwert A_i gemessen, so geht das System in den entsprechenden Eigenzustand über (Kollaps der Wellenfunktion).

(4) Die Zeitentwicklung wird durch einen unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ beschrieben. (Alternativ: Die Zeitentwicklung gehorcht der Schrödinger-Gleichung.)

Man kann sich überlegen, dass man (mit geringfügiger Umformulierung) entweder (3.a) oder (3.b) weglassen kann - sie sagen in etwa das Gleiche. Wir wollen uns mit dieser möglichen Einsparung nicht befassen. Wenn wir uns der obigen Axiome in vollem Umfang bedienen und auf die detaillierteren Erklärungen der obigen Kapitel berufen dürfen, dann sollte jetzt zumindest *im Prinzip* klar sein, was Quantenmechanik bedeutet. Aber interessant und wirklich verständlich wird das Ganze natürlich erst durch die vielen nichttrivialen Beispiele, die jetzt folgen.

3 Der harmonische Oszillator

3.1 Vorbemerkungen

Wir wollen uns zunächst dem Teilchen in einer Dimension zuwenden. Wir wissen schon, dass der Hilbertraum hier die quadratintegrierbaren Funktionen $\psi(x)$ enthält und unendlichdimensional ist. Wir ignorieren im Moment die damit einhergehenden mathematischen Schwierigkeiten und rechnen einfach drauflos. Unsere beiden entscheidenden Observablen sind wobei \hat{x} , was für Multiplikation mit x steht, und $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. Machen wir uns klar, dass diese wirklich hermitesch sind

$$\langle\psi|\hat{p}\chi\rangle = \int dx \psi(x)^* (-i\hbar d/dx)\chi(x) = \int dx \{(i\hbar d/dx)\psi(x)^*\}\chi(x) \quad (3.1)$$

$$= \int dx \{(-i\hbar d/dx)\psi(x)\}^*\chi(x) = \langle\hat{p}\psi|\chi\rangle. \quad (3.2)$$

Hier haben wir im zweiten Schritt partiell integriert. Wenn wir uns an die Definition $\langle A^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\psi|A\chi\rangle$ erinnern, sehen wir, dass $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ gilt. Die entsprechende ‘Rechnung’ für \hat{x} überlassen wir dem Leser.

Der Hamilton-Operator ist (erst allgemein, dann für den Oszillator)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2, \quad (3.3)$$

was nach obiger Diskussion natürlich auch hermitesch ist. (Die für Matrizen offensichtliche Rechenregel $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ gilt auch für Operatoren im Allgemeinen.) Die klassische Lösung hat bekanntermaßen die Kreisfrequenz $\omega = \sqrt{k/m}$, und es ist üblich, diese statt der Federkonstanten k zu benutzen.

Unser Ziel ist also die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenfunktionen von

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (3.4)$$

bestimmen. Um dies möglichst elegant zu tun, definiert man sich aus den relevanten Konstanten \hbar , m und ω Größen mit der Dimension von Impuls, Ort und Energie,

$$p_0 \equiv \sqrt{\hbar\omega m}, \quad x_0 \equiv \sqrt{\hbar/\omega m} \quad \text{und} \quad \hbar\omega, \quad (3.5)$$

und ‘misst’ Impuls und Ort in diesen Einheiten:

$$\hat{\pi} \equiv \hat{p}/p_0, \quad \hat{\xi} \equiv \hat{x}/x_0. \quad (3.6)$$

Der Hamilton-Operator erhält die einfache Form

$$\hat{H} = \hbar\omega \frac{1}{2}(\hat{\pi}^2 + \hat{\xi}^2). \quad (3.7)$$

3.2 Algebraische Lösung

Wie wir noch genauer verstehen werden, spielen die sogenannten **kanonischen Vertauschungsrelationen** zwischen Orts und Impulsoperator eine entscheidende Rolle in der Quantenmechanik:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &\equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x(-i\hbar d/dx) - (-i\hbar d/dx)x \\ &= x(-i\hbar d/dx) - \{-i\hbar + x(-i\hbar d/dx)\} = i\hbar. \end{aligned} \quad (3.8)$$

In unseren neuen Operatoren ausgedrückt wird dies noch einfacher: $[\hat{\xi}, \hat{\pi}] = i$. Das Wort ‘algebraisch’ in unserer Überschrift bedeutet nun, dass man von den Operatoren nur diese Vertauschungsrelationen braucht und dann (rein algebraisch) das Eigenwertproblem lösen kann.

Wir definieren

$$a \equiv (\hat{\xi} + i\hat{\pi})/\sqrt{2} \quad (\text{woraus folgt, dass } a^\dagger = (\hat{\xi} - i\hat{\pi})/\sqrt{2}) \quad (3.9)$$

Man kann dies leicht nach $\hat{\xi}$, $\hat{\pi}$ auflösen:

$$\hat{\xi} = (a + a^\dagger)/\sqrt{2}, \quad \hat{\pi} = (a - a^\dagger)/i\sqrt{2}. \quad (3.10)$$

Wir berechnen die Kommutatorrelation für a und a^\dagger :

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{\xi} + i\hat{\pi}, \hat{\xi} - i\hat{\pi}] = \frac{i}{2}([\hat{\pi}, \hat{\xi}] - [\hat{\xi}, \hat{\pi}]) = 1, \quad (3.11)$$

und drücken \hat{H} durch a, a^\dagger aus:

$$\hat{\pi}^2 + \hat{\xi}^2 = \frac{1}{2}(a + a^\dagger)^2 - \frac{1}{2}(a - a^\dagger)^2 = aa^\dagger + a^\dagger a = [a, a^\dagger] + 2a^\dagger a = 2a^\dagger a + 1, \quad (3.12)$$

und somit

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (3.13)$$

Im letzten Schritt haben wir den **Besetzungszahloperator** $N = a^\dagger a$ definiert. Wenn es uns gelingt, diesen zu diagonalisieren, dann haben wir offensichtlich auch \hat{H} diagonalisiert.

Wir machen nun eine entscheidende Annahme (die wir später prüfen werden): Es gäbe eine Vektor, der von a auf die Null abgebildet ('vernichtet') wird. Wir nennen diesen Vektor $|0\rangle$, so dass

$$a|0\rangle = 0. \quad (3.14)$$

O.B.d.A. sein $\langle 0|0\rangle = 1$. Des Weiteren definieren wir

$$|n\rangle \equiv (a^\dagger)^n |0\rangle / \alpha_n, \quad (3.15)$$

wobei wir die reellen Faktoren α_n so wählen, dass $\langle n|n\rangle = 1$.

Offensichtlich gilt

$$a^\dagger |n\rangle = (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle / \alpha_n = (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle / \alpha_{n+1} \cdot (\alpha_{n+1} / \alpha_n) = |n+1\rangle (\alpha_{n+1} / \alpha_n). \quad (3.16)$$

Das heißt, a^\dagger führt uns von n zu $n+1$, man nennt a^\dagger deshalb den **Aufsteiger** (oder Erzeuger).

Etwas interessanter ist die Berechnung der Wirkung von a :

$$a|n\rangle = a(a^\dagger)^n |0\rangle / \alpha_n. \quad (3.17)$$

Dazu rechnen wir, unter vielfacher Ausnutzung von $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$,

$$a(a^\dagger)^n = aa^\dagger (a^\dagger)^{n-1} = a^\dagger a (a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^{n-1} \quad (3.18)$$

$$= (a^\dagger)^2 a (a^\dagger)^{n-2} + 2(a^\dagger)^{n-1} = \dots = (a^\dagger)^n a + n(a^\dagger)^{n-1}. \quad (3.19)$$

Wir haben hier schlicht a schrittweise nach rechts geschoben, wobei wir bei jedem Schritt einen extra Term $(a^\dagger)^{n-1}$ bekommen haben. Das Endergebnis ist, nochmal in einer Zeile zusammengefasst,

$$a(a^\dagger)^n = n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n a. \quad (3.20)$$

Da nun aber per Annahme $a|0\rangle = 0$ ist, folgt aus (3.17)

$$a|n\rangle = n(a^\dagger)^{n-1} |0\rangle / \alpha_n = n(a^\dagger)^{n-1} |0\rangle / \alpha_{n-1} \cdot (\alpha_{n-1} / \alpha_n) = |n-1\rangle n(\alpha_{n-1} / \alpha_n). \quad (3.21)$$

Wir können also a als **Absteiger** (oder Vernichter) bezeichnen. Zusammen nennt man a und a^\dagger auch Leiteroperatoren.

Außerdem können wir leicht feststellen, dass unsere $|n\rangle$ Eigenvektoren zu N sind. Dazu brauchen wir uns um die Normierung nicht zu kümmern und rechnen mit der beim Absteiger erlernten Methode

$$N(a^\dagger)^n |0\rangle = a^\dagger a (a^\dagger)^n |0\rangle = a^\dagger \left(n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n a \right) |0\rangle = n(a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (3.22)$$

Es gilt also

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \quad (3.23)$$

Jetzt kümmern wir uns um die Normierung, indem wir die Norm von $a^\dagger|n\rangle$ berechnen. Einerseits haben wir

$$\|a^\dagger|n\rangle\|^2 = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|(1+a^\dagger a)|n\rangle = \langle n|(1+N)|n\rangle = (1+n). \quad (3.24)$$

Andererseits wissen wir, dass

$$\|a^\dagger|n\rangle\|^2 = \|\ |n+1\rangle(\alpha_{n+1}/\alpha_n)\|^2 = (\alpha_{n+1}/\alpha_n)^2. \quad (3.25)$$

Da die Ausdrücke rechts gleich sein müssen, erhalten wir die Rekursionsrelation

$$\alpha_{n+1}^2 = (n+1)\alpha_n^2. \quad (3.26)$$

Man errät leicht die Lösung

$$\alpha_n = \sqrt{n!}. \quad (3.27)$$

Zusammenfassend haben wir die normierte Basis

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad \text{mit Eigenwerten} \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (3.28)$$

bezüglich \hat{H} gefunden. Es gilt $a|0\rangle = 0$ sowie $a^\dagger|n\rangle \sim |n+1\rangle$ und $a|n\rangle \sim |n-1\rangle$. Die hierbei auftretenden Normierungsfaktoren sind oben berechnet worden. Die Orthogonalität der Basis folgt aus der Hermitizität von \hat{H} , ist aber auch leicht explizit nachzuprüfen.

3.3 Hermite-Polynome

Um die Wellenfunktionen explizit zu berechnen, ist es bequem zunächst bei $\hat{\xi}$ und $\hat{\pi}$ zu bleiben und auch entsprechend normierte klassische Variablen ξ und π einzuführen. Wir schreiben also $\psi = \psi(\xi)$ und

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\xi} + i\hat{\pi} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \quad , \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\xi} - i\hat{\pi} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \quad (3.29)$$

Kümmern wir uns zunächst um die Grundzustands-Wellenfunktion $|0\rangle$. Wir müssen

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0(\xi) = 0 \quad (3.30)$$

lösen, was mit Separation der Variablen sofort gelingt:

$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2}. \quad (3.31)$$

Wir haben hier bereits auf Eins normiert, was der Differentialgleichung natürlich egal ist, die Quantenmechanik aber fordert. Wir haben hier insbesondere unsere oben gemachte Annahme

gerechtfertigt, dass es einen Vektor gibt, der von a vernichtet wird. Damit haben wir auch sofort alle angeregten Zustände, und zwar auch gleich mit richtiger Normierung:

$$\psi_n(\xi) = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}. \quad (3.32)$$

Klarerweise sind das auch alles Gauß-Kurven, aber mit Polynomen als Vorfaktor. Das kann man manifest machen, indem man die sogenannten Hermite-Polynome einführt,

$$H_n(\xi) \equiv (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (3.33)$$

Um unser Resultat in diese umzuschreiben, geht man wie folgt vor. Zunächst überzeugt man sich, dass

$$e^{-\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{\xi^2/2} = -\frac{d}{d\xi} \quad (3.34)$$

gilt, wobei beide Seiten als Differentialoperatoren anzusehen sind. Dann nimmt man davon die n -te Potenz und findet

$$e^{-\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{\xi^2/2} = (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n}. \quad (3.35)$$

Das setzen wir in die Definition der Hermite-Polynome ein und finden

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} \quad (3.36)$$

sowie schließlich

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi). \quad (3.37)$$

Schließlich kehren wir noch zu unserer physikalischen Variablen $x = \xi x_0$ zurück,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!} x_0} e^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0), \quad (3.38)$$

wobei wir auch im Vorfaktor ein $1/\sqrt{x_0}$ einführen mussten, um die Normierung auf Eins auch in der Variablen x zu erhalten ($d\xi = dx/x_0$).

In Fig. 6 ist eine der höheren Moden illustriert. Man sieht deutlich, dass sich das Teilchen in der Nähe der Umkehrpunkte mit höherer Wahrscheinlichkeit aufhält als im Zentrum. Das ist auch anschaulich klar, weil es dort bei der klassischen Bewegung langsamer wird. Völlig nichttrivial ist, dass es uns ganz ohne Analysis gelungen ist, eine (abzählbar unendliche) Orthonormalbasis für den Raum der quadratintegriblen komplexen Funktionen auf \mathbb{R} zu finden. Wir haben hier ein quantenmechanisches Beispiel, in dem alles fast so einfach ist, wie im Fall endlichdimensionaler Matrizen.

Die zentralen physikalischen Lehren sind für uns die Diskretheit des Spektrums und die immer schlechter werdende Lokalisierung im Zentrum bei starker Anregung. Letzteres entspricht der intuitiven Erwartung. Aber auch die höheren Moden können nicht zu sehr hohem Potential vordringen - dort siegt der Abfall des exponentiellen Faktors über das Polynom.

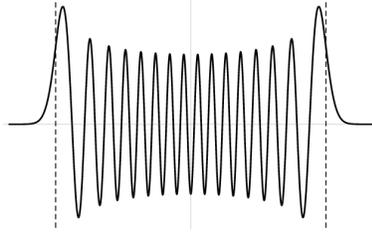


Abbildung 6: Illustration einer der höheren Moden (aus Wikipedia).

Als Schlußkommentar wollen wir noch erwähnen, wie man ohne die algebraische Idee der Leiteroperatoren zum Ziel kommt. Wir wollen die Differentialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right)\psi = \epsilon\psi \quad (3.39)$$

lösen. Bei sehr großem ξ vereinfacht sich das zu $\psi'' - \xi^2\psi = 0$. Wieder unter der Annahme von sehr großem ξ wird das angenähert ('asymptotisch') durch $e^{-\xi^2/2}$ gelöst. Wir machen den Ansatz $H(\xi)e^{-\xi^2/2}$ und leiten (nunmehr ohne Näherung) eine Differentialgleichung für den Vorfaktor H her (die hermitesche Differentialgleichung). Diese wird mit einem Potenzreihenansatz gelöst, der zu einer Rekursionsformel für die Koeffizienten der Reihe führt. Damit die Lösung normierbar bleibt, muss die Reihe abbrechen. Das geschieht nur für bestimmte Werte von ϵ und führt somit zur Energie-Quantisierung. Man findet natürlich die Hermite-Polynome und die uns schon bekannten Wellenfunktionen (siehe z.B. Wess [4]).

3.4 Kohärente Zustände

Unsere bisherige Beschreibung des harmonischen Oszillators ist typisch für die Quantenmechanik: Wir haben ein Diskretuum von Energieeigenzuständen gefunden, kennen deren jeweilige Wellenfunktion (x -Abhängigkeit) und Zeitentwicklung ($e^{-iE_n t/\hbar}$) und können damit prinzipiell jede physikalische Frage beantworten. Aber wir sind sehr weit entfernt von der Oszillationsbewegung des klassischen Teilchens, welche ja in Grenzfall großer Anregung zumindest angenähert enthalten sein muss. Dies lässt sich aber gerade im Fall des Oszillators besonders einfach beheben:

Betrachten die sogenannten **kohärenten Zustände** (die Namensgebung wird sehr bald klar werden), welche als **Eigenzustände des Absteigers** a definiert sind,

$$a|z\rangle = z|z\rangle. \quad (3.40)$$

Wir behaupten zunächst, dass Zustände vom Typ ($z \in \mathbb{C}$)

$$|z\rangle \sim e^{za^\dagger}|0\rangle \quad (3.41)$$

diese Forderung erfüllen. In der Tat haben wir gelernt, dass

$$a(a^\dagger)^n = n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n a. \quad (3.42)$$

Man kann sich diese algebraische Relation veranschaulichen, indem man sagt, dass a auf eine Potenz (und damit auf jede Potenzreihe) so wirkt, wie ein Ableitungsoperator:

$$\frac{\partial}{\partial a^\dagger} (a^\dagger)^n = n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n \frac{\partial}{\partial a^\dagger}. \quad (3.43)$$

Damit ist sofort klar (aber prüfen Sie es auch Term für Term nach!), dass

$$ae^{za^\dagger} = ze^{za^\dagger} + e^{za^\dagger} a. \quad (3.44)$$

Wegen $a|0\rangle = 0$ folgt

$$a \left(e^{za^\dagger} |0\rangle \right) = z \left(e^{za^\dagger} |0\rangle \right), \quad (3.45)$$

was zu beweisen war.

Die Wellenfunktion $\psi_z(x)$ dieser Zustände ist leicht zu bestimmen. Dazu benutzen wir unsere dimensionslose Variable ξ und erinnern uns, an den Ausdruck für a als Differentialoperator und die Grundzustands-Wellenfunktion:

$$\sqrt{2}a \psi_0(\xi) = \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0(\xi) = 0, \quad \psi_0(\xi) \sim e^{-\xi^2/2}. \quad (3.46)$$

Dies verallgemeinert sich sofort zu

$$\sqrt{2}(a - z) \psi_z(\xi) = \left(\xi - \sqrt{2}z + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_z(\xi) = 0, \quad \psi_z(\xi) \sim e^{-(\xi - \sqrt{2}z)^2/2}. \quad (3.47)$$

Es kommt also zu einer Verschiebung der Gaußfunktion $\sim \text{Re}z$ und zu einer zusätzlichen x -abhängigen Phase.

Die Normierung ist sehr leicht mit algebraischen Methoden zu bestimmen. Wir bemerken, dass

$$e^{wa} e^{za^\dagger} |0\rangle = e^{wz} e^{za^\dagger} |0\rangle, \quad (3.48)$$

weil a auf $|z\rangle$ so wirkt, wie die Multiplikation mit z . Demnach gilt

$$\|e^{za^\dagger} |0\rangle\|^2 = \langle 0| \left(e^{za^\dagger} \right)^\dagger e^{za^\dagger} |0\rangle = \langle 0| e^{\bar{z}a} e^{za^\dagger} |0\rangle = e^{\bar{z}z} \langle 0| e^{za^\dagger} |0\rangle = e^{\bar{z}z} = e^{|z|^2}. \quad (3.49)$$

Hier haben wir im vorletzten Schritt benutzt, dass $a|0\rangle = 0$ und somit $\langle 0|a^\dagger = 0$. Wir kennen jetzt also auch die normierten kohärenten Zustände,

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{za^\dagger} |0\rangle. \quad (3.50)$$

Starten wir mit solch einem Zustand bei $t = 0$, so können wir den zeitentwickelten Zustand

$$e^{-iHt/\hbar} |z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iHt/\hbar} \frac{(za^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \quad (3.51)$$

sofort bestimmen, indem wir uns erinnern, dass

$$H (a^\dagger)^n |0\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (3.52)$$

Also gilt

$$e^{-iHt/\hbar}|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega t/2} e^{-i\omega n t} \frac{(za^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ze^{-i\omega t} a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle. \quad (3.53)$$

Es kommt also zu einer Phasenrotation aufgrund der Nullpunktsenergie $\hbar\omega/2$ sowie zusätzlich zu einer Phasenrotation der Variablen z mit $e^{-i\omega t}$. Dies können wir wie folgt besonders kompakt schreiben:

$$e^{-iHt/\hbar}|z\rangle = e^{-i\omega t/2}|z(t)\rangle \quad z(t) \equiv ze^{-i\omega t}. \quad (3.54)$$

Schließlich wollen wir die zeitliche Entwicklung der x -Abhängigkeit bestimmen. Wie wir aus (3.54) sehen, können wir die Phase von z in eine Umdefinition von t absorbieren. Dann ist

$$z(t) = |z| (\cos(\omega t) + i \sin(\omega t)). \quad (3.55)$$

Außerdem sind uns Normierung und Gesamtphase von ψ unwichtig, so dass wir

$$\begin{aligned} \psi_z(t, x) &\sim \psi_{z(t)}(x) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}z(t))^2\right] \\ &\sim \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\xi - \sqrt{2}|z| \cos(\omega t)\right\}^2 + |z|^2 \sin^2(\omega t) + i\left\{\xi - \sqrt{2}|z| \cos(\omega t)\right\} \sqrt{2}|z| \sin(\omega t)\right] \end{aligned} \quad (3.56)$$

sowie

$$|\psi_z(t, x)|^2 \sim \exp\left[-(\xi - \sqrt{2}|z| \cos(\omega t))^2\right] \quad (3.57)$$

finden. Im letzten Ausdruck haben wir alle ξ -unabhängigen Faktoren weggelassen. Wie man sieht, haben wir es mit einem kohärenten (nicht zerfließendes) Wellenpaket zu tun, dass mit der Amplitude $\sqrt{2}|z|$ um den Ursprung oszilliert. Wie Sie schon wissen und wie wir noch im Detail sehen werden, ist dies sehr verschieden vom Verhalten eines solchen Wellenpakets ohne Potential.

Man kann sich leicht überzeugen, dass auch der Erwartungswert des Impulses entsprechende Oszillationen ausführt. Dies ist grob gesagt das ‘beste klassische Verhalten’, dass wir beim Oszillator erreichen können.

4 Weitere eindimensionale Systeme

4.1 Das freie Teilchen auf der S^1

Auf den ersten Blick gibt es ein viel einfacheres System, als der oben gelöste harmonische Oszillator: das freie Teilchen in einer Dimension. Der Hilbertraum ist der gleiche, wie oben, und dem Hamilton-Operator fehlt der Potentialterm:

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m \quad \text{mit} \quad \hat{p} = -i\hbar d/dx. \quad (4.1)$$

Aber schon auf den zweiten Blick offenbart sich ein ernstes Problem: Die Eigenfunktionen sowohl zu \hat{p} und demnach auch zu \hat{H} kennen wir schon,

$$|p\rangle = e^{ipx/\hbar}, \quad (4.2)$$

und diese sind nicht normierbar. Vermutlich kennen Sie auch schon (aufgrund der in Theorie 3 besprochenen Fourier-Transformation) die Lösung: Man normiert ‘auf δ -Funktion’ und vermeidet alle (meist auch physikalisch sinnlose) Fragen, die eine normierte Energie-Eigenfunktion erfordern.

Wir werden dies auch gleich tun, wollen aber vorher noch ein anderes System ansprechen, das äußerst ähnlich ist, aber kein Normierungsproblem kennt: Das freie Teilchen auf der S^1 . Es ist auch als ‘starrer Rotator’ bekannt, weil man die Position auf der S^1 als Winkelvariable eines Körpers auf einer Achse interpretieren kann.

Wir parametrisieren die S^1 durch $x \in [-L/2, L/2]$. Der Hilbertraum sind die Funktionen auf diesem Intervall mit ‘periodischen Randbedingungen’. Das heißt, $\psi(x)$ und alle Ableitungen stimmen bei $-L/2$ und $L/2$ überein. Äquivalenterweise können wir über periodische Funktionen auf \mathbb{R} sprechen: $\psi(x) = \psi(x + L)$. Wir interpretieren aber nur den Bereich $x \in [-L/2, L/2]$ physikalisch und normieren auch entsprechend:

$$\langle \psi | \chi \rangle \equiv \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi(x)^* \chi(x). \quad (4.3)$$

Die Eigenfunktionen von \hat{p} und \hat{H} sind natürlich immer noch die Exponentialfunktionen, aber es sind jetzt nicht mehr alle Werte von p bzw. $k = p/\hbar$ zugelassen: Wegen der Periodizität gilt $k = 2\pi n/L$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Es ist für uns im Moment bequemer, mit der Wellenzahl k statt mit p zu arbeiten, so dass wir

$$|k_n\rangle = e^{ik_n x} / \sqrt{L} \quad \text{mit} \quad k_n = 2\pi n/L \quad (4.4)$$

schreiben.

Das Schöne an diesem System ist, dass wir sofort sehen, dass es sich um eine Orthonormalbasis unseres Hilbertraums handelt: Das ist Schlicht die zentrale Aussage der Fourier-Analyse auf einem Intervall:

$$\langle k_n | k_m \rangle = \delta_{nm} \quad (4.5)$$

sowie

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |k_n\rangle \quad \text{und} \quad \psi_n = \langle k_n | \psi \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{e^{-ik_n x}}{\sqrt{L}} \psi(x). \quad (4.6)$$

Zusammenfassend sehen wir, dass die Situation ähnlich perfekt ist, wie beim harmonischen Oszillator: Wir haben eine unendlich abzählbare Basis von Eigenvektoren und das (bis auf den Null-Eigenwert) doppelt degenerierte Spektrum

$$E_n = p_n^2/2m = \hbar^2 k_n^2/2m = (2\pi\hbar)^2 n^2 / (2mL^2). \quad (4.7)$$

Interessanterweise ist der Operator \hat{x} nicht definiert: Wenn $\psi(x)$ periodisch ist, so gilt das für $x\psi(x)$ nicht mehr. Trotzdem gibt es entsprechende Observable, z.B. $\cos(2\pi n\hat{x}/L)$ etc. – periodische Funktionen von \hat{x} bilden \mathcal{H} auf sich selbst ab.

4.2 Das freie Teilchen

Natürlich war das obige für uns nur eine Vorübung: Unser Hauptinteresse gilt dem freien Teilchen auf \mathbb{R} . Ein Weg dahin besteht darin, von obigen Beispiel auszugehen und den Grenzwert $L \rightarrow \infty$

zu nehmen. Dabei ist es bequem, die Normierung der Basis zu ändern:

$$|k_n\rangle \rightarrow |k\rangle \equiv |k_n\rangle\sqrt{L} = e^{ikx}. \quad (4.8)$$

Wir nennen die Komponenten in dieser Basis statt ψ_n jetzt ψ_k :

$$\psi_k = \langle k|\psi\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ikx}\psi(x) = \psi_n\sqrt{L}, \quad (4.9)$$

wobei k aber immer noch diskret ist. Außerdem wollen wir statt über n über die diskrete Variable k_n summieren und dies dann durch ein Integral annähern:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |k_n\rangle = \sum_{k_n} \frac{\Delta k}{2\pi/L} \psi_n |k_n\rangle \simeq \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k |k\rangle. \quad (4.10)$$

Im letzten Schritt haben wir $\psi_n\sqrt{L} = \psi_k$ und $|k_n\rangle\sqrt{L} = |k\rangle$ ersetzt. Damit haben wir schon in (4.9) die Fourier-Transformation auf \mathbb{R} (für $L \rightarrow \infty$) und in (4.10) die Umkehrtransformation. Schließlich prüfen wir noch, was aus unserer Orthonormierung wird:

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{nn'}L. \quad (4.11)$$

Dies ist offensichtlich Null falls $k \neq k'$ und sehr groß falls $k = k'$. Um die Normierung im Limes $L \rightarrow \infty$ zu verstehen, summieren wir nach Riemann über k' und multiplizieren jeden Term mit $\Delta k' = 2\pi/L$:

$$\sum_{k'} (\Delta k') \langle k|k'\rangle = \sum_{n'} \frac{2\pi}{L} \delta_{nn'}L = 2\pi. \quad (4.12)$$

Wir haben also bei im Grenzfall

$$\int dk' \langle k|k'\rangle = 2\pi \quad \text{bzw.} \quad \langle k|k'\rangle = 2\pi\delta(k - k'). \quad (4.13)$$

Das Obige war natürlich nichts weiter als eine ‘Physiker-Herleitung’ der Fourier-Transformation auf \mathbb{R} . Unsere Konventionen zur Fourier-Transformation sind

$$\mathcal{F}(\psi)(k) \equiv \tilde{\psi}(k) \equiv \psi_k = \int dx \psi(x)e^{-ikx}, \quad (4.14)$$

$$\mathcal{F}^{-1}(\tilde{\psi})(x) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k)e^{ikx}. \quad (4.15)$$

Der Zweck unserer Diskussion war, zu zeigen, wie es zu der nicht-normierbaren bzw. nur ‘auf δ -Funktion’ normierbaren Basis aus Exponentialfunktionen kommt. Wir fassen die entscheidenden Formeln jetzt auch nochmal in Bra-Ket-Notation zusammen, wobei wir der Vollständigkeit halber diesmal Impulse statt Wellenzahlen benutzen:

Die Energie- und Impuls-Eigenbasis ist

$$|p\rangle = e^{ipx/\hbar}, \quad (4.16)$$

mit

$$\langle p|p'\rangle = \int dx \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) = \int dx e^{i(p'-p)x/\hbar} = \hbar \int dy e^{i(p'-p)y} = 2\pi\hbar \delta(p-p'). \quad (4.17)$$

Wir können jede Wellenfunktion in diese Basis zerlegen:

$$|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \psi_p |p\rangle \quad \text{mit} \quad \psi_p = \langle p|\psi\rangle = \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \quad (4.18)$$

Diese Basis ist allerdings selbst nicht aus \mathcal{H} , da nicht quadratintegrabel. Das Spektrum ist kontinuierlich:

$$E(p) = p^2/(2m). \quad (4.19)$$

Die Eigenfunktionen sind links oder rechtslaufende Wellen, die man natürlich auch zu stehenden Wellen kombinieren kann, z.B. $e^{ikx} + e^{-ikx} = 2\cos(kx)$.

4.3 Heisenberg-Algebra und Translations-Symmetrie

Symmetrien werden später noch sehr wichtig werden, aber hier ist ein guter Ort für ein paar erste Worte zu diesem Thema. Alle von uns bisher diskutierten Systeme hatten einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator dessen Energie-Eigenzustände demnach von der Dynamik (bis auf die Phase) nicht verändert wurden. Das ist das quantenmechanische Analogon zur aus Zeittranslationsinvarianz folgenden Energieerhaltung.

Das freie Teilchen hat zusätzlich Translationsinvarianz (in x), was dem Nichtauftreten von \hat{x} in \mathcal{H} entspricht. Bevor wir diese quantenmechanisch genauer formulieren, ein paar Worte zu Operatoralgebra:

Die Observablen bilden als Operatoren einen Vektorraum, können aber zusätzlich noch multipliziert werden (wobei die Multiplikation die Linearität respektiert). Dies nennt man eine Algebra – ein sehr wichtiges, abstraktes Konzept, unabhängig von der konkreten Operator-Realisierung.

Wir definieren also eine (**abstrakte**) **Algebra** als Vektorraum V mit einer Abbildung (Multiplikation)

$$V \times V \rightarrow V, \quad (4.20)$$

welche in jedem der beiden Argumente linear (also bilinear) ist. Eine wichtige Unterklasse sind die **assoziativen** Algebren, für die zusätzlich $(ab)c = a(bc)$ gilt. Operator und Matrix-Algebren haben natürlich diese Eigenschaft.

Eine großer Satz von abstrakten Beispielen sind die sogenannten **freien Algebren**, die wir hier am Beispiel der freien Algebra über den beiden Elementen a, b definieren also

$$V_f = \text{Span}(a, b, a^2, ab, ba, b^2, a^3, a^2b, \dots). \quad (4.21)$$

Es ist also der Vektorraum aller Linearkombinationen von Monomen aus a and b . Analog kann man freie Algebren auf der Grundlage beliebig vieler Elemente, z.B. a_1, \dots, a_n bauen. Multiplikation geschieht durch Nebeneinanderschreiben, also z.B. $ab \cdot ab = abab$.

Für uns wird es nützlich sein, ein Eins-Element hinzuzunehmen (wobei wir es zur Einfachheit beim Namen V_f belassen), also

$$V_f = \text{Span}(\mathbb{1}, a, b, a^2, ab, ba, b^2, a^3, a^2b, \dots). \quad (4.22)$$

Die Multiplikationsregel mit $\mathbb{1}$ ist die naheliegende: $\mathbb{1} \cdot v = v \cdot \mathbb{1} = v$ für jedes $v \in V_f$.

Jetzt machen wir (was wieder eine ganz allgemeine Methode ist) die Algebra interessanter, indem wir eine Äquivalenzrelation ausmodden, also

$$V \equiv V_f / \sim. \quad (4.23)$$

Konkret wollen wir fordern, dass

$$v_1 \sim v_2 \quad (v_{1,2} \in V_f) \quad (4.24)$$

falls sie sich mittels (möglicherweise vielfacher) Anwendung der Relation oder Beziehung

$$ab - ba = i\hbar \mathbb{1} \quad (4.25)$$

ineinander umrechnen lassen. Es gilt also z.B.

$$ab \sim i\hbar \mathbb{1} + ba, \quad a^2b \sim ai\hbar + aba \sim 2ai\hbar + ba^2, \quad \text{etc.} \quad (4.26)$$

Die so entstandene Algebra besteht also aus allen Linearkombinationen aus $\mathbb{1}$ und beliebigen Monomen aus a, b , wobei mittels der Relation (4.25) umgeformt werden darf.

Man schreibt dies üblicherweise mit $a \rightarrow \hat{x}$ und $b \rightarrow \hat{p}$ und nennt es die **Heisenberg-Algebra**. Wir reden also von zwei **abstrakten** Elementen \hat{x} und \hat{p} sowie allen Monomen daraus, wobei mit der Relation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (4.27)$$

umgeformt werden darf.⁷ (Wir haben nur mit der Notation a, b angefangen, um deutlich zu machen, dass die Basis-Elemente oder **Generatoren** \hat{x} und \hat{p} a priori nichts mit den Bekannten Operatoren auf $L_2(\mathbb{R})$ zu tun haben.)

Eine konkrete Realisierung einer Algebra durch Operatoren heißt **Darstellung**. Wir wollen dazu die Algebra der Operatoren auf \mathcal{H} durch $\mathcal{A}(\mathcal{H})$ bezeichnen. Eine Darstellung ist dann eine lineare Abbildung R (für ‘Representation’)

$$V \rightarrow \mathcal{A}(\mathcal{H}), \quad (\mathcal{A}(\mathcal{H}) \equiv \text{Operatoren auf } \mathcal{H}) \quad (4.28)$$

welche die Multiplikation respektiert, also $R(v_1v_2) = R(v_1)R(v_2)$ (ein Algebra-Homomorphismus). Die für uns entscheidende Darstellung ist die auf $L^2(\mathbb{R})$, definiert durch

$$\hat{p} \mapsto -i\hbar d/dx \quad \text{und} \quad \hat{x} \mapsto x. \quad (4.29)$$

⁷Oft meint man mit Heisenberg-Algebra auch nur den 3-dimensionalen Unterraum, den $\mathbb{1}$, \hat{x} und \hat{p} aufspannen. Dann darf man natürlich nicht multiplizieren, sonst verlässt man diesen Raum. Man darf aber Kommutatoren bilden. Wir wollen diesen Unterraum als **Heisenberg-Lie-Algebra** bezeichnen. Ein anderer Name für die größere Algebra, die wir Heisenberg-Algebra nennen (also mit Potenzen von \hat{x} etc.) ist **Weyl-Algebra**.

Im gegebenen Fall ist diese Darstellung eindeutig (Stone-von-Neumann-Theorem). Wegen dieser Eindeutigkeit folgt praktisch die gesamte Quantenmechanik des Teilchens auf der Geraden eigentlich aus der algebraischen Relation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die höherdimensionale Version

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad (4.30)$$

natürlich nicht zufällig sondern aufgrund des Grundprinzips der **kanonischen Quantisierung** die Form der entsprechenden Poisson-Klammern hat. Dazu später mehr.

Wir bleiben der Kürze halber in einer Dimension und bemerken, dass es neben der $|p\rangle$ -Basis auch die Eigenvektor-Basis zu \hat{x} gibt:

$$|x\rangle = \delta(x' - x). \quad (4.31)$$

wir haben hier das Notations-Problem, dass x sowohl als Lokalisierungs-Ort der δ -Funktion als auch als Argument gebraucht wird. Wir haben das Argument deshalb x' genannt. Man überzeugt sich leicht, dass

$$\hat{x}|x\rangle = x'\delta(x' - x) = x\delta(x' - x) = x|x\rangle, \quad (4.32)$$

und (Normierung auf δ -Funktion)

$$\langle x|y\rangle = \int dx' \delta(x' - x) \delta(x' - y) = \delta(x - y). \quad (4.33)$$

Außerdem gilt

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dx' \delta(x' - x)\psi(x'), \quad (4.34)$$

die Werte der Wellenfunktion sind also die Koeffizienten der Zerlegung des abstrakten Hilbertraumvektors $|\psi\rangle$ in die $|x\rangle$ -Basis. Die Fourier-Transformation ist also nur der Wechsel zwischen $|x\rangle$ -Basis und $|p\rangle$ -Basis. Die Matrix dieses Basis-Wechsels ist natürlich die e -Funktion:

$$\langle x|p\rangle = e^{ipx/\hbar}. \quad (4.35)$$

Wir werden gleich noch eine weitere einfache aber wichtige Relation brauchen: den allgemeinen Ausdruck für die Eins in einer beliebigen Basis. Zunächst im endlichdimensionalen Fall:

$$\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|. \quad (4.36)$$

Dies ist anschaulich klar, da wir auf alle Achsen Projizieren und die sich so ergebenden Vektoren dann wieder zusammensetzen. Es ist natürlich auch leicht zu beweisen. Im Fall unserer beiden kontinuierlichen Basen haben wir dementsprechend

$$\mathbb{1} = \int dx |x\rangle\langle x| = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle\langle p|, \quad (4.37)$$

was ebenso leicht nachzuprüfen ist.

Wir behaupten nun, dass der Impuls, dessen Erhaltung ja klassisch mit der Translationsinvarianz zusammenhängt, die Translationen auch als Operator erzeugt. Dies ist ganz im Sinne

dessen, was wir in der Hamilton-Mechanik über die Wirkung der Erhaltungsgrößen auf dem Phasenraum gelernt haben. Die Rechnung führen wir zur Vereinfachung mit $\hbar = 1$ durch:

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{p}\epsilon}|x\rangle &= \int \frac{dp'}{2\pi} e^{-i\hat{p}\epsilon}|p'\rangle\langle p'|x\rangle = \int \frac{dp'}{2\pi} e^{-ip'\epsilon}|p'\rangle e^{-ip'x} = \int \frac{dp'}{2\pi} e^{-ip'(x+\epsilon)}|p'\rangle \\ &= \int \frac{dp'}{2\pi} |p'\rangle\langle p'|x+\epsilon\rangle = |x+\epsilon\rangle. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Das Schöne an dieser Herleitung ist, dass sie fast komplett algebraisch ist und eigentlich nur auf der am Anfang stehenden kanonischen Vertauschungsrelation (so wie deren Darstellung mittels x und d/dx) beruht.

Natürlich ist auch etwas Anschauung, am besten linearisiert in ϵ (was bisher noch nicht klein war) gut:

$$e^{i\hat{p}\epsilon}\psi(x) \simeq \left(1 + i(-i\epsilon d/dx)\right)\psi(x) = \psi(x) + \epsilon\psi'(x) \simeq \psi(x + \epsilon). \quad (4.39)$$

Man kann auch ohne die obige Orgie in Bras und Kets auf den Fall endlicher ϵ schließen, weil endliche Translationen aus vielen kleinen zusammengesetzt werden können.

Zum Abschluß wollen wir das ganze noch mathematisch formulieren: Die Translationen bilden eine (zugegebenermaßen sehr einfache) **Lie-Gruppe**: \mathbb{R} . Diese Gruppe wirkt auf \mathcal{H} in einer Weise, die die Norm respektiert. Man spricht von einer **unitären Darstellung**. Wie wir schon bei der Zeitentwicklung gelernt haben, ist $\exp(i\hat{p}\epsilon)$ unitär, weil \hat{p} hermitesch ist. Mit der Darstellung der Gruppe geht eine Darstellung der Lie-Algebra ('infinitesimale Transformationen minus Eins') einher. In unserem Fall gibt es nur einen Generator: \hat{p} . Die Erhaltungsgrößen sind **Observable**, die entsprechenden **Operatoren bilden eine Darstellung der Lie-Algebra der zugehörigen Symmetrie-Gruppe**. Diese Logik wird sich im Fall der Drehgruppe auf interessantere Weise wiederholen.

Wir wollen an dieser Stelle den in Theorie I in einem 'fortgeschrittenen Kommentar' schon erwähnten Begriff der Darstellung nochmals präzise fassen: Eine Darstellung einer Gruppe G mit Elementen g ist eine Abbildung $g \mapsto D(g)$ in den Raum linearer Operatoren auf einem Vektorraum V . Dabei muss die Gruppenmultiplikation respektiert werden: $D(g)D(h) = D(gh)$. Man sagt auch, eine Darstellung ist ein Gruppen-Homomorphismus $G \rightarrow GL(V)$.

Der Begriff der Darstellung überträgt sich in naheliegender Weise auf abstrakte Algebren (Vektorräume mit Multiplikation) und Lie-Algebren. Im letzten Fall wird die Lie-Klammer auf den Kommutator von Operatoren abgebildet.

4.4 Zerfließendes Wellenpaket

Wir wollen eine einfache dynamische Frage beantworten: Was geschieht mit einem z.B. bei $x = 0$ lokalisierten Teilchen? Dazu starten wir mit

$$\psi(x, 0) = (a/\pi)^{1/4} e^{-ax^2/2}, \quad (4.40)$$

einem sogenannten Gaußschen Wellenpaket der Breite $1/\sqrt{a}$. Wir fragen nach $\psi(x, t)$.

Dies ist eine perfekte Übungsaufgabe (die auch als solche gestellt werden wird), deren Ergebnis aber so lehrreich und wichtig ist, dass wir sie zumindest kurz in der Vorlesung besprechen wollen. Die Lösungsidee liegt nahe: Wir schreiben

$$|\psi(0)\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k |k\rangle \quad \text{mit} \quad \psi_k = \int dx e^{-ikx} \psi(x, 0) \quad (4.41)$$

und folgern

$$|\psi(t)\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} = \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k e^{-i\hbar k^2 t/2m} |k\rangle. \quad (4.42)$$

Die Fourier-Koeffizienten zur Zeit t sind also

$$\psi_k(t) = \psi_k e^{-i\hbar k^2 t/2m}, \quad (4.43)$$

und wir erhalten die Wellenfunktion durch Umkehrung der Fourier-Transformation:

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k(t) e^{ikx}. \quad (4.44)$$

Man muss also nur Fourier-transformieren, multiplizieren mit dem Phasenfaktor der Zeitentwicklung und wieder (Rück-)Fourier-Transformieren. Man braucht im ersten Schritt die Formel

$$\int dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\pi/\alpha} e^{\beta^2/4\alpha}. \quad (4.45)$$

Diese leitet man durch quadratische Ergänzung und anschließende Variablensubstitution her. Wichtig ist, dass dies auch erlaubt ist, wenn α und β komplex werden: Man kann das entweder durch analytische Fortsetzung des reellen Ergebnisses rechtfertigen oder, besser, durch Deformation des Integrationswegs ins Komplexe (siehe Funktionentheorie).

Das Zwischenergebnis

$$\psi_k = (\pi/a)^{1/4} e^{-k^2/2a}, \quad (4.46)$$

ist an sich sehr interessant: Es zeigt, dass die Fourier-Transformation einer Gaußkurve wieder eine Gaußkurve ist, und zwar mit inverser Breite. Je enger wir also unser Teilchen ursprünglich lokalisiert haben, desto höhere k (bzw. Impulse p) tragen in der Zerlegung in die Eigenvektoren $|k\rangle$ bei.

Schließlich finden wir

$$\psi(x, t) = \frac{(a/\pi)^{1/4}}{\sqrt{1 + iat\hbar/m}} \exp\left(-\frac{ax^2/2}{1 + iat\hbar/m}\right) \quad (4.47)$$

und

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{(a/\pi)^{1/2}}{\sqrt{1 + a^2 t^2 \hbar^2/m^2}} \exp\left(-\frac{ax^2}{1 + a^2 t^2 \hbar^2/m^2}\right). \quad (4.48)$$

Wir sehen, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eine immer breiter werdende Gaußkurve ist. Bei großen Zeiten wächst die Breite mit einer Geschwindigkeit $\sim \hbar\sqrt{a}/m$, also um so schneller, je enger wir am Anfang lokalisiert hatten.

4.5 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass es schwierig zu sein scheint, einen Zustand mit präzise definiertem x zu konstruieren, ohne dass gleichzeitig die Definiertheit von p sehr schlecht wird. Wir haben dies schlicht als Eigenschaft der Fourier-Transformation erlebt: enge Gaußkurve wird zu breiter Gaußkurve. Dies war eine erste Begegnung mit der Unschärferelation, die wir nun (gleich für zwei allgemeine Observable A und B statt x und p) formulieren wollen.

Wir wollen uns für den Rest dieses Abschnitts auf einen beliebigen aber fest gewählten Zustand $|\psi\rangle$ einschränken. Wir schreiben zur Kürze A statt \hat{A} etc. und definieren

$$\bar{A} \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle \equiv \langle A \rangle \quad \text{sowie} \quad \bar{B} \equiv \langle \psi | B | \psi \rangle \equiv \langle B \rangle. \quad (4.49)$$

Die Abweichung von A vom Erwartungswert \bar{A} wird durch $(A - \bar{A})$ gemessen, aber der Erwartungswert davon ist per Definition Null und somit kein Maß für die Unbestimmtheit oder Unschärfe von A . Ein solches Maß liefert bekannterweise der Erwartungswert des Quadrats,

$$\langle (A - \bar{A})^2 \rangle \equiv (\Delta A)^2, \quad (4.50)$$

was man auch als **Varianz** bezeichnet (bzw. die Wurzel daraus als **Standardabweichung** oder Unschärfe). Wir wollen die Varianz von A (immer im Zustand $|\psi\rangle$) etwas anders schreiben:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \bar{A})(A - \bar{A}) | \psi \rangle = \left\| (A - \bar{A}) | \psi \rangle \right\|^2. \quad (4.51)$$

Hier haben wir im letzten Schritt benutzt, dass A hermitesch ist. Die Unschärfen von A und B sind also die Normen der Vektoren

$$|\psi_A\rangle \equiv (A - \bar{A}) | \psi \rangle \quad \text{und} \quad |\psi_B\rangle \equiv (B - \bar{B}) | \psi \rangle. \quad (4.52)$$

Die zentrale Behauptung der Unschärferelation ist nun eine untere Schranke an das Produkt dieser beiden Unschärfen – wird eine kleiner, so muss die andere zwingend größer werden. Wenn man so eine Schranke sucht, dann drängt sich die **Schwarzsche Ungleichung**

$$\left\| |\psi_A\rangle \right\| \left\| |\psi_B\rangle \right\| \geq |\langle \psi_A | \psi_B \rangle| \quad (4.53)$$

geradezu auf. Wir lesen daraus ab, dass

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle \psi_A | \psi_B \rangle| \quad (4.54)$$

und müssen demnach nur noch den Betrag des rechts stehende Skalarprodukts nach unten einschränken. Dazu rechnen wir

$$\langle \psi_A | \psi_B \rangle = \langle \psi | (A - \bar{A})(B - \bar{B}) | \psi \rangle = \langle \psi | AB | \psi \rangle - \bar{A}\bar{B}. \quad (4.55)$$

Die nächste Idee ist, den Betrag dieser komplexen Zahl nach Pythagoras durch den Betrag ihres Imaginärteils nach unten einzuschränken:

$$\begin{aligned} |\langle \psi_A | \psi_B \rangle| &\geq \left| \frac{1}{2} \left[\langle \psi | AB | \psi \rangle - \bar{A}\bar{B} \right] - \text{c.c.} \right| = \frac{1}{2} \left| \langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | AB | \psi \rangle^* \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | BA | \psi \rangle \right| = \frac{1}{2} \left| \langle [A, B] \rangle \right|. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Damit haben wir die **Heisenbergsche Unschärferelation**

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \left| \frac{1}{2} \langle [A, B] \rangle \right| \quad (4.57)$$

hergeleitet. Im Fall von x und p liefert dies natürlich eine besonders mächtige, **zustandsunabhängige** Schranke, weil der rechts stehende Kommutator gerade eine Zahl und damit in keinem Zustand Null ist:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2. \quad (4.58)$$

Gaußkurven saturieren diese Ungleichung.

Allgemeiner lässt sich dazu folgendes sagen: Wenn zwei Observable gleichzeitig diagonalisierbar sind, dann verschwindet ihr Kommutator (offensichtlicherweise - Diagonalmatrizen kommutieren immer). In diesem Fall gibt es eine ganze Basis von Zuständen, in denen beide Observable scharf definierte Werte haben. Die Unschärferelation macht keine Aussage.

Bemerkenswert ist noch, dass das Verschwinden des Kommutators (zumindest im endlichdimensionalen Fall) hinreichend für die gleichzeitige Diagonalisierbarkeit ist. Das ist ein einfacher Fakt aus der linearen Algebra, den wir hier nicht beweisen (siehe z.B. [5]). Man spricht hier von **kompatiblen Observablen**.

Falls der Kommutator nicht verschwindet, dann macht die Unschärferelation eine Aussage über das Produkt der Unschärfen in Zuständen, in denen der Erwartungswert dieses Kommutators nicht Null ist. Im Fall sogenannter kanonisch konjugierter Variablen (dazu später mehr) sind das **alle** Zustände, weil der Kommutator \hbar ist.

4.6 Der Potentialtopf

Ein besonders einfaches aber schönes und lehrreiches Kapitel ist das der stückweise konstanten Potentiale. Wir beginnen mit dem Potentialtopf (Abb. 7) und schreiben die zeitunabhängige Schrödingergleichung auf:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (4.59)$$

Dies stellen wir um zu

$$\psi'' = -(2m/\hbar^2)(E - V)\psi. \quad (4.60)$$

Wir konzentrieren uns zunächst auf den Fall $0 < E < V_0$ und haben somit

$$\text{Bereich I, III: } \psi'' = \kappa^2 \psi \quad , \quad \text{Bereich II: } \psi'' = -k^2 \psi, \quad (4.61)$$

wobei

$$\kappa = (1/\hbar)\sqrt{2m(V_0 - E)} \quad \text{und} \quad k = (1/\hbar)\sqrt{2mE}. \quad (4.62)$$

Die Lösungen sind offenkundig,

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_I e^{\kappa x} + B_I e^{-\kappa x} \\ \psi_{II} &= A_{II} \cos(kx) + B_{II} \sin(kx) \\ \psi_{III} &= A_{III} e^{\kappa x} + B_{III} e^{-\kappa x}, \end{aligned} \quad (4.63)$$

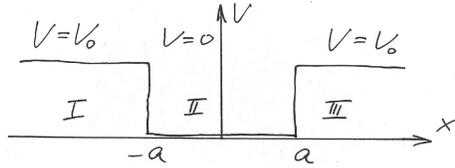


Abbildung 7: Potentialtopf.

wobei wir \cos/\sin statt $e^{\pm ikx}$ gewählt haben, weil das in diesem speziellen Fall bequemer ist. Aber was machen wir an den Anschlussstellen?

Dazu wollen wir uns vom konkreten Fall trennen und allgemeiner eine Differentialgleichung der Form

$$\psi'' = \alpha(x)\psi \quad (4.64)$$

betrachten, bei der α an einer gewissen Stelle, zur Einfachheit z.B. bei $x = 0$, springt. Wir integrieren die Gleichung und lassen ϵ klein werden:

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi''(x) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \alpha(x)\psi(x) \Rightarrow \psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) \simeq \alpha(0_-)\psi(0_-)\epsilon + \alpha(0_+)\psi(0_+)\epsilon \sim \epsilon. \quad (4.65)$$

Hier haben wir angenommen, dass α und ψ zumindest wohldefinierte linke und rechte Grenzwerte bei $x = 0$ haben. Im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ folgt, dass der linke und rechte Grenzwert von ψ' übereinstimmen, ψ' **also stetig ist**.

Formalerer Einschub: Man könnte obiger Herleitung widersprechen, indem man bemerkt, dass wir ja links ψ'' integrieren, es also *definiert* sein muss. Damit ist klar, dass ψ' differenzierbar und also stetig ist. Wir hätten unser Resultat also bereits als Annahme hineingesteckt. Die Kritik, wenn auch formal begründet, macht obige Herleitung aber nicht nutzlos. Man muss sie, wenn man sauberer arbeiten will, nur präziser durchführen: Dazu fängt man mit einer ‘geglätteten’ Stufenfunktion für $\alpha(x)$ an und nimmt erst am Ende den Grenzwert hin zu einer echten Stufe (mit Unstetigkeit der Funktion und divergenter erster Ableitung). Solange die Stufe noch ‘geglättet’ ist, kann man obige Rechnung problemlos durchführen. Das Resultat sagt nicht einfach: ψ' ist stetig. Es sagt: Im Grenzübergang von geglätteter zu echter Stufe in α , geht die Funktion ψ' auch gegen eine gewisse Grenzfunktion ψ' , und diese ist stetig. Der praktische Nutzen ist, dass man von nun an immer gleich mit der echten Stufe rechnen kann und nicht jedes Mal einen Grenzübergang von einer glatten, stufenartigen Funktion zu einem echten Stufen-Grenzwert machen muss. (Einschub endet.)

Damit können wir die sechs Koeffizienten A und B bestimmen. Zunächst bemerken wir, dass wir O.B.d.A. nur reelle Lösungen und somit nur reelle Koeffizienten betrachten können. In der Tat: unsere Gleichung ist reell und wir können jede komplexe Lösung in Ihren Real- und Imaginärteil zerlegen, was jeweils Lösungen sein werden.

Als nächstes bemerken wir, dass $B_I = A_{III} = 0$ damit die Lösung im Unendlichen nicht divergiert. (Das wäre wesentlich schlimmer als eine ins Unendliche laufende oder von dort kommende Welle - wir könnten das nicht interpretieren.) Damit haben wir $2 + 2 = 4$ Anschlussbedingungen,

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), \quad \psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a), \quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \quad \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a). \quad (4.66)$$

Dies sind dann naiv 4 Gleichungen für $6 - 2 = 4$ Unbekannte und man wäre fertig. Doch das ist ein voreiliger Schluss. Die globale Normierung ist nämlich wegen der Homogenität der Gleichung und der Bedingungen nicht relevant und kann nicht bestimmt werden. Zum Beispiel könnte man schlicht $A_{II} = 1$ setzen und dann nach Lösungen suchen. Man hat also de facto 4 Gleichungen für nur 3 Unbekannte und wird nur bei **diskreten Energien** Lösungen finden. Auf diese Art kommt es auch im Potentialtopf, so wie schon beim Oszillator, zur **Energiequantisierung**.

Wir überlassen die Rechnung dem Leser bzw. den Übungsgruppen (es ist praktisch, sich gerade und ungerade Lösungen getrennt anzusehen - dann ist die Analyse einfacher) und präsentieren hier nur den Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$. In diesem Grenzfall hat man $\kappa \rightarrow \infty$ und somit

$$\psi'_I(-a - 0)/\psi_I(-a - 0) \sim \kappa e^{-\kappa a}/e^{-\kappa a} \sim \kappa \rightarrow \infty. \quad (4.67)$$

Wir haben hier $B_I = 0$ benutzt. Falls ψ und ψ' endlich bleiben (was wir annehmen und was sich im Nachhinein auch als richtig erweisen wird), dann muss also $\psi_I(-a - 0) = 0$ gelten. Wegen der Stetigkeit folgt dann auch $\psi_{II}(-a + 0) = 0$. Ein analoges Argument liefert $\psi_{II}(a - 0) = 0$. Damit haben wir die Lösung:

$$\psi_{II} = A_{II} \cos(kx) + B_{II} \sin(kx), \quad (4.68)$$

mit den Randbedingungen $\psi_{II}(-a) = \psi_{II}(a) = 0$.

Das hätte man eigentlich auch erraten können: Bei $V_0 \rightarrow \infty$ wird das Potential außerhalb des Topfes jegliches Eindringen des Teilchens (und damit der Wellenfunktion) in den Bereich außerhalb $[-a, a]$ verhindern. Zum expliziten Auffinden des Spektrums ist es bequem, sich klarzumachen, dass wir getrennt nach symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen (bzgl. $x \rightarrow -x$) suchen können. In der Tat, gibt uns jemand eine beliebige Lösung ψ , so können wir diese gemäß

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \left[(\psi(x) + \psi(-x)) + (\psi(x) - \psi(-x)) \right] \quad (4.69)$$

sofort als Summe einer symmetrischen und einer antisymmetrischen schreiben. Das liegt daran, dass unsere Differentialgleichung symmetrisch ist, also mit $\psi(x)$ immer auch $\psi(-x)$ zur Lösung hat.

Da Cosinus und Sinus symmetrisch bzw. antisymmetrisch sind, müssen wir jetzt nur noch alle Cosinus- und Sinus-Funktionen finden, die bei a verschwinden (vgl. Abb. 8). Diese sind

$$\psi_{II,n}^c(x) = (1/\sqrt{a}) \cos((2n + 1)\pi x/2a) \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.70)$$

sowie

$$\psi_{II,n}^s(x) = (1/\sqrt{a}) \sin((n\pi x/a)) \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.71)$$

Das entsprechende diskrete Energiespektrum ergibt sich aus den zu diesen Lösungen gehörenden k -Werten (gleich für beide Lösungsserien zusammen):

$$k_j = j\pi/(2a) \quad \Rightarrow \quad E_j = k_j^2 \hbar^2 / 2m = j^2 \pi^2 \hbar^2 / (8ma^2), \quad j = 1, 2, \dots \quad (4.72)$$

Diese Lösungen bilden eine Basis, aber natürlich nur auf dem Intervall $[-a, a]$ und nicht, wie beim Oszillator, auf \mathbb{R} .

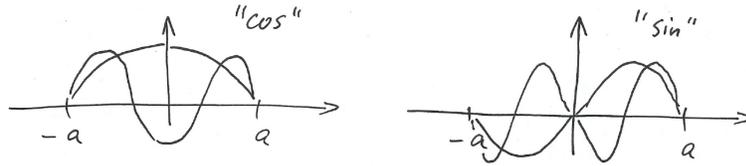


Abbildung 8: Einige Lösungen im unendlich tiefen Potentialtopf.

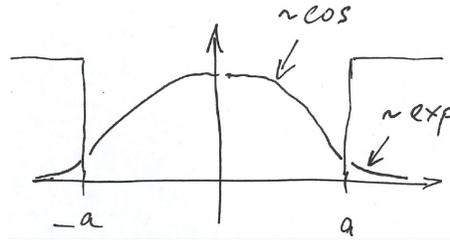


Abbildung 9: Grundzustand im endlich tiefen Potentialtopf.

Es sollte jetzt auch klar sein, was in einem sehr tiefen aber endlichen Topf passiert: Der Koeffizient des Exponential-Teils wird immer noch sehr klein, aber nicht exakt Null sein. Es kommt zu einem geringfügigen Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich (Abb. 9).

Beim endlichen Topf gibt es natürlich auch noch Lösungen im Energiebereich $E > V_0$, den wir bisher ausgeschlossen hatten. Dort oszillieren die Lösungen in allen drei x -Bereichen. Das Energiespektrum ist nicht diskret sondern kontinuierlich - die physikalische Situation ähnelt mehr der des freien als des gebundenen Teilchens. Im Gegensatz zum freien Teilchen hat jedoch z.B. eine von links kommende Welle eine endliche Wahrscheinlichkeit, am Potentialtopf reflektiert zu werden (klassisch würde man immer ein Hindurchlaufen erwarten). Wir besprechen das hier nicht genauer, weil es analog zum nun folgendem Beispiel der Potentialschwelle ist.

4.7 Tunneln am Beispiel der Potentialschwelle

Formal ist alles so wie beim Potentialtopf, nur dass jetzt $V(x) = V_0$ für $x \in [-a, a]$ und Null außerhalb (Abb. 10). Wir konzentrieren uns auf den Fall $0 < E < V_0$, so dass der Schwellenbereich klassisch unzugänglich ist. Wir haben

$$\text{Bereich I,III: } \psi'' = -k^2\psi \quad , \quad \text{Bereich II: } \psi'' = \kappa^2\psi, \quad (4.73)$$

wobei, wie oben,

$$k = (1/\hbar)\sqrt{2mE} \quad \text{und} \quad \kappa = (1/\hbar)\sqrt{2m(V_0 - E)}. \quad (4.74)$$

Die Lösungen sind offenkundig,

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \\ \psi_{II} &= A_{II} e^{\kappa x} + B_{II} e^{-\kappa x} \\ \psi_{III} &= A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

In diesem Fall sind Exponentialfunktionen praktischer als Sinus und Cosinus. Das Zusammensetzen der Lösungen mittels der Stetigkeitsforderung für ψ und ψ' bleibt im Grundsatz unverändert.

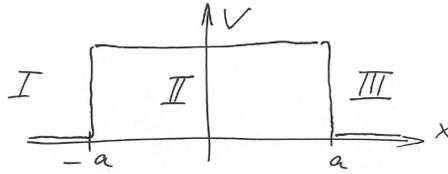


Abbildung 10: Potentialschwelle.

Die physikalische Interpretation und damit auch die Details des Zusammensetzens sind jedoch vom Potentialtopf-Fall völlig verschieden. Auch bei kleinen Energien haben wir es jetzt für $x \rightarrow \pm\infty$ mit einem nicht normierbaren Verhalten zu tun. Es gibt keine gebundene Zustände sondern nur Wellen. Es ist entscheidend, die richtige physikalische Frage zu stellen.

Die richtige Frage ist: Wenn eine Welle (z.B. von links) einläuft, mit welcher Wahrscheinlichkeit geht das Teilchen durch die Barriere? Klassisch passiert dies nie, quantenmechanisch (wie wir gleich sehen werden) hingegen schon. Das Wichtige an dieser Art der Fragestellung ist, dass wir sofort sehen, dass wir im Bereich III nicht beide Lösungen A und B brauchen. In der Tat, wir erkennen am Eigenwert von \hat{p} , dass A_{III} der nach rechts auslaufenden und B_{III} der von rechts einlaufenden Welle entspricht. Unsere physikalische Fragestellung impliziert also $B_{III} = 0$. Jetzt ist alles ganz einfach: Wir wählen E und A_{III} beliebig aber fest. Das legt $\psi_{III}(a+0)$ und $\psi'_{III}(a+0)$ fest. Die beiden Anschlußbedingungen bei $x = a$ fixieren eindeutig die beiden Koeffizienten A_{II} und B_{II} . Damit kennen wir insbesondere ψ_{II} und dessen Ableitung bei $-a$ und dies legt wiederum A_I und B_I fest. So finden wir in einer konzeptionell sehr einfachen Weise eine Lösung zu jedem E . (Wir wollten uns auf $E < V_0$ konzentrieren, aber die beschriebene Methode erfordert dies gar nicht. Bei hohem E funktioniert alles genauso, es allerdings kein 'Tunneln'.)

Jetzt zur Interpretation: Aus unserer Diskussion der Wahrscheinlichkeitsstromdichte wissen Sie sicher noch, dass für eine ebene Welle

$$j = (p/m)|\psi|^2. \quad (4.76)$$

Im Bereich I haben wir zwei Beiträge zu diesem Strom, einen nach rechts laufenden $\sim |A_I|^2$ und einen nach links laufenden (den reflektierten) $\sim |B_I|^2$. Im Bereich III gibt es nur A_{III} und den auslaufenden Strom $\sim |A_{III}|^2$. Daraus ergeben sich der Transmissions- und Reflexions-Koeffizient

$$T = |A_{III}|^2/|A_I|^2 \quad \text{und} \quad R = 1 - T = |B_I|^2/|A_I|^2. \quad (4.77)$$

Die explizite Berechnung überlassen wir den Übungen.

Wir können jedoch, ohne viel Arbeit, zu einer Abschätzung des Ergebnisses im extremen Tunnelfall ($T \ll 1$) kommen. Dazu betrachten wir das in Abb. 11 grob skizzierte Zusammensetzen der Lösungen. Wir fangen, wie oben beschrieben, von rechts (also bei $x = a$) an. Dort muss die auslaufende Welle mit zwei Exponentialfunktionen gematched werden. Dieses Problem hängt offensichtlich nicht davon ab, wie wir a wählen - wir könnten, ohne die Physik zu ändern, die Potentialschwelle bei im Bereich $x \in [-2a, 0]$ oder sonstwo vorgeben. Mit anderen Worten, wir

erwarten, dass das zu bestimmende Verhältnis $|\psi_{II}^A(a-0)|/|\psi_{II}^B(a-0)|$ eine Zahl der Ordnung Eins ist - es gibt in diesem Problem keinen besonders kleinen oder großen Parameter.⁸

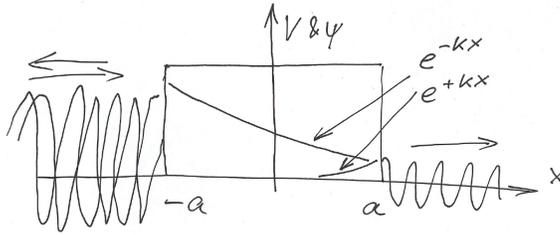


Abbildung 11: Sisse der beitragenden Lösungen beim Tunneln.

Wenn wir die so zusammengesetzte Lösung $\psi_{II} = \psi_{II}^A + \psi_{II}^B$ nun nach links fortsetzen, so wird ψ_{II}^A wegen des exponentiellen Abfalls völlig irrelevant. Hingegen wächst ψ_{II}^B um einen Faktor $e^{2\kappa a}$ und bestimmt durch die zweite Anschlussbedingung dann die Größenordnung von ψ_I^A und ψ_I^B . Letztere sind also um einen Faktor $e^{2\kappa a}$ größer als die Amplitude der auslaufenden Welle, mit der wir gestartet sind. Dass beide etwa gleichgroß sind folgt unmittelbar aus der Kleinheit der auslaufenden Welle und der Erhaltung der Wahrscheinlichkeiten. Wir haben also gezeigt, dass die (für die typische Tunnel-Unterdrückung entscheidende) a -Abhängigkeit der Transmission durch

$$T \sim e^{-4\kappa a} \quad (4.78)$$

gegeben ist.

Wir können sogar noch allgemeiner sein und eine beliebig geformte Schwelle betrachten. Entscheidend für unser Ergebnis war, dass wir für jedes durch Tunneln zu überwindende Intervall Δx eine Unterdrückung $e^{-\kappa\Delta}$ in der Amplitude erhalten. Der Koeffizient κ ist nun aber im Allgemeinen ortsabhängig, wenn $V(x)$ sich innerhalb der Schwelle ändert. Wenn wir die Schwelle in viele kleine Intervalle zerlegen und die exponentiellen Unterdrückungsfaktoren multiplizieren, erhalten wir im Exponenten eine Summe und im Riemannschen Grenzwert

$$T \sim \exp \left[-2 \int_{\text{Schwelle}} \frac{dx}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)} \right]. \quad (4.79)$$

Eine sauberere Rechtfertigung dieser Abschätzung geschieht im Rahmen der WKB-Näherung (nach Wentzel, Kramers und Brillouin), zu der wir später noch kommen.

5 Drehimpuls

5.1 Motivation aufgrund des Zentralkraftproblems

Eine sehr wichtige Aufgabe ist das Studium von Hamilton-Operatoren der Form

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r), \quad (5.1)$$

⁸Genauer gesagt gibt es den kleinen Parameter $k/\kappa \ll 1$, aber wir erwarten nicht, dass ψ_{II}^A/ψ_{II}^B mit diesem Parameter gegen Null (oder Unendlich) geht. Wenn dem so wäre, könnten wir zwei Anschlussbedingungen mit nur einer Funktion erfüllen - das ist nicht plausibel und geschieht auch nicht.

wobei

$$\bar{p} = -i\hbar\nabla \quad \text{und} \quad r = |\bar{x}| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}. \quad (5.2)$$

Zum Beispiel ist das Spektrum des Wasserstoff-Atoms das Ergebnis der Diagonalisierung eines solchen Operators. Ebenso ist die Streuung am Zentralpotential ein Problem von diesem Typ. In der klassischen Mechanik waren die Rotationssymmetrie und damit die Drehimpulserhaltung entscheidend. Dies wird jetzt ebenso sein.

Genaugenommen erwarten wir aus unserer Diskussion der Translationssymmetrie des freien Teilchens eine sogar noch größere Bedeutung des Drehimpulses als im klassischen Fall: Beim freien Teilchen gehören zu den drei Erhaltungsgrößen \bar{p} drei Operatoren, und in der Quantenmechanik erzeugen diese als $\exp(i\bar{\epsilon}\bar{p})$ die Translationen. (Wir haben nur den 1d-Fall gesehen, aber der Übergang zu 3d ist leicht zu vollziehen.) Nunmehr gehören zur Drehsymmetrie (sie erinnern sich an die Gruppe $SO(3)$ und deren Generatoren) die drei Erhaltungsgrößen $\bar{L} = \bar{x} \times \bar{p}$. Wir erwarten, dass diese als Operator die Drehungen von Wellenfunktionen erzeugen. Wenn wir also die drei Operatoren \bar{L} diagonalisieren könnten, dann hätten wir Wellenfunktionen, die rotations-symmetrische Zustände beschreiben. Ganz so wird es nicht gehen, aber es ist prinzipiell die richtige Idee.

Wichtig ist: Die Differentialoperatoren \bar{L} werden die Wirkung (Darstellung) von $SO(3)$ auf dem Raum der Wellenfunktionen generieren.

5.2 Beziehung zum Laplace-Operator

Eine mit dem obigen verwandte aber vielleicht etwas direktere Motivation für das Studium des Drehimpulses \bar{L} ist die folgende: Wir brauchen klarerweise den Laplace-Operator

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = -\bar{p}^2/\hbar^2, \quad (5.3)$$

weil er in H vorkommt. Dieser steht nun aber in einer engen Beziehung zum skalaren Operator \bar{L}^2 . Um dies zu sehen, betrachten wir \bar{L} jetzt im Detail:

$$\bar{L} = \bar{x} \times \bar{p}, \quad L_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}. \quad (5.4)$$

Zunächst prüfen wir, dass \bar{L} wie erwartet hermitesch ist:

$$(\epsilon_{ijk} x_j p_k)^\dagger = \epsilon_{ijk} p_k x_j = \epsilon_{ijk} (x_j p_k - [x_j, p_k]) = \epsilon_{ijk} x_j p_k - \epsilon_{ijk} i\hbar \delta_{jk} = \epsilon_{ijk} x_j p_k. \quad (5.5)$$

Nun berechnen wir

$$\begin{aligned} \bar{L}^2 &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m = x_i p_j x_i p_j - x_i p_j x_j p_i = x_i (x_i p_j - i\hbar \delta_{ij}) p_j - (p_j x_i + i\hbar \delta_{ij}) x_j p_i \\ &= \bar{x}^2 \bar{p}^2 - 2i\hbar (\bar{x}\bar{p}) - p_j x_j (\bar{x}\bar{p}) = \bar{x}^2 \bar{p}^2 - 2i\hbar (\bar{x}\bar{p}) - (x_j p_j - 3i\hbar) (\bar{x}\bar{p}) \\ &= r^2 \bar{p}^2 - (\bar{x}\bar{p})^2 + i\hbar (\bar{x}\bar{p}). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Außerdem erinnern wir uns an die Kugelkoordinaten und an die Beziehung

$$\nabla = \bar{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \bar{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \bar{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (5.7)$$

Wir werden diese Formel später noch im Detail benutzen (und dort auch herleiten). Hier interessiert uns nur, dass die Projektion des Gradienten auf die \bar{x} -Richtung (bzw., was das Gleiche ist, die r -Richtung) $\partial/\partial r$ ist. Dies ist auch rein anschaulich sofort klar. Daraus liest man nun ab, dass

$$\bar{x}\bar{p} = -i\hbar\bar{x}\nabla = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \quad (5.8)$$

und

$$\bar{L}^2 = r^2\bar{p}^2 + \hbar^2 \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} \right]. \quad (5.9)$$

Da \bar{p}^2 im Wesentlichen der Laplace-Operator ist, haben wir diesen hiermit in \bar{L}^2 minus einen Term mit nur radialen Ableitungen umgeschrieben. Wir geben gleich den Hamilton-Operator in einer besonders kompakten Schreibweise an

$$H = \frac{\bar{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{1}{r^2} \bar{L}^2 \right] + V(r) \quad \text{wobei} \quad p_r \equiv -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (5.10)$$

Der hier eingeführte Operator p_r ist zur Koordinate r in Kugelkoordinaten kanonisch konjugiert: $[r, p_r] = i\hbar$ und (für passend gewählten Randbedingungen bei $r = 0$ und $r = \infty$) hermitesch.

Die obige Formel für H ist ein sehr wichtiges Resultat: Sie sagt, dass die gesamte Winkelabhängigkeit der Eigenfunktionen aus der Kenntnis der Eigenfunktionen von \bar{L}^2 folgen wird. Dies wird sehr viel einfacher sein, als etwa die bekannte Formel für den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten zu benutzen und sich dann mit einer partiellen Differentialgleichung in drei Variablen zu befassen (obwohl das immer noch besser wäre, als es ohne Beachtung der Symmetrie mit $\{x_i\}$ zu versuchen).

5.3 Die Drehimpulsalgebra

Es sollte jetzt klar sein, dass die Diagonalisierung von \bar{L}^2 eine für uns wichtige Aufgabe ist. Wir haben am harmonischen Oszillator gesehen, dass die Diagonalisierung von $H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ ohne viel Mühe aus der Analyse der Operator-Algebra von a und a^\dagger (ursprünglich x und p) folgte. Dies wiederholt sich hier, wobei der Startpunkt die Algebra der L_i ist.

Die L_i sind drei (Differential-)Operatoren auf \mathcal{H} und spannen somit einen Vektorraum auf. Ergänzen wir diesen um die $\mathbb{1}$ sowie alle Produkte der L_i , so haben wir einen viel größeren Operatorraum, eine sogenannte Operator-Algebra. Dies ist eine konkrete Realisierung des abstrakten Algebra-Begriffs der Mathematik. In unserem konkreten Fall gelten in dieser Algebra bestimmte (Vertauschungs-)Relationen, so wie schon im einfacheren Fall der Heisenberg und der Auf-und-Absteiger-Algebren. Diese sind

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (\text{und zyklische Vertauschungen}) \quad (5.11)$$

oder, mit Indizes ($\{x, y, z\} \leftrightarrow \{1, 2, 3\}$):

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.12)$$

Sie erkennen natürlich die Lie-Algebra-Relationen der Generatoren von $SO(3)$, was wir nach dem oben über Symmetrien gesagten auch erwarten, aber wir müssen das formal prüfen. Um die Schreibarbeit zu begrenzen werden wir in Rest dieses Abschnitts größtenteils $\hbar = 1$ setzen.

Nunmehr betrachten wir zunächst den Kommutator von L_i mit \bar{x} (bzw. mit x_j für beliebiges j):

$$[L_i, x_j] = [\epsilon_{ikl}x_k p_l, x_j] = -\epsilon_{ikl}[x_j, x_k p_l]. \quad (5.13)$$

Des Weiteren erinnern wir uns, dass Kommutatoren allgemein eine ‘Distributivitäts-Eigenschaft’ erfüllen:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]. \quad (5.14)$$

Damit und mit den kanonischen Vertauschungsrelationen $[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0$ und $[x_i, p_j] = i\delta_{ij}$ finden wir

$$[L_i, x_j] = -\epsilon_{ikl}([x_j, x_k]p_l + x_k[x_j, p_l]) = -i\epsilon_{ikl}x_k\delta_{jl} = i\epsilon_{ijk}x_k. \quad (5.15)$$

Eine völlig analoge Rechnung zeigt, dass auch

$$[L_i, p_j] = i\epsilon_{ijk}p_k \quad (5.16)$$

gilt.

Wir erinnern uns, dass $\epsilon_{ijk} = (T_i)_{jk}$, wobei T_i die drei Generatoren der $SO(3)$ in der definierenden (Vektor-)Darstellung sind. Also ist die Art und Weise, wie die L_i durch Kommutator auf die Vektor-Operatoren \bar{x} und \bar{p} wirken, genau gleich der Wirkung von iT_i auf gewöhnliche Vektoren. Anders gesagt, die Wirkung von $-iL_i$ per Kommutator entspricht der Wirkung von T_i .

Nun betrachten wir

$$[-iL_i, L_j] = [-iL_i, \epsilon_{jkl}x_k p_l]. \quad (5.17)$$

Wegen der Distributivität des Kommutators ist dies die Summe der Wirkungen auf x und p . Diese entsprechen jeweils einer kleinen Drehung. Insgesamt wird also der Operator $x_k p_l$ gedreht, wie ein Tensor. Mit ϵ_{jkl} (was ein invarianter Tensor ist), haben wir daraus einen Vektor mit Index j gebaut. Dieser muss sich demnach bei Drehung von x und p auch wie ein Vektor transformieren:

$$[-iL_i, \epsilon_{jkl}x_k p_l] = (T_i)_{jm}(\epsilon_{mkl}x_k p_l) = \epsilon_{ijm}L_m. \quad (5.18)$$

Daraus folgt sofort $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$, wie behauptet.

5.4 Abstrakte Darstellungen der Drehimpulsalgebra

Wir haben bei all dem an die Differentialoperatoren L_i gedacht. Wir können aber auch anders herangehen und mit drei abstrakten Symbole L_i sowie dem abstrakten Symbol $\mathbb{1}$ starten. Bilden wir durch Nebeneinanderschreiben dieser Symbole beliebige Produkte davon (vorsicht, nicht vertauschen!) und betrachten auch alle Linearkombinationen solcher Produkte, so hat man eine abstrakte Algebra. Jetzt erklären wir, dass diese Produkte nicht alle unabhängig sind, sondern mittels der Relationen $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$ ineinander umgewandelt werden können. Das gibt uns eine kleinere (immer noch abstrakte) Algebra. Die Differentialoperatoren sind eine **Darstellung dieser abstrakten Algebra** auf $L_2(\mathbb{R}^3)$. Natürlich erkennen Sie, dass die Algebra in ihrem (in

den L_i) linearen Teil eine Lie-Algebra beinhaltet. Diese ist, bis auf den Faktor $-i/\hbar$, gerade die Lie-Algebra von $SO(3)$. Auch diese ist somit auf $L_2(\mathbb{R}^3)$ dargestellt.

Wir werden jetzt durch rein algebraische Manipulationen mit einer angenommenen Wirkung der L_i auf einem Hilbert-Raum etwas über mögliche Darstellungen der L_i -Algebra lernen. Es gibt zwei Arten, das zu lesen. Erstens, als Analyse einfacherer Unterdarstellungen ('Ausreduktion') der zugrundeliegenden riesigen Darstellung auf $L_2(\mathbb{R}^3)$. Zweitens, als abstrakte Analyse möglicher Darstellungen der Abstrakten L_i -Algebra.

Wir wollen unsere Darstellungen in einer Eigenvektorbasis beschreiben, aber wir wissen schon, dass die L_i wegen ihrer Vertauschungsrelationen paarweise inkompatible Operatoren sind. Wir können also z.B. L_z diagonalisieren, aber nicht gleichzeitig $L_{x,y}$. Es ist jedoch möglich und bequem, gleichzeitig $L^2 \equiv \bar{L}^2$ als diagonal anzunehmen, weil

$$[L_z, L^2] = 0. \quad (5.19)$$

Letzteres ist klar, weil L_z den Vektor \bar{L} um die z -Achse dreht, dessen Betrags-Quadrat aber natürlich unverändert lässt. Man kann es natürlich auch schlicht nachrechnen.

Wie sich zeigen wird, ist es nützlich, mit den Operatoren

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y \quad (\text{wobei } L_+ = (L_-)^\dagger) \quad (5.20)$$

zu arbeiten (welche, wie gesagt, nicht diagonal sein werden). Auch diese vertauschen mit L^2 :

$$[L_{\pm}, L^2] = 0. \quad (5.21)$$

Des Weiteren werden wir die leicht nachzurechnenden Relationen (wir benutzen immer noch $\hbar = 1$)

$$[L_+, L_-] = 2L_z \quad (5.22)$$

sowie

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm L_{\pm}. \quad (5.23)$$

brauchen.

Um letztere Beziehung zu würdigen, erinnern wir uns an den Oszillator, mit seinen Auf- und Absteigern a^\dagger und a sowie dem Besetzungszahloperator $N = a^\dagger a$. Dort galt

$$[N, a] = -[a, a^\dagger a] = -[a, a^\dagger]a = -a \quad \text{und} \quad [N, a^\dagger] = +a^\dagger, \quad (5.24)$$

und wir hatten gesehen, dass a^\dagger und a die Eigenwerte von N erhöhen und senken. Aufgrund der Ähnlichkeit von (5.23) und (5.24) erwarten wir in der Drehimpulsalgebra das Gleiche.

Betrachten wir nun also eine beliebige Darstellung der Drehimpulsalgebra und einen Eigenvektor $|\lambda, m\rangle$ von L^2 und L_z (einen solchen muss es immer geben), so dass

$$L^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle \quad \text{und} \quad L_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle. \quad (5.25)$$

Die beiden Vektoren $L_{\pm}|\lambda, m\rangle$ haben den gleichen L^2 -Eigenwert:

$$L^2 L_{\pm}|\lambda, m\rangle = L_{\pm} L^2|\lambda, m\rangle = \lambda L_{\pm}|\lambda, m\rangle. \quad (5.26)$$

Der Eigenwert zu L_z ändert sich jedoch in der oben vorhergesagten Weise:

$$L_z L_{\pm} |\lambda, m\rangle = (L_{\pm} L_z \pm L_{\pm}) |\lambda, m\rangle = (m \pm 1) L_{\pm} |\lambda, m\rangle. \quad (5.27)$$

Wenn wir die Konvention benutzen wollen, dass $|\lambda, m\rangle$ ganz allgemein ein normierter Eigenvektor zu L^2 und L_z mit den entsprechenden Eigenvektoren ist, so müssen wir schreiben

$$L_{\pm} |\lambda, m\rangle = A_{\lambda, m}^{\pm} |\lambda, m \pm 1\rangle, \quad (5.28)$$

wobei der uns noch unbekannt Vorfaktor A die Normierung sicherstellt.

Wir haben gezeigt, dass es eine ganze Leiter von Eigenvektoren mit gleichem L^2 -Eigenwert und sich jeweils um Eins unterscheidenden L_z -Eigenwerten gibt. Man macht sich leicht klar, dass diese Leiter (im Gegensatz zum harmonischen Oszillator) nach oben und nach unten hin beschränkt ist. In der Tat, es gilt

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = (L_+ L_- + L_- L_+)/2 + L_z^2 \quad (5.29)$$

und somit

$$\begin{aligned} \langle \psi | L^2 | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \langle \psi | L_+ L_- | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | L_- L_+ | \psi \rangle + \langle \psi | L_z^2 | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \|L_- |\psi\rangle\|^2 + \frac{1}{2} \|L_+ |\psi\rangle\|^2 + \langle \psi | L_z^2 | \psi \rangle \geq \langle \psi | L_z^2 | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Der Eigenwert zu L_z^2 kann also den zu L^2 dem Betrag nach nie übertreffen.

Um festzustellen, wo genau die Leiter abbricht, berechnen wir $A_{\lambda, m}^{\pm}$ aus dem Betragsquadrat von (5.28). Dazu schreiben wir zunächst

$$|A_{\lambda, m}^{\pm}|^2 = \langle \lambda, m | L_{\mp} L_{\pm} | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | \frac{1}{2} ([L_{\mp}, L_{\pm}] + \{L_{\mp}, L_{\pm}\}) | \lambda, m \rangle, \quad (5.31)$$

und dann, mittels (5.29),

$$|A_{\lambda, m}^{\pm}|^2 = \langle \lambda, m | (\mp L_z + L^2 - L_z^2) | \lambda, m \rangle = \lambda - m(m \pm 1). \quad (5.32)$$

Bezeichnen wir nun mit m_{\pm} die oberste und unterste Sprosse unserer Leiter und mit $n = m_+ - m_-$ die Zahl der Schritte von ganz unten nach ganz oben. Damit gilt also

$$L_+ |\lambda, m_+\rangle = 0 \quad \text{und} \quad L_- |\lambda, m_-\rangle = 0. \quad (5.33)$$

Unsere Formel für $|A_{\lambda, m}^{\pm}|^2$ bestimmt nun aber gerade das Betragsquadrat dieser beiden Vektoren – sie muss also für $m = m_{\pm}$ jeweils Null ergeben:

$$\lambda - m_+(m_+ + 1) = 0 \quad \text{und} \quad \lambda - m_-(m_- - 1) = 0. \quad (5.34)$$

Mit $m_+ = m_- + n$ folgt

$$(m_- + n)(m_- + n + 1) = m_-(m_- - 1) \quad \Rightarrow \quad m_- = -n/2. \quad (5.35)$$

Jetzt sehen wir, dass $m_+ = m_- + n = n/2$ wodurch unsere Leiter symmetrisch bezüglich der Null ist. Für den L^2 -Eigenwert haben wir

$$\lambda = m_+(m_+ + 1) = -m_-(-m_- + 1). \quad (5.36)$$

Es ist nun üblich, die soeben gefundenen Leitern bzw. Darstellungen etwas anders zu parametrisieren. Man führt die Quantenzahl

$$l = m_+ = -m_- \quad (5.37)$$

ein, welche (je nach n) halb- oder ganzzahlig ist und den L^2 -Eigenwert parametrisiert:

$$\lambda = l(l + 1). \quad (5.38)$$

Wir wechseln auch die Notation für die Eigenvektoren gemäß

$$|\lambda, m\rangle \rightarrow |l, m\rangle, \quad (5.39)$$

so dass

$$L^2|l, m\rangle = l(l + 1)|l, m\rangle \quad \text{und} \quad L_z|l, m\rangle = m|l, m\rangle. \quad (5.40)$$

Wie wir gezeigt haben, gilt

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{l(l + 1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle. \quad (5.41)$$

Die möglichen Darstellungen sind

$l = 0$:	$m = 0$	(eindimensionale, triviale Darstellung)	
$l = 1/2$:	$m \in \{-1/2, 1/2\}$	Spin 1/2	
$l = 1$:	$m \in \{-1, 0, 1\}$	Spin 1	(5.42)
$l = 3/2$:	$m \in \{-3/2, -1/2, 1/2, 3/2\}$	Spin 3/2	

usw.usf.

Damit haben wir nicht nur das physikalische Problem der Klassifikation aller Darstellungen der Drehimpulsalgebra gelöst, sondern (offensichtlich) auch das der Klassifikation aller Darstellungen von $\text{Lie}(SO(3))$. Darstellungen von Lie-Gruppe und Lie-Algebra stehen nun in einer Eins-zu-Eins-Korrespondenz. Für uns ist dies schlicht die Exponentiation von Matrizen. Wir haben also auch die Darstellungstheorie der Gruppe $SO(3)$ verstanden. Eine ganz ähnliche algebraische Analyse führt zur Klassifikation aller Lie-Gruppen und deren Darstellungen - die Ähnlichkeit basiert darauf, dass all diese Gruppen und Algebren im Wesentlichen aus vielen $SO(3)$ -Gruppen und Algebren (als Unter-Lie-Algebren) aufgebaut sind.

Zum Schluss sei noch betont, dass Sie \hbar stets wieder einführen können, indem Sie sich daran erinnern, dass der Drehimpuls die Dimension einer Wirkung hat, also

$$L^2|l, m\rangle = l(l + 1)\hbar^2|l, m\rangle \quad \text{und} \quad L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle, \quad \text{etc.} \quad (5.43)$$

5.5 Darstellung durch Funktionen auf der Sphäre

Als nächstes wollen wir sehen, ob und wie die oben allgemein konstruierten Darstellungen in der uns eigentlich primär interessierenden riesigen Darstellung auf $L_2(\mathbb{R}^3)$ vorkommen. Dies entspricht in der Analyse des Oszillators dem Schritt, in dem wir eine konkrete Wellenfunktion $\psi_0(x)$ gesucht haben, welche von a (als Differentialoperator) vernichtet wird. Daraus konnten wir dann mit den a^\dagger alle anderen Wellenfunktionen (und dabei nebenbei die Hermite-Polynome) gewinnen. Hier werden wir mit den gleichen Methoden, der Darstellung von [13] folgend, auf die Kugelflächenfunktionen stoßen.

Wegen der $SO(3)$ -Symmetrie unseres Problems liegt es nahe, ein Koordinatensystem zu benutzen, welches eine Abtrennung der im Moment unwichtigen radialen Koordinate r ermöglicht. Dazu sind natürlich die Kugelkoordinaten (Abb. 12) prädestiniert:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta. \quad (5.44)$$

Sie sind ein Spezialfall allgemeiner krummliniger Koordinaten ξ_i , welche wie oben durch $x_i = x_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ definiert werden.

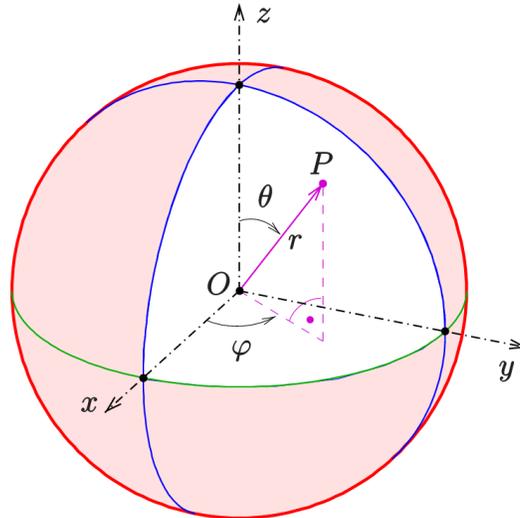


Abbildung 12: Kugelkoordinaten (aus Wikipedia).

In unserem Fall ist $\{x_i\} = \{x, y, z\}$ und $\xi_i = \{r, \theta, \varphi\}$. Es wird gleich nützlich sein, die Vektoren $\partial \bar{x} / \partial \xi_i$ und die entsprechenden Einheitsvektoren explizit zu kennen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{x}}{\partial r} &= (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \\ \frac{\partial \bar{x}}{\partial \theta} &= r (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta) \\ \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varphi} &= r (-\sin \theta \sin \varphi, \sin \theta \cos \varphi, 0), \end{aligned} \quad (5.45)$$

sowie

$$\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial r} \right| = 1, \quad \left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \theta} \right| = r, \quad \left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varphi} \right| = r \sin \theta, \quad (5.46)$$

und schließlich

$$\begin{aligned}
\bar{e}_r &\equiv \frac{\partial \bar{x}}{\partial r} \left(\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial r} \right| \right)^{-1} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \\
\bar{e}_\theta &\equiv \frac{\partial \bar{x}}{\partial \theta} \left(\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \theta} \right| \right)^{-1} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta) \\
\bar{e}_\varphi &\equiv \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varphi} \left(\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varphi} \right| \right)^{-1} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0).
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Die Formel, die wir nun brauchen werden (und oben schon angegeben und benutzt haben), ist die für den Gradienten in der Basis der \bar{e}_{ξ_i} . Dazu berechnen wir

$$\bar{e}_{\xi_i} \nabla = \left(\bar{e}_{\xi_i} \right)_j \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial x_j}{\partial \xi_i} \left(\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \xi_i} \right| \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial x_j} = \left(\left| \frac{\partial \bar{x}}{\partial \xi_i} \right| \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_i}, \tag{5.48}$$

wobei wir im letzten Schritt die Kettenregel benutzt haben. Damit kann man sich auf (5.46) berufen und findet

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \tag{5.49}$$

Jetzt wollen wir (zur Einfachheit wieder $\hbar = 1$)

$$\bar{L} = -i \bar{x} \times \nabla = -i r \bar{e}_r \times \left(\bar{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \bar{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \bar{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \tag{5.50}$$

berechnen. Wir lesen aus Abb. 12 ab, dass $\{\bar{e}_r, \bar{e}_\theta, \bar{e}_\varphi\}$ ein Rechtssystem bilden, so dass

$$\bar{L} = -i \left(\bar{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \bar{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \tag{5.51}$$

Wir bemerken an dieser Stelle, dass die Koordinate r wie erwartet (da \bar{L} Drehungen generiert) völlig verschwunden ist. Schließlich kehren wir mittels (5.47) noch zu kartesischen Koordinaten zurück:

$$\begin{aligned}
L_x &= i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_y &= i \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_z &= i \left(-\frac{\partial}{\partial \varphi} \right).
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Die jetzt offensichtlich werdende Einfachheit von L_z ist natürlich der Grund dafür, dass wir in der algebraischen Analyse L_z stengelassen und die Auf- und Absteiger aus L_x und L_y gebaut haben. Letztere ergeben sich explizit gemäß

$$L_\pm = i \left((\sin \varphi \mp i \cos \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \tag{5.53}$$

und somit

$$L_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (5.54)$$

Für die von uns gesuchten expliziten Wellenfunktionen $|lm\rangle$ machen wir nun den Ansatz

$$\psi_{lm} = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (5.55)$$

wobei wir $R(r)$ ab sofort ignorieren dürfen, da unsere Differentialoperatoren nicht auf r wirken. (Jedes $R(r)$ ist akzeptabel - im Moment geht es nur darum, dass die Y_{lm} die gewünschte Darstellung bilden.) Genaugenommen suchen wir keine Funktionen auf \mathbb{R}^3 sondern auf der Einheitssphäre, parametrisiert durch θ und φ .

Wenn wir für den Moment θ fixieren, haben wir es mit 2π -periodischen Funktionen von φ zu tun. Letztere lassen sich in eine Fourier-Reihe, also in eine Summe von $e^{ik\varphi}$ mit $k \in \mathbb{Z}$ zerlegen. Die von uns gesuchte (L^2, L_z) -Basis ist nun aber gerade eine Eigenvektorbasis zu $L_z = -i\partial/\partial\varphi$ mit Eigenwerten m . Damit ist klar, dass jedes unserer abstrakt gefundenen Basis-Elemente einem Term in der obigen Fourier-Reihe entspricht – zu jedem m gehört ein $e^{ik\varphi}$ mit $k = m$. Wir können also schreiben

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi}. \quad (5.56)$$

Für jedes l gilt für den niedrigsten m -Eigenwert, $m = -l$, die Beziehung

$$L_- Y_{lm}(\theta, \varphi) = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{lm}(\theta)e^{im\varphi} = 0 \quad (5.57)$$

bzw.

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \Theta_{l-l}(\theta) = 0. \quad (5.58)$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial \sin \theta}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \sin \theta} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial \sin \theta} \quad (5.59)$$

wird daraus

$$\left(-\cos \theta \frac{\partial}{\partial \sin \theta} + l \cot \theta \right) \Theta_{l-l}(\theta) = 0, \quad (5.60)$$

bzw.

$$\left(-\sin \theta \frac{\partial}{\partial \sin \theta} + l \right) \Theta_{l-l}(\theta) = 0. \quad (5.61)$$

Wir sehen, dass Θ_{l-l} homogen in $\sin \theta$ vom Grad l sein muss, also

$$\Theta_{l-l}(\theta) = c_l \sin^l \theta \quad \text{mit} \quad c_l = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}. \quad (5.62)$$

Wir überlassen die Bestimmung der Normierungskonstanten, welche so zu wählen ist, dass

$$\int_{S^2} d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (5.63)$$

den Übungen. Eine einfache Methode besteht darin, sich mittels partieller Integration eine Rekursionsformel für Integrale von beliebigen ungeraden Potenzen von $\sin \theta$ (auf dem Intervall $\theta \in (0, \pi)$) zu überlegen. Man beachte auch, dass

$$\int_{S^2} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta. \quad (5.64)$$

Die Eigenfunktionen zum gleichen l aber höherem m ergeben sich nun durch Anwendung des Aufsteigers L_+ . Wir wissen jetzt, dass sich unsere abstrakt konstruierten Darstellungen auf der Kugel realisieren lassen.

5.6 Kugelflächenfunktionen

Wir wollen die Basis aber auch noch explizit konstruieren. Zum Beispiel gilt

$$L_+ Y_{l-l}(\theta, \varphi) = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{l-l}(\theta) e^{-il\varphi} = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \Theta_{l-l}(\theta) e^{-il\varphi}. \quad (5.65)$$

Man überzeugt sich leicht, dass

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) = \frac{1}{\sin^l \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^l \theta \quad \text{und} \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} = -\frac{\partial}{\partial \cos \theta}. \quad (5.66)$$

Damit folgt

$$L_+ Y_{l-l}(\theta, \varphi) = -e^{i(-l+1)\varphi} \frac{1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^l \theta \Theta_{l-l}(\theta)). \quad (5.67)$$

Wir führen noch einen Schritt explizit durch:

$$L_+^2 Y_{l-l}(\theta, \varphi) = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i(-l+1)\varphi} \frac{-1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^l \theta \Theta_{l-l}(\theta)). \quad (5.68)$$

Wir sehen sofort, dass wir $i\partial/\partial\varphi$ durch $(l-1)$ ersetzen dürfen. Danach wenden wir die ersten der Gleichungen in (5.66) an, aber mit $l \rightarrow (l-1)$. Es folgt

$$L_+^2 Y_{l-l}(\theta, \varphi) = e^{i\varphi} \frac{1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{l-1} \theta e^{i(-l+1)\varphi} \frac{-1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^l \theta \Theta_{l-l}(\theta)) \quad (5.69)$$

und schließlich

$$L_+^2 Y_{l-l}(\theta, \varphi) = e^{i(-l+2)\varphi} \frac{1}{\sin^{l-2} \theta} \frac{d^2}{d \cos \theta^2} (\sin^l \theta \Theta_{l-l}(\theta)). \quad (5.70)$$

Man erkennt ohne Weiteres, was nach n Anwendungen von L_+ zu erwarten ist:

$$L_+^n Y_{l-l}(\theta, \varphi) = (-1)^n e^{i(-l+n)\varphi} \frac{1}{\sin^{l-n} \theta} \frac{d^n}{d \cos \theta^n} (\sin^l \theta \Theta_{l-l}(\theta)). \quad (5.71)$$

Das wechselnde Vorzeichen kommt von dem negativen Vorzeichen in der zweiten Gleichung in (5.66). Den formalen Beweis durch Induktion überlassen wir den Übungen.

Wir sind an Eigenfunktionen $|lm\rangle$ interessiert, und diese ergeben sich aus der obigen Formel für $n = l + m$. Mit der uns bekannten expliziten Form von Y_{l-l} folgt

$$L_+^{l+m} Y_{l-l}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} (-1)^{l+m} e^{im\varphi} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{d \cos \theta^{l+m}} (1 - \cos^2 \theta)^l. \quad (5.72)$$

Wir halten fest, dass wir an dieser Stelle im Prinzip fertig sind: Die jeweils niedrigste L_z -Eigenfunktion, $m = -l$, ist bereits richtig normiert. Die relative Normierung der höheren Funktionen relativ zu den niedrigeren war in unserem algebraischen Kapitel hergeleitet worden. Die Orthogonalität folgt aus der Unterschiedlichkeit der Eigenwerte zu den hermiteschen Operatoren L^2 und L_z . Damit haben wir das Orthonormalsystem

$$Y_{lm} \sim L_+^{l+m} Y_{l-l} \quad (5.73)$$

der sogenannten Kugelflächenfunktionen konstruiert. Und dies, beachtenswerterweise, fast ohne Analysis.

Der Vollständigkeit halber wollen wir aber noch die Normierung und den sonst oft benutzten Zusammenhang mit den Legendre-Polynomen manifest machen. Wir definieren die Legendre-Polynome durch die Rodrigues-Gleichung

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (5.74)$$

und die assoziierten bzw. zugeordneten Legendre-Polynome durch

$$P_l^m(z) = (-1)^m (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^m}{dz^m} P_l(z), \quad m \geq 0. \quad (5.75)$$

Sie ergeben sich ursprünglich als Lösungen gewisser Differentialgleichungen, die auch in unserem Fall aufgetreten wären, wenn wir sie nicht mittels der Aufsteiger-Methode umgangen hätten (vgl. [9, 13, 14] – die Konventionen variieren leicht). Man kann die P_l^m auch expliziter durch

$$P_l^m(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l, \quad -l \leq m \leq l, \quad (5.76)$$

definieren. Wie neben der Gleichung bereits notiert, erlaubt diese Definition auch negative m . Die assoziierten Legendre Polynome mit entgegengesetztem m sind zueinander proportional

$$P_l^{-m}(z) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(z). \quad (5.77)$$

Man prüft das, indem man die Koeffizienten der Potenzen von z auf der rechten und linken Seite in der Beziehung

$$\frac{d^{l-m}}{dz^{l-m}} (z^2 - 1)^l = c_{lm} (1 - z^2)^m \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l, \quad c_{lm} = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \quad (5.78)$$

vergleicht. Außerdem wird gelegentlich auch $P_{lm}(z) = (-1)^m P_l^m(z)$ benutzt.

Wir können unsere Formel für die Basis-Wellenfunktionen als

$$L_+^{l+m} Y_{l-l}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \quad (5.79)$$

schreiben. Die richtige Normierung bestimmen wir aus

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle, \quad (5.80)$$

was wir zu

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|l, m \pm 1\rangle \quad (5.81)$$

umschreiben können. Dies kann man iterieren und findet (siehe Übungen)

$$|lm\rangle = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} L_+^{l+m}|l-l\rangle. \quad (5.82)$$

Wenn wir nun, wie oben schon erklärt, von $R(r)$ absehen und $|lm\rangle$ als Bezeichnung für die normierten Funktionen auf der Sphäre benutzen, dann gilt somit auch

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} L_+^{l+m} Y_{l-l}(\theta, \varphi) \quad (5.83)$$

bzw. mit Benutzung unseres obigen Resultats für $L_+^{l+m} Y_{l-l}$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta). \quad (5.84)$$

Das ist unsere endgültige Formel für die Kugelflächenfunktionen, die natürlich auch schon aus der Elektrodynamik bekannt sein sollte.

5.7 Parität und Laplace-Operator auf der Sphäre

Wir schließen unsere Diskussion mit zwei Kommentaren ab. Der erste ist einfach und bezieht sich auf die sogenannte Parität, also das Transformationsverhalten unter Spiegelungen. Sie erinnern sich aus der Mechanik, dass Spiegelungen Teil der $O(3)$ aber nicht der $SO(3)$ sind. Sie sind insbesondere nicht kontinuierlich mit der Eins in $SO(3)$ verbunden und somit nicht durch Exponentieren der Lie-Algebra zu erzeugen.

Um von der $SO(3)$ zur $O(3)$ zu gelangen, genügt es, die Inversion am Ursprung (und all ihre Produkte mit Elementen der $SO(3)$) hinzuzunehmen. Da das Quadrat der Inversion $\mathbb{1}$ ist, können als Eigenwerte nur 1 und -1 auftreten. Unter Parität versteht man genau diese Eigenwerte. Explizit wird die Inversion durch $\bar{x} \rightarrow -\bar{x}$ bzw., in Kugelkoordinaten,

$$\{r, \theta, \varphi\} \rightarrow \{r, \pi - \theta, \varphi + \pi\} \quad (5.85)$$

beschrieben. Es gilt

$$e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi} \quad (5.86)$$

und

$$P_l^m(\cos(\pi - \theta)) = P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{l+m} P_l^m(\cos\theta). \quad (5.87)$$

Die letzte Gleichheit folgt aus der Tatsache, dass $P_l^m(z)$ aus z^2 (gerade in z) und $l+m$ Ableitungen nach z (ungerade in z) aufgebaut ist. Wir haben also schlussendlich

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (5.88)$$

so dass die Parität positiv/negativ für gerades/ungerades l ist.

Der zweite Kommentar ist fortgeschritten und etwas abstrakt-mathematisch: Er betrifft die Tatsache, dass unsere Analyse des Laplace-Operators auf \mathbb{R}^3 und die daraus folgende Ableitung der Kugelflächenfunktionen die mathematische Eleganz und Allgemeinheit des Ganzen noch nicht völlig offenbart. In der Tat, wir können \mathbb{R}^3 als ‘aus Zwiebelschalen’ aufgebaut und somit als $\mathbb{R}^3 = S^2 \times \mathbb{R}_+$ auffassen. Wir schränken nun Δ auf S^2 ein (wir lassen ihn auf Funktionen wirken, die nicht von r abhängen) und erhalten so den **Laplace-Operator of der Sphäre**:

$$\Delta(S^2) \sim L^2. \quad (5.89)$$

Seine Proportionalität zu L^2 folgt daraus, dass L^2 der einzige quadratische Operator ist, der aus Elementen von $Lie(SO(3))$ gebaut werden kann und mit allen Elemente von $Lie(SO(3))$ kommutiert. Es ist ein sogenannter **quadratischer Casimir-Operator**. Dass hierbei gerade die $SO(3)$ relevant ist, liegt nahe, weil es die Symmetriegruppe von S^2 ist.

Dieser quadratische Casimir entspricht also gerade dem Laplace auf der Sphäre, und letzterer ist wiederum auch aus Sicht der Analysis ein wichtiges Objekt, dass gar nicht der Einbettung in \mathbb{R}^3 bedarf. In der Tat, man kann auf einem Raum mit einer Metrik (präziser, auf einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit mit Metrik) ganz allgemein einen Laplace-Operator definieren:

$$\Delta = \delta d + d \delta. \quad (5.90)$$

Hierbei ist d die Ihnen schon (zumindest oberflächlich) bekannte äußere Ableitung, welche aus einer p -Form eine $(p+1)$ -Form macht:

$$d : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{p+1}(M), \quad (5.91)$$

wobei M der betreffende Raum (bei uns S^2) ist. Er hat ein Pendant im sogenannten Codifferential

$$\delta : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{p-1}(M), \quad \text{definiert durch} \quad \delta = (-1)^p *^{-1} d *. \quad (5.92)$$

Hier steht $*$ für den sogenannten **Hodge-Operator**, welcher den Grad einer p -Form in $d-p$ umwandelt:

$$(*\omega)_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_{d-p}} = (\sqrt{\det g/p!}) \omega^{\nu_1 \dots \nu_p} \epsilon_{\nu_1 \dots \nu_p \mu_1 \dots \mu_{d-p}}. \quad (5.93)$$

Dabei ist d die Dimension des Raumes und es tritt die sogenannte **Metrik** $g_{\mu\nu}$ auf: sowohl explizit (in der Determinante) als auch implizit, weil man rechts die Indizes von ω heben musste. Eine Metrik auf einem Raum, der durch d Koordinaten $x^1 \dots x^d$ parametrisiert ist, wird (sehr grob gesagt) dadurch definiert, dass sie den Abstand Δs zwischen zwei nahe beieinanderliegenden Punkten x und $x + \Delta x$ misst:

$$(\Delta s)^2 \simeq g_{\mu\nu} (\Delta x^\mu) (\Delta x^\nu). \quad (5.94)$$

Sie kennen schon die euklidische Metrik δ_{ij} des \mathbb{R}^d und die Lorentz-Metrik $\eta_{\mu\nu}$ des $\mathbb{R}^{1,3}$. Aber Metriken gibt es eben auch auf ‘gekrümmten’ Räumen, wie z.B. den Sphären.

Kurz und gut, die symmetrische (man sagt auch ‘round sphere’) Sphäre hat eine natürliche Metrik und damit einen natürlichen, symmetrischen Differentialoperator zweiter Ordnung, den Laplace. Man beachte, dass der oben definierte Laplace den Grad der Form, auf die er wirkt, erhält. Er wirkt also insbesondere auch auf $L_2(S^2)$, was uns hier ausschließlich interessiert. Dieser Laplace ist per Konstruktion symmetrisch (hermitesch) – er kann also im Skalarprodukt zweier Funktionen nach belieben als nach links oder rechts wirkend angesehen werden. Diesen Operator zu diagonalisieren ist ein zentrales Problem der Analysis auf einem Raum, und wir haben das eben auf S^2 gelöst. Soviel nur zur Einordnung in das mathematische Gesamtbild.

6 Das Wasserstoffatom

6.1 Zusammengesetzte Systeme

Das Wasserstoffatom besteht aus zwei unterscheidbaren Teilchen, Proton (bzw. Kern) und Elektron. Wir müssen also zunächst verstehen, wie wir derartige zusammengesetzte Systeme auf der Basis der Einzelsysteme verstehen. Dazu beginnen wir mit dem einfacheren Fall zusammengesetzter endlichdimensionaler Systeme, also z.B. mit zwei Hilberträumen

$$\mathcal{H}_1 \ni |\psi\rangle = \psi_i |i\rangle \quad \text{und} \quad \mathcal{H}_2 \ni |\chi\rangle = \chi_\alpha |\alpha\rangle \quad (6.1)$$

mit Orthonormalbasen $\{|i\rangle\}$ und $\{|\alpha\rangle\}$. Die Indizes i und α nehmen natürlich i.A. Werte in verschiedenen Bereichen an. Die Interpretation ist klar: $|\psi_i|^2$ charakterisiert die Wahrscheinlichkeit, System 1 im Zustand $|i\rangle$ anzutreffen, ebenso charakterisiert $|\chi_\alpha|^2$ die Wahrscheinlichkeit, System 2 im Zustand $|\alpha\rangle$ anzutreffen.

Naheliegenderweise möchte man bei gleichzeitiger Anwesenheit beider Systeme, Amplituden (analog zu ψ_i) und damit Wahrscheinlichkeiten (analog zu $|\psi_i|^2$) angeben können, die das vorliegen von $|i\rangle$ im System 1 und gleichzeitig $|\alpha\rangle$ im System 2 beschreiben. Dies wären dann komplexe Zahlen $\Phi_{i\alpha}$ (bzw. $|\Phi_{i\alpha}|^2$) für beliebige Werte von i und α . Die Angabe solcher Zahlen entspricht gerade der Angabe eines Vektors im Tensorprodukt der beiden Hilberträume:

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \ni \Phi_{i\alpha} |i\rangle \otimes |\alpha\rangle. \quad (6.2)$$

An dieser Stelle sollte der Leser die abstrakte Definition des Tensorprodukts von Vektorräumen wiederholen. Es ist allerdings für uns auch akzeptabel, die rechte Seite von (6.2) als Definition aufzufassen: Dazu starten wir einfach mit den $N \cdot M$ abstrakt definierten Basiselemente $|i\rangle \otimes |\alpha\rangle$ (wobei $N = \dim \mathcal{H}_1$ und $M = \dim \mathcal{H}_2$) und definieren \mathcal{H} als beliebige Linearkombinationen derselben.

Man kann natürlich völlig abstrakt zeigen, dass die positive definiten Skalarprodukte auf \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 ein ebensolches Skalarprodukt auf \mathcal{H} induzieren und letzteres damit zum Hilbertraum machen. Einfacher ist es jedoch, direkt die duale Basis

$$\langle i| \otimes \langle \alpha| \in \mathcal{H}^* \quad (6.3)$$

und damit eine ausgezeichnete Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$ zu definieren. Das Skalarprodukt auf \mathcal{H} ist damit durch

$$\left(\Phi_{i\alpha} |i\rangle \otimes |\alpha\rangle, \Psi_{j\beta} |j\rangle \otimes |\beta\rangle \right) \equiv \Phi_{i\alpha}^* \Psi_{j\beta} \langle i|j\rangle \langle \alpha|\beta\rangle = \Phi_{i\alpha}^* \Psi_{j\beta} \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} = \Phi_{i\alpha}^* \Psi_{i\alpha}, \quad (6.4)$$

gegeben.

Operatoren auf \mathcal{H} sind durch Tensorprodukte von Operatoren auf den beiden Faktorräumen und Summen solcher Produkte gegeben. Die Wirkung ist naheliegenderweise durch

$$O_1 \otimes O_2 : |i\rangle \otimes |\alpha\rangle \mapsto (O_1|i\rangle) \otimes (O_2|\alpha\rangle) = ((O_1)_{ij}|j\rangle) \otimes ((O_2)_{\alpha\beta}|\beta\rangle) \equiv (O_1)_{ij}(O_2)_{\alpha\beta} |j\rangle \otimes |\beta\rangle \quad (6.5)$$

definiert. Das Definitionszeichen auf der rechten Seite betont, dass wir vorher eigentlich noch nicht gesagt hatten, wie man das Tensorprodukt zweier Vektoren aus \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 bildet. Diese Definition ist aber natürlich sehr naheliegend.

Für unabhängige Systeme folgt per Definition die Dynamik auf dem Produktraum zwingend aus der Dynamik auf den Faktoren:

$$|\psi(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle = (e^{-iH_1 t/\hbar}|\psi\rangle) \otimes (e^{-iH_2 t/\hbar}|\chi\rangle) . \quad (6.6)$$

Um zu sehen, welcher Hamilton-Operator in diesem Fall das Gesamtsystem beschreibt, wenden wir $i\hbar\partial_t$ an:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle &= (H_1 e^{-iH_1 t/\hbar}|\psi\rangle) \otimes (e^{-iH_2 t/\hbar}|\chi\rangle) + (e^{-iH_1 t/\hbar}|\psi\rangle) \otimes (H_2 e^{-iH_2 t/\hbar}|\chi\rangle) \\ &= (H_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_2) (e^{-iH_1 t/\hbar}|\psi\rangle) \otimes (e^{-iH_2 t/\hbar}|\chi\rangle) \\ &= (H_1 + H_2) (e^{-iH_1 t/\hbar}|\psi\rangle) \otimes (e^{-iH_2 t/\hbar}|\chi\rangle) . \end{aligned} \quad (6.7)$$

Die Schreibweise in der letzten Zeile ist aus mathematischer Sicht natürlich extrem schludrig, wird aber in der Physik ständig benutzt und sollte in den meisten Fällen auch nicht missverständlich sein: Jeder der beiden Operatoren wirkt natürlich nur auf ‘seinem’ Raum – die Eins wird wo nötig ergänzt.

Zusammenfassend haben wir gesehen, dass die Kombination unabhängiger Systeme durch Tensorieren der entsprechenden Hilberträume geschieht, wobei die Dynamik im Produktraum durch die Summe der ursprünglichen Hamilton-Operatoren beschrieben wird. Die Verallgemeinerung auf mehr als zwei Systeme geschieht entweder durch sukzessives Tensorieren (erst \mathcal{H}_1 mit \mathcal{H}_2 und dann das Ergebnis mit \mathcal{H}_3 usw.) oder direkt:

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3 \ni \Phi_{i\alpha K} |i\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |K\rangle . \quad (6.8)$$

6.2 Unterscheidbare Teilchen und Zweikörperproblem

Den Übergang zum unendlichdimensionalen Fall vollziehen wir gleich am für uns interessanten Fall von zwei unterscheidbaren Teilchen im \mathbb{R}^3 . Das Adjektiv ‘unterscheidbar’ ist hier wichtig weil sonst (z.B. bei zwei Elektronen) eine wichtige quantenmechanische Besonderheit (die noch genauer diskutiert wird) auftritt: Die notwendige Symmetrisierung oder Antisymmetrisierung der Wellenfunktion. Doch dazu später.

Wir verallgemeinern gemäß

$$\psi_i \rightarrow \psi(\vec{x}) , \quad \chi_\alpha \rightarrow \chi(\vec{y}) , \quad \text{und} \quad \Phi_{i\alpha} \rightarrow \Phi(\vec{x}, \vec{y}) . \quad (6.9)$$

Hier beschreibt z.B. \bar{x} die Position des Elektrons und \bar{y} die des Protons (natürlich im gleichen \mathbb{R}^3). Unser Hilbertraum ist

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes L_2(\mathbb{R}^3) = L_2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) = L_2(\mathbb{R}^6). \quad (6.10)$$

Die vorletzte Gleichheit ist nicht völlig offensichtlich. Um sich klar zu machen, dass sie gilt, denke man sich wie schon oben \bar{x} und \bar{y} als Indizes und vergleiche Schritt für Schritt mit der obigen endlichdimensionalen Diskussion.

Der Hamiltonoperator ist zunächst

$$H = \frac{\bar{p}_e^2}{2m_e} + V_e(\bar{x}) + \frac{\bar{p}_p^2}{2m_p} + V_p(\bar{y}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_x + V_e(\bar{x}) - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_y + V_e(\bar{y}), \quad (6.11)$$

und er wirkt auf Funktionen $\Phi(\bar{x}, \bar{y})$. Wir haben hier $V_e(\bar{x}) \otimes \mathbb{1}$ durch $V_e(\bar{x})$ abgekürzt (und analog für die anderen Terme). Es versteht sich von selbst, welcher Operator auf welches Argument der Funktion wirkt. Dies beschreibt die Dynamik zweier unterscheidbarer Teilchen, jedes in seinem Potential (die natürlich auch gleich sein könnten). Wenn z.B. gar kein Potential vorhanden ist, dann stellen Produkte von Exponential-Funktionen in \bar{x} und in \bar{y} eine Eigenvektorbasis dar.

Interessant wird es nun, wenn wir eine Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen in Form eines abstandsabhängigen Potentials einführen:

$$V(\bar{x}, \bar{y}) = V(|\bar{x} - \bar{y}|) \quad (6.12)$$

und zu H addieren. Dabei nehmen wir an, dass sich die Teilchen ansonsten frei bewegen, also $V_p = V_e = 0$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_x - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_y + V(|\bar{x} - \bar{y}|). \quad (6.13)$$

Uns interessiert natürlich vor allem das Coulomb-Potential, $V \sim -1/|\bar{x} - \bar{y}|$, aber es kostet keine Mühe, im Moment noch allgemein zu bleiben.

In völliger Analogie zur klassischen Mechanik, vereinfacht der Übergang zu Schwerpunkts- und Relativkoordinate das Problem:

$$\bar{R} \equiv (m_e \bar{x} + m_p \bar{y})/M \quad \text{und} \quad \bar{r} \equiv \bar{x} - \bar{y}, \quad (6.14)$$

wobei $M \equiv m_e + m_p$. Es ist eine sinnvolle Aufgabe, die Umrechnung der beiden Laplace-Operatoren in die neuen Koordinaten explizit durchzuführen. Am besten geschieht dies, indem man zunächst die Gradienten ∇_x und ∇_y durch ∇_R und ∇_r ausdrückt und dann einsetzt. Wir überlassen dies dem Leser bzw. den Übungen und geben gleich das Ergebnis an:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r), \quad (6.15)$$

wobei mit $m = m_e m_p / M$ wie auch in der Mechanik die reduzierte Masse auftritt. Die Wellenfunktionen sind jetzt als Funktionen von \bar{r} und \bar{R} zu schreiben: $\Phi(\bar{x}, \bar{y}) = \Psi(\bar{r}, \bar{R})$.

Damit haben wir etwas sehr bemerkenswertes erreicht: Wir haben mit $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ und, passend dazu, $H = H_1 + H_2$ angefangen. Durch die Einführung eines Potentials $V = V(\bar{x}, \bar{y})$

haben wir diese Struktur zweier unabhängiger Systeme zerstört. Aber es ist uns gelungen, durch den Übergang zu \bar{R} und \bar{r} wieder zu einer Tensorproduktstruktur mit unabhängiger Dynamik zurückzukehren:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}'_1 \otimes \mathcal{H}'_2 \quad \text{und} \quad H = H'_1 + H'_2, \quad (6.16)$$

wobei die beiden Faktoren Funktionen von \bar{R} und \bar{r} entsprechen und die neue Summenform von H aus (6.15) hervorgeht. In solchen Situationen kann man immer die Eigenvektorbasen zu H_1 und H_2 bestimmen und hat dann die Produktraumbasis, wie in (6.2), als Menge aller Paare von Basiselementen.

Eine weniger abstrakte Sprechweise dafür sagt: Man mache den Produktansatz

$$\Psi(\bar{r}, \bar{R}) = \psi(\bar{r}) \chi(\bar{R}). \quad (6.17)$$

Dies ist eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, wenn

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \chi(\bar{R}) = E_R \chi(\bar{R}) \quad \text{und} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(\bar{r}) = E \psi(\bar{r}) \quad (6.18)$$

gilt. Die erste Gleichung wird durch ebene Wellen gelöst, was der Bewegung des Wasserstoffatoms als Ganzes entspricht. Die zweite beschreibt das quantenmechanische **Zentralkraftproblem**.

6.3 Das quantenmechanische Zentralkraftproblem

Wir wollen also

$$\left(\frac{\bar{p}^2}{2m} + V(r) \right) \psi(\bar{r}) = E \psi(\bar{r}) \quad (6.19)$$

lösen und erinnern uns dazu an

$$\frac{\bar{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{1}{r^2} \bar{L}^2 \right] \quad \text{mit} \quad p_r \equiv -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (6.20)$$

Der Hamilton-Operator ist wieder (fast) eine Summe von zwei unabhängigen Operatoren, einer der nur auf Funktionen auf S^2 wirkt, und einer der auf Funktionen von r wirkt. Das Wörtchen “fast” bezieht sich auf den Faktor $1/r^2$ vor \bar{L}^2 , welcher sich aber nicht als hinderlich erweist. Wir können also ebenso wie im Fall der vollständigen Entkopplung mit dem Produktansatz fortfahren.

Wir schreiben

$$\psi(\bar{r}) = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.21)$$

und finden⁹

$$\left(\frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{1}{r^2} \bar{L}^2 \right] + V(r) \right) f(r) Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi) = E f(r) Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi). \quad (6.22)$$

Jetzt benutzen wir

$$\bar{L}^2 Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi) \quad (\text{wobei auch gilt: } L_z Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi) = \tilde{m} \hbar Y_{l\tilde{m}}(\theta, \varphi)) \quad (6.23)$$

⁹Wir schreiben hier \tilde{m} statt m um Verwechslungen mit der Masse vorzubeugen.

und finden, wegen der Unabhängigkeit der Kugelflächenfunktionen,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} p_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) f(r) = E f(r). \quad (6.24)$$

Da $p_r \sim \partial/\partial r + 1/r$ und, als Operatorgleichung,

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{1}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}, \quad (6.25)$$

führt der Ansatz

$$f(r) = \frac{1}{r} u(r) \quad (6.26)$$

zu einer weiteren Vereinfachung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) u(r) = E u(r). \quad (6.27)$$

Wir haben es jetzt effektiv mit einem eindimensionalen Schrödingerproblem zu tun, wobei das effektive Potential die Summe aus der sogenannten **Zentrifugalbarriere** und dem ursprünglichen Zentralpotential ist (Fig. 13)

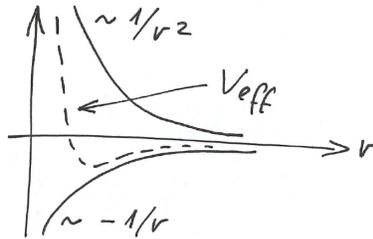


Abbildung 13: Effektives Potential als Summe von Zentralpotential (als Beispiel ist $\sim -1/r$ gewählt) und Zentrifugalbarriere.

6.4 Das Wasserstoff-Spektrum

Jetzt wählen wir konkret das Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (6.28)$$

wobei e_0 die Elementarladung und ϵ_0 die elektrische Feldkonstante (Dielektrizitätskonstante des Vakuums) sind. Wir haben es also mit der Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) u(r) = E u(r) \quad (6.29)$$

zu tun.

Es ist nun sinnvoll, sich zu erinnern, dass wir mit jedem Teilchen eine Welle der Wellenzahl $k = p/\hbar = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ verbinden. Wir haben hier $|E|$ statt E geschrieben, weil wir dies gleich zur Größenordnungsabschätzung in unserem konkreten Fall benutzen wollen und die Energieeigenwerte bei uns negativ sein werden. (Man erkennt dies daran, dass wir nach gebundenen Zuständen im oben skizzierten effektiven Potential suchen.) Wir schreiben unsere Gleichung nun unter Benutzung der so definierten typischen Länge (der De-Broglie-Wellenlänge $\sim 1/k$) um:

$$\left(-\frac{1}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0|E|} \frac{1}{r}\right) u(r) = -u(r), \quad (6.30)$$

wobei wir, wie oben erklärt, $E = -|E|$ gesetzt haben. Jetzt wechseln wir zur dimensionslosen Variablen

$$\rho \equiv kr \quad (6.31)$$

und finden

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{e_0^2 k}{4\pi\epsilon_0|E|} \frac{1}{\rho} - 1\right) u(r) = 0. \quad (6.32)$$

Im Vorfaktor des $1/\rho$ -Terms ist es nun bequem, $|E|$ durch k zu ersetzen und die dimensionslose Konstante

$$\rho_0 \equiv \frac{2me_0^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 k} \quad (6.33)$$

einzuführen:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right) u(r) = 0. \quad (6.34)$$

Wir erwarten, dass es nur diskrete Lösungen und damit diskrete Werte der Größe ρ_0 geben wird. Wenn wir uns zunächst auf nicht zu großes l beschränken, dann hat unser Problem keine großen oder kleinen Parameter. Wir erwarten deshalb, dass die niedrigsten Zustände $\rho_0 \sim \mathcal{O}(1)$ und demnach

$$k = \frac{2me_0^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\rho_0} \sim \frac{2me_0^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \quad (6.35)$$

haben. Dies entspricht natürlich gerade der (inversen) Größenordnung des sogenannten Bohrschen Atomradius

$$a_B \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}, \quad \text{so dass} \quad k = \frac{2}{a_B \rho_0}. \quad (6.36)$$

Wir haben hier in der letzten Formel die sehr kleine Differenz zwischen m und m_e vernachlässigt und werden dies auch weiterhin tun. Die daraus folgende Energie ist

$$-E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{2\hbar^2}{ma_B^2\rho_0^2} = \frac{4E_R}{\rho_0^2}, \quad (6.37)$$

wobei wir die Rydberg-Energie

$$E_R \equiv \frac{\hbar^2}{2m_e a_B^2} \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (6.38)$$

eingeführt haben. Bis auf die Bestimmung der präzisen Quantisierung der Größe ρ_0 ist damit alles getan.

Um dieses letzte Problem zu lösen, betrachten wir zunächst den Limes $\rho \rightarrow \infty$ und die sich in diesem Limes ergebende Differentialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - 1\right)u(\rho) = 0. \quad (6.39)$$

Sie wird durch $u \sim e^{-\rho}$ gelöst. Nun betrachten wir den Limes $\rho \rightarrow 0$ und die dort relevante Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u(\rho) = 0. \quad (6.40)$$

Diese löst man mit dem Potenzansatz $u(\rho) = \rho^\alpha$, welcher

$$\alpha(\alpha - 1) = l(l + 1) \quad (6.41)$$

liefert. Die beiden Lösungen sind $\alpha = l + 1$ und $\alpha = -l$, so dass

$$u(\rho) = A\rho^{l+1} + B\rho^{-l} \quad (6.42)$$

die allgemeine Lösung unserer ursprünglichen Differentialgleichung darstellt. Normierbarkeit bei $\rho \rightarrow 0$ erfordert $B = 0$, was uns insgesamt auf den Ansatz

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \quad (6.43)$$

führt.¹⁰ Für $v(\rho)$ ergibt sich aus (6.34) die Differentialgleichung

$$\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))\right)v(\rho) = 0. \quad (6.44)$$

Diese löst man mit dem Ansatz

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j, \quad (6.45)$$

welcher nach Einsetzen in die Differentialgleichung zu der Rekursions-Relation

$$a_{j+1} = a_j \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \quad (6.46)$$

führt. Wir überlassen die Details der letzten zwei Schritte (siehe z.B. Griffiths [9]) den Übungen. Falls die Reihe nicht abbricht, geht diese Rekursionsrelation bei sehr großem j angenähert in

$$a_{j+1} \sim a_j \frac{2}{j} \quad (6.47)$$

über, also

$$a_j \sim 2^j/j! \quad \text{bzw.} \quad v(\rho) \sim e^{2\rho}. \quad (6.48)$$

Dies wächst schneller, als der $e^{-\rho}$ -Faktor in $u(\rho)$ fällt. Damit wird unser ursprüngliches $\psi(r)$ bei großem r nicht normierbar sein. Wir müssen also den Abbruch der Reihe fordern.

¹⁰Speziell bei $l = 0$ hätten wir selbst für $B \neq 0$ nur $f \sim u/r \sim 1/r$, so dass $|\psi|^2 \sim |f|^2 \sim 1/r^2$ mit dem Maß $r^2 dr$ immer noch normierbar wäre. Allerdings ist ψ bei $\bar{r} = 0$ hochgradig singular.

Bei gegebenem l sind also nur ganzzahlige, gerade ρ_0 -Werte

$$\rho_0 = 2n \quad \text{mit} \quad n \geq l + 1 \quad (6.49)$$

zugelassen. Es ist üblich, die Lösungen anders zu klassifizieren: Man wählt zuerst die sogenannte **Hauptquantenzahl** n und lässt dann die **Drehimpulsquantenzahlen** l und m unter den Einschränkungen

$$|m| \leq l \quad \text{und} \quad l + 1 \leq n \quad (6.50)$$

laufen. Wir haben also einen vollständiger Satz von Lösungen $|nlm\rangle$ mit **negativen** Energieeigenwerten

$$E_n = -E_R/n^2 \quad (6.51)$$

gefunden. Dies ist, im Gegensatz zum Oszillator-Fall, noch keine Basis (siehe unten). Das Spektrum ist hochgradig degeneriert, weil die Energie nur von der Hauptquantenzahl abhängt. Nur zusammen mit den L^2 - und L_z -Eigenwerten kann die Energie den Zustand bestimmen.

Bis auf die Normierung haben wir auch die Wellenfunktionen explizit gefunden:

$$|nlm\rangle \sim (kr)^l e^{-kr} v_{nl}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (6.52)$$

wobei $k = 2/(a_B \rho_0) = 1/(na_B)$ ist.

Der Vollständigkeit halber sei noch erwähnt, dass

$$v(\rho) \sim L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (6.53)$$

gilt, wobei $L_p^q(x)$ die **zugeordneten Laguerre-Polynome** bezeichnet. Diese lösen die Differentialgleichung

$$xy''(x) + (q + 1 - x)y'(x) + py(x) = 0, \quad (6.54)$$

was bis auf geringfügige Änderungen in Normierung und Notation exakt unsere Differentialgleichung für $v(\rho)$ ist. Man kann die zugeordneten Laguerre-Polynome explizit angeben,

$$L_p^q(x) = \frac{e^x x^{-q}}{p!} \frac{d^p}{dx^p} (e^{-x} x^{q+p}). \quad (6.55)$$

Die normierten Lösungen lauten in dieser Sprache

$$|nlm\rangle = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-kr} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (6.56)$$

Für mehr Details verweisen wir auf Griffiths, Schiff [9,21] und den Wikipedia-Artikel zu Laguerre-Polynomen.

Wir bemerken noch, dass auch eine vollständig algebraische Lösung (siehe z.B. [7]) möglich ist, wenn man den Runge-Lenz-Vektor und die mit dieser Erhaltungsgröße verbundene zusätzliche Symmetrie benutzt.

Schließlich muss noch erwähnt werden, dass es auch (nicht-normierbare) Lösungen mit $E > 0$ gibt. Man sieht dies z.B. an (6.39), wo in diesem Fall -1 in $+1$ übergeht und man ein bzw. auslaufende sphärische Wellen findet. Die Energieeigenwerte sind in diesem Fall nicht quantisiert, so dass das von uns hergeleitete diskrete Spektrum um einen kontinuierlichen Teil ergänzt wird. Alles ist analog zum von uns schon besprochenen eindimensionalen endlichen Kastenpotential, nur mit sphärischer Symmetrie. Wir verzichten (zumindest für den Moment) aus Zeitgründen auf dieses interessante und wichtige Kapitel.

6.5 Unendlichdimensionale Hilberträume

Wir haben bisher ganz bewußt eine mathematische Lücke gelassen, indem wir zwar endlichdimensionale Hilberträume und Operatoren darauf einigermaßen sauber definiert haben, aber bei unendlichdimensionalen (oder **echten**) Hilberträumen nur sehr vage geblieben sind. Wir können diese Lücke hier auch nicht wirklich schließen, weil dies relativ tiefe Mathematik (Funktionalanalysis) erfordert. Jedoch wollen wir wenigstens andeuten, was die relevanten Definitionen sind und was uns hier an Inhalten entgeht. Dass dies so spät geschieht, liegt daran, dass wir erst jetzt die Beispiele zur Verfügung haben, welche es uns ermöglichen, diese abstrakte Diskussion zu würdigen.

Die eben erwähnten Beispiele sind u.a.

(1) Endlichdimensionale Hilberträume, allen voran das Spin-1/2-System. Hier ist der Hilbertraum \mathbb{C}^N , der Hamilton-Operator (sowie auch jede andere Observable) ist eine hermitesche Matrix welche immer eine Orthonormal-Basis aus Eigenvektoren hat.

(2) Die quadratintegrablen Funktionen auf endlichen (kompakten) Räumen – in unserem Fall S^1 (starrer Rotator) und $[0, 1] \subset \mathbb{R}$ (unendlich tiefer Kasten). In beiden Fällen haben wir eine unendlichdimensionale Basis aus Eigenvektoren zum (freien) Hamilton-Operator gefunden.

(3) Die quadratintegrablen Funktionen auf der reellen Geraden, $L_2(\mathbb{R})$. Wir haben diese aus Sicht des freien Teilchens (mittels einer kontinuierlichen Basis), aus Sicht des Oszillators (mit diskreter oder abzählbarer Basis) und aus Sicht des endlich tiefen Kastens (Basis aus einem endlichen Satz quadratintegrabler Funktionen und einem Kontinuum nicht-normierbarer Funktionen) beschrieben.

(4) Die quadratintegrablen Funktionen $L_2(\mathbb{R}^3)$. Hier haben wir nur den Standpunkt des Coulomb-Potentials diskutiert, wobei die Eigenvektorbasis des Hamilton-Operators wie oben einen diskreten und einen kontinuierlichen (nicht-normierbaren) Anteil hat. Wir könnten auch den Standpunkt des 3d harmonischen Oszillators einnehmen, welcher (da $V(\vec{x}) \sim \vec{x}^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$) am bequemsten als dreifaches Tensorprodukt des Hilbertraums $L_2(\mathbb{R})$ beschrieben wird. Die Basis ist entsprechend diskret: $|n_1 n_2 n_3\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$ mit $(n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$.

Bisher haben wir auf den unendlichdimensionalen Räumen jeweils ein positiv definites Skalarprodukt definiert und gefordert, dass unsere Observablen O (und insbesondere H) die Bedingung

$$\langle \psi | O \chi \rangle = \langle O \psi | \chi \rangle \quad (6.57)$$

erfüllen (wann immer beide Seiten definiert sind). Dies ist analog zur Hermitizität im endlichdimensionalen Fall und wir haben erwartet, dass sich das Theorem zur Existenz der Eigenvektorbasis (Diagonalisierbarkeit, **Spektralsatz**) auf den unendlichdimensionalen Fall übertragen lässt. Die explizite Rechnung hat dies bestätigt, wobei wir allerdings in keinem Fall wirklich bewiesen haben, dass eine Basis vorliegt. (In den Fällen des freien Teilchens auf \mathbb{R} , des starren Rotators und des unendlich tiefen Potentialtopfes wissen Sie dies allerdings aus der Theorie der Fourier-Transformation.)

Das Folgende ist eine (sehr lückenhafte und subjektive) Ansammlung von Definitionen und Fakten, welche dahin führen sollen, dass die oben skizzierte naive Verallgemeinerung auf unendlichdimensionale Räume zumindest nicht völlig unbegründet ist. Mehr findet sich z.B. in [15–18],

wir folgen speziell [15].

Wir werden immer ein positive definites Skalarprodukt und die damit verbundene Norm voraussetzen. Wir werden Reihen

$$\sum_{n=1}^{\infty} \chi_n, \quad \chi_n \in \mathcal{H} \quad (6.58)$$

und die Folgen von deren Teilsummen betrachten. Eine Reihe ist konvergent, wenn die Folge Ihrer Teilsummen

$$\psi_m = \sum_{n=1}^m \chi_n \quad (6.59)$$

konvergiert. Letzteres heißt, dass $\|\psi - \psi_n\| \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Damit ist ψ gleich der unendlichen Summe oder Reihe, von der wir ausgegangen sind. Klarerweise ermöglichen uns diese Begriffe, Vektoren in unendliche Basen zu zerlegen und damit zu entscheiden, ob ein (abzählbarer) Satz von Vektoren eine Basis ist (also ob jeder Vektor als entsprechende Reihe geschrieben werden kann).

Um einen Hilbertraum zu definieren, brauchen wir den Begriff der **Cauchy-Folge**, der völlig analog zur Cauchy-Folge komplexer Zahlen ist: Die Folge ψ_n ist eine Cauchy-Folge, wenn es für jedes ϵ ein N gibt, so dass $\|\psi_n - \psi_m\| < \epsilon$ falls $n, m > N$. Ein Raum mit Norm heißt **vollständig**, falls jede Cauchy-Folge (gegen ein Element des Raumes) konvergiert. Ein Raum mit positiv definitem Skalarprodukt heißt **Hilbertraum**, wenn er vollständig ist. Er heißt **separabel**, wenn es eine abzählbare Orthonormalbasis gibt. Wir werden uns nur mit separablen Hilberträumen befassen. Wichtig ist, dass der kanonische Isomorphismus zwischen Raum und Dualraum (und damit die Bra-Ket-Notation) sich problemlos von endlichdimensionalen auf separable Hilberträume übertragen lassen.

Der Begriff des linearen Operators überträgt sich ebenfalls problemlos. Wichtig ist, dass man einen Operator O stetig nennt, falls aus $\psi_n \rightarrow \psi$ immer folgt, dass $O\psi_n \rightarrow O\psi$. Ein äquivalenter Begriff ist der der Beschränktheit: Ein Operator ist **beschränkt**, falls es ein $b \in \mathbb{R}_+$ gibt, so dass $\|O\psi\| \leq b\|\psi\|$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Wir beweisen die Äquivalenz hier nicht.

Für beschränkte Operatoren wird der adjungierte Operator O^\dagger genau wie früher durch die Forderung

$$\langle O^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \psi | O \chi \rangle \quad (6.60)$$

definiert. Hermitizität oder Selbstadjungiertheit sind, wieder so wie früher, durch $O = O^\dagger$ erklärt.

Interessant und schwieriger wird es bei unbeschränkten Operatoren, was in der Quantenmechanik (machen Sie sich das an den bekannten Beispielen klar!) ständig vorkommt. Noch schlimmer, meist sind die interessanten Operatoren sogar nicht für jeden Vektor definiert. (Zum Beispiel bildet \hat{x}^2 offensichtlich manche normierbaren Funktionen auf nicht normierbare ab – er ist also eigentlich kein Operator auf \mathcal{H} .) Man möchte trotzdem mit solche Operatoren arbeiten und akzeptiert also, dass manche Operatoren eine **Definitionsbereich** (oder **Domäne**) haben, welche kleiner als \mathcal{H} ist. Man sagt, O' ist einer **Erweiterung** von O , wenn die Domäne von O' größer oder gleich der von O ist und er mit O auf dessen Domäne übereinstimmt.

Wir betrachten nun Operatoren O mit einer dichten Domäne. Dicht heißt hier, dass man jedes Element in \mathcal{H} als Grenzwert einer Folge aus Elementen in der Domäne beschreiben kann.

(Man denke daran, wie \mathbb{Q} dicht in \mathbb{R} liegt.) Nun definiert man O^\dagger wie folgt: Zunächst ist die Domäne von O^\dagger die Menge aller Vektoren ψ , für welche es einen Vektor $O^\dagger\psi$ gibt, so dass

$$\langle O^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\psi|O\chi\rangle \quad (6.61)$$

für alle χ aus der Domäne von O . Man kann zeigen, dass dies $O^\dagger\psi$ eindeutig ist und damit den Operator O^\dagger definiert.

Man nennt einen Operator **symmetrisch** (oder, in der mathematischen Literatur, **hermitesch**) falls seine Domäne dicht in \mathcal{H} ist und

$$\langle O\psi|\chi\rangle = \langle\psi|O\chi\rangle \quad (6.62)$$

für alle Vektoren aus seiner Domäne. Man kann zeigen, dass unter diesen Bedingungen O^\dagger eine Erweiterung von O ist. Falls die Domänen gleich sind (also $O^\dagger = O$), so nennt man O **selbstadjungiert**. (In der Physik wird oft auch der Begriff hermitesch synonym mit selbstadjungiert benutzt. In diesem Fall darf man natürlich **nicht** gleichzeitig hermitesch statt symmetrisch sagen.)

Ein symmetrischer Operator O kann also nur dadurch **nicht** selbstadjungiert sein, dass seine Domäne kleiner als die von O^\dagger ist. In vielen Fällen kann man dann eine sogenannte **selbstadjungierte Erweiterung** (**self-adjoint extension**) finden, welche eine größere Domäne hat und mit der Domäne des adjungierten Operators übereinstimmt.

Der letzte Schritt ist wichtig weil (und wir kommen jetzt zum zentralen Punkt des Kapitels!) es gerade für selbstadjungierte Operatoren einen **Spektralsatz** bzw. eine Satz zur **Diagonalisierbarkeit** gibt, der analog zum endlichdimensionalen Fall ist. Dazu erinnern wir uns zunächst, dass man im endlichdimensionalen Fall

$$O = \sum_{i=1}^N o_i |i\rangle\langle i| = \sum_{i=1}^N o_i I_i \quad (6.63)$$

schreiben kann, wobei I_i der Projektionsoperator auf den i -ten Eigenzustand ist. Orthonormalität und Vollständigkeit kann man als

$$I_i I_j = \delta_{ij} I_i \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^N I_i = \mathbb{1} \quad (6.64)$$

schreiben.

Die zentrale Idee besteht nun darin, den obigen Ausdruck für O durch Projektoren so umzuschreiben, dass er auch im Fall kontinuierlicher Spektren benutzt werden kann. Man definiert zunächst

$$E_x \equiv \sum_{o_i \leq x} I_i, \quad (6.65)$$

also den Projektor auf den Raum, der durch alle Eigenvektoren zu Eigenwerten $\leq x$ aufgespannt wird. Orthonormalität und Vollständigkeit lauten nun

$$E_x E_y = E_y E_x = E_x \quad (\text{für } x \leq y) \quad (6.66)$$

und $E_x \rightarrow \mathbb{1}$ für $x \rightarrow \infty$. Des Weiteren brauchen wir die (nur *formal* infinitesimalen) Operatoren

$$dE_x \equiv E_x - E_{x-dx}. \quad (6.67)$$

Diese sind immer Null, außer wenn das Intervall $(x - dx, x]$ einen Eigenwert o_i enthält, Dann ist der Wert I_i . Man sieht daraus, dass wir O jetzt als

$$O = \int x dE_x \quad (6.68)$$

schreiben können. Wenn man sich das als Riemannsches Integral vorstellt, ist klar, dass man immer nur Beiträge $x I_i \sim o_i I_i$ aus Intervallen erhält, welche einen Eigenwert enthalten. Insgesamt bekommt man exakt die Summe aus (6.63).

Der abschließende und entscheidende Punkt ist nun, dass man diese Schreibweise auch dann benutzen darf, wenn (was i.A. der Fall ist) das Spektrum des Operators einen kontinuierlichen Teil enthält. Es gilt somit der (wir unterschlagen hier einige technische Voraussetzungen und Details) der **Spektralsatz**, welcher in etwa besagt: Für jeden selbstadjungierten Operator O existiert eine Familie von Projektionsoperatoren E_x , so dass

$$O = \int x dE_x. \quad (6.69)$$

Der entscheidende Punkt ist nun, dass E_x nicht nur bei bestimmten x -Werten springen sondern sich auch kontinuierlich ändern darf. Beiträge kommen aus den Bereichen oder Punkten von \mathbb{R} , wo es Eigenwerte gibt (aus dem Spektrum).

Für den Physiker ist das natürlich nichts anderes, als

$$O = \sum_i o_i |i\rangle\langle i| + \int_{x \in \sigma} x dx |x\rangle\langle x|, \quad (6.70)$$

wobei i die diskreten Eigenwerte indiziert und σ den Bereich von \mathbb{R} mit kontinuierlichen Eigenwerten bezeichnet. Die obige mathematische Formulierung kommt ohne die nicht im Hilbertraum liegenden Vektoren $|x\rangle$ aus (mit denen der Physiker kein Problem hat).

Dies war ein extrem steiler und (dem geschuldet) sehr schematischer Einstieg in die formellere Quantenmechanik. In vielen interessanten Fällen wird man aber trotz des Theorems und des Formalismus nicht umhin können, erst die Schrödingergleichung zu lösen und sich (so man will) dann die saubere Formulierung des relevanten Hilbertraums und des selbstadjungierten Operators zu überlegen.

7 Spin

7.1 Das Fehlen von halbzahligen Drehimpuls-Darstellungen

Für das Folgende ist es entscheidend, abstrakt über Darstellungen von Symmetriegruppen und deren Lie-Algebren auf Funktionenräumen nachzudenken.

Wir erinnern uns zunächst an das einfachste Beispiel: Die Gruppe von Translationen auf der Geraden ist \mathbb{R} mit Addition als Gruppenoperation. Ihre Lie-Algebra ist ebenfalls \mathbb{R} und die Abbildung von Lie-Algebra in Gruppe kann als Identität aufgefasst werden. Die für uns entscheidende Darstellung war die auf $L_2(\mathbb{R})$:

$$\mathbb{R} \ni \epsilon \mapsto e^{-i\epsilon\hat{p}} \in GL(L_2(\mathbb{R})). \quad (7.1)$$

Die Wirkung auf Funktionen der Translation um ϵ war explizit durch

$$e^{-i\epsilon\hat{p}}\psi(x) = \psi(x - \epsilon) \quad (7.2)$$

gegeben. Letzteres ist eine um ϵ nach rechts verschobene Funktion: Falls die Funktion $x \mapsto \psi(x)$ ihr Maximum bei $x = x_0$ hat, dann hat $x \mapsto \psi(x - \epsilon)$ ihr Maximum offensichtlich bei $x = x_0 + \epsilon$.

Mit dem Drehimpuls war es ebenso, nur das man jetzt sorgfältig zwischen Lie-Algebra und Lie-Gruppe unterscheiden muss. Wir erinnern uns an $SO(3)$ und ihre Lie-Algebra mit Generatoren iT_i . Hier ist T_i die kanonische Basis antisymmetrischer (3×3) -Matrizen und wir führen das extra i ein, damit die Matrix nach Quantenmechanik-Konvention hermitesch ist.

Wir können Gruppenelemente als $e^{-\epsilon_i T_i} = e^{i\epsilon_i(iT_i)}$ schreiben, und Ihre Darstellung auf $L_2(\mathbb{R}^3)$ ist durch

$$SO(3) \ni e^{i\epsilon_i(iT_i)} \mapsto e^{i\epsilon_i\hat{L}_i} \in GL(L_2(\mathbb{R}^3)) \quad (7.3)$$

gegeben. Wir haben die \hat{L}_i explizit als Differentialoperatoren in x_i geschrieben und wissen also explizit (bis auf die notwendige Summation einer Reihe), wie sie auf Funktionen wirken:

$$\psi(\vec{x}) \mapsto e^{i\epsilon_i\hat{L}_i}\psi(\vec{x}). \quad (7.4)$$

Wir hatten nicht explizit gesehen, können aber aus Konsistenzgründen schließen (siehe auch Übungen), dass diese Wirkung natürlich einer normalen Drehung entspricht:

$$e^{i\epsilon_i\hat{L}_i}\psi(\vec{x}) = \psi(e^{-i\epsilon_i(iT_i)}\vec{x}). \quad (7.5)$$

Die Wirkung im Argument ist invers zu der auf dem Raum, damit die Funktion als ganzes in die richtige Richtung verschoben bzw. verdreht wird. Das ist völlig analog zum obigen Translationsfall.

Wir wollen an dieser Stelle betonen, dass dies, für eine allgemeine Observable O , zunächst einmal nur die Definition einer Transformation auf \mathcal{H} ist:

$$|\psi\rangle \mapsto e^{i\epsilon O}|\psi\rangle. \quad (7.6)$$

Zur Symmetrie im physikalischen Sinne wird es erst dadurch, dass die Transformation mit der Zeitentwicklung vertauscht, also

$$e^{i\epsilon O}e^{-iHt/\hbar} = e^{-iHt/\hbar}e^{i\epsilon O} \quad \text{bzw.} \quad [O, H] = 0. \quad (7.7)$$

Doch nun wieder zurück zum speziellen Fall des Drehimpulses und der Drehungen:

Die radiale Koordinate spielt bei dem Ganzen keine Rolle – die Darstellung ist eigentlich nur eine Darstellung auf $L_2(S^2)$. Wir hatten dies auch gesehen, als wir die L_i explizit durch Differentialoperatoren in θ und φ ausgedrückt hatten. Wir haben also

$$e^{i\epsilon_i(iT_i)} \mapsto e^{i\epsilon_i\hat{L}_i} \in GL(L_2(S^2)) \quad \text{mit} \quad \psi(\theta, \varphi) \mapsto e^{i\epsilon_i L_i}\psi(\theta, \varphi). \quad (7.8)$$

Wichtig ist, dass unsere Darstellung nicht **irreduzibel** war. Im Gegenteil, wir hatten sie als Summe vieler kleinerer Darstellungen **ausreduziert**:

$$L_2(S^2) = W_0 \oplus W_1 \oplus W_2 \oplus W_3 \oplus \cdots = \sum_{l=0}^{\infty} W_l \quad (7.9)$$

wobei W_l von den Y_{lm} mit $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ aufgespannt wird. Wir wissen sicher, dass die Gruppe auf jedem der Summanden getrennt wirkt, weil wir wissen, dass die L_z und L_{\pm} nie aus einem der Unterräume herausführen. Aus letzteren können wir aber die L_i bauen, und aus diesen wiederum durch Exponentieren jedes Gruppenelement. Damit ist das obige **Zerfallen der Darstellung in eine direkte Summe vieler Unterdarstellungen** klar.

In dieser Summe kommen alle Darstellungen mit ganzzahligem l vor, jedoch keine einzige mit halbzahligem l . Wir können uns auch sicher sein, dass wir bei der Analyse nicht einfach etwas übersehen haben, denn das Fehlen der halbzahligen Darstellungen hat einen einfachen Grund: Halbzahlige Darstellungen enthalten Eigenfunktionen zu L_z mit halbzahligem Eigenwert m ($\hbar = 1$),

$$L_z \psi(\theta, \varphi) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(\theta, \varphi) = m \psi(\theta, \varphi) \quad \Rightarrow \quad \psi(\theta, \varphi) \sim e^{im\varphi}, \quad (7.10)$$

was mit der notwendigen (2π)-Periodizität in φ kollidiert. Wir könnten vielleicht für eine einzelne Wellenfunktion mit resultierender Doppeldeutigkeit (zwei Funktionswerte für ein φ) leben, weil die Phase ja keine Bedeutung hat. Aber beim Addieren von Wellenfunktionen bekommen wir nicht-endeutige Betragswerte und verlieren damit die Kontrolle. Es hat sich erwiesen, dass in diesem Zusammenhang kein gangbarer Weg zu den halbzahligen Darstellungen führt.

Dass man die halbzahligen Darstellungen nicht als unphysikalisch ausschließen sollte, war schon früh klar: Das Elektron hat (vgl. Stern-Gerlach) offenkundig zwei verschieden an ein Magnetfeld koppelnde Zustände, die sehr an die 2-dimensionale ($l = 1/2$)-Darstellung erinnern. Auch die Atomspektren lassen sich nur mit diesem extra Freiheitsgrad erklären. Doch wie führen wir auch nur diese eine halbzahlige Darstellung in unseren Formalismus ein?

7.2 Wirkung von Symmetrien auf Felder und Quantenmechanik mit allgemeinem Spin

Es lohnt sich, an dieser Stelle etwas weiter auszuholen und festzuhalten, dass wir mit $\psi(\vec{x})$ eine Art Feld in die Mechanik eingeführt haben. Unter Feld verstehen wir hier schlicht ein physikalisches Objekt (mathematisch eine Funktion), die jedem Ort eine Zahl zuordnet.

Felder kennen wir auch aus der Elektrodynamik, z.B. das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{x})$. Ein konstantes E -Feld transformiert sich unter einer Drehung $R \in SO(3)$ gemäß

$$\vec{E} \mapsto R\vec{E} \quad \text{bzw.} \quad E_i \mapsto R_{ij} E_j. \quad (7.11)$$

Hat das Feld ein Raumzeit-Profil, so kommt die Drehung dieses Profils im Raum hinzu:

$$\vec{E}(\vec{x}) \mapsto R\vec{E}(R^{-1}\vec{x}). \quad (7.12)$$

Das Feld transformiert also auf zwei Arten: Erstens, weil es eben ein Feld ist, über das Argument. Hier wirkt nicht R sondern R^{-1} , was, wie wir bei oben bei Translationen erklärt haben, zu der ‘richtigen’ Bewegung des Feldprofils im Raum führt. Zweitens aber stellt das Feld an jedem Punkt im Raum einen Vektor dar, und dieser dreht sich auch. Das wird durch die Wirkung von R auf die Indizes i von $E_i(\bar{x})$ beschrieben.

Nun ist der Schritt von klassischen Feldern zu der Wellenfunktion $\psi(\bar{x})$ ein sehr großer. Es gibt da zwar in der Tat einen Zusammenhang, aber der ist nicht ganz einfach und Gegenstand der Quantenfeldtheorie. Wir brauchen an dieser Stelle nur die oben beschriebene mathematische Idee. Damit vergessen wir die Elektrodynamik und ihre klassischen Felder wieder und kehren zur Quantenmechanik und der Schrödinger-Wellenfunktion $\psi(\bar{x})$ zurück. Wir geben der Wellenfunktion einfach einen Index,

$$\psi(\bar{x}) \rightarrow \psi_m(\bar{x}) \quad (7.13)$$

und lassen diesen (bei gegebenem halbzahligen l) von $-l$ bis $+l$ laufen. Mit anderen Worten, wir fassen ψ_m also Komponenten einer Wellenfunktion auf, die ihre Werte nicht in \mathbb{C} sondern in V_l annimmt. Hierbei soll V_l (ganz analog zum obigen W_l) die $(2l + 1)$ -dimensionale Darstellung der Drehgruppe sein:

$$V_l \ni \sum_m \psi_m |lm\rangle. \quad (7.14)$$

Das \bar{x} als Argument von ψ_m haben wir hier weggelassen. Es sei beliebig aber fest. Den Raum V_l gibt es an jedem Punkt \bar{x} . Das ist so, wie es für ein gewöhnliches Vektorfeld an jedem Punkt \bar{x} einen Raum gibt (den Tangentialraum), in dem sein ‘Pfeil’ lebt. Wichtig ist, dass die oben benutzten $|lm\rangle$ völlig abstrakte Basisvektoren sind, die weder mit den Kugelflächenfunktionen noch mit den Eineitsvektoren in x_i -Richtung etwas zu tun haben.

Wir könnten also eine viel allgemeinere Quantenmechanik aufbauen, mit Wellenfunktionen

$$\Psi : \bar{x} \mapsto \Psi(\bar{x}) \in V_l, \quad (7.15)$$

welche von \mathbb{R}^3 in V_l abbilden. Letzteres ist der abstrakte $(2l + 1)$ -dimensionale Darstellungsraum der $SO(3)$, aufgespannt von abstrakten Basiselementen $|lm\rangle$. Wir können auch schreiben

$$\Psi(\bar{x}) = \sum_m \psi_m(\bar{x}) |lm\rangle, \quad (7.16)$$

und an eine normale, in \mathbb{C} lebende, Wellenfunktion mit $(2l + 1)$ Komponenten denken.

Entscheidend ist, dass jetzt sofort klar ist, wie Drehungen wirken:

$$\Psi(\bar{x}) \mapsto D_l(e^{i\epsilon_i L_i}) \Psi(e^{-i\epsilon_i (iT_i)} \bar{x}). \quad (7.17)$$

Hierbei ist $e^{i\epsilon_i (iT_i)} \equiv R$ die gewöhnliche Drehmatrix, welche dem abstrakten Gruppenelement $e^{i\epsilon_i L_i}$ entspricht. Die Anwendung von D_l darauf gibt die Matrix, welche dementsprechend auf V_l wirkt. Letzteres können wir aber auch ganz explizit beschreiben: Wir wissen schließlich, wie die L_i und damit auch jede Reihe aus diesen auf $|lm\rangle$ wirkt. Genau diese Wirkung ist mit $D_l(e^{i\epsilon_i L_i})$ gemeint.

Damit ist alles Grundsätzliche gesagt. Teilchen ohne Spin oder mit Spin Null (alles bisher gesagte) entsprechen dem Fall $l = 0$ bzw. $V_0 = \mathbb{C}$. Das Elektron hat Spin $(1/2)$ und wird, wie oben erklärt, durch Wellenfunktionen mit Werten in $V_{1/2} = \mathbb{C}^2$ beschrieben.

Auch höhere Spins sind relevant aber nicht ganz so populär, weil sie nicht bei elementaren, massiven und gleichzeitig stabilen Teilchen vorkommen. Aber es gibt z.B. das relativ langlebige ρ -Meson mit Spin 1. Interessanterweise (siehe Übungen) ist die Darstellung D_1 (wie man schon wegen der Dimensionszahl 3 von $V_1 = \mathbb{C}^3$ erwartet) gerade die gewohnte, definierende Darstellung der $SO(3)$. Es ist also ein Vektor-Teilchen.

7.3 Spin 1/2

Den überragend wichtigen Fall $l = 1/2$ wollen wir jetzt im Detail verstehen. Dazu identifizieren wir zunächst die verschiedenen Schreibweisen für die Basis von $V_{1/2}$, die wir schon kennen:

$$|1/2, 1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle \quad \leftrightarrow \quad |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \quad \leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.18)$$

Wenn wir die Wellenfunktion mit Indizes schreiben, werden wir je nach Situation an die Indexwerte $m = 1/2, -1/2$ oder $i = 1, 2$ (wie bei einem 2-Vektor) denken:

$$\Psi(\bar{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\bar{x}) \\ \psi_2(\bar{x}) \end{pmatrix}. \quad (7.19)$$

Wir wollen die Wirkung der L_i auf den Index (den Spin-Teil der Wellenfunktion) ganz explizit machen. Die Wirkung auf die \bar{x} -Abhängigkeit ist durch die üblichen exponentiierten Differentialoperatoren bzw. die Drehung des Argument-Vektors \bar{x} gegeben. Daran änderts sich nichts.

Was die Wirkung auf den Spin-Teil betrifft, so wissen wir schon, dass (in Matrix-Schreibweise)

$$L_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}. \quad (7.20)$$

Aus

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle. \quad (7.21)$$

folgern wir

$$L_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad L_+|\uparrow\rangle = 0 \quad \text{und} \quad L_-|\downarrow\rangle = 0, \quad L_-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad (7.22)$$

und somit

$$L_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

Wenn Sie sich an Definition von L_{\pm} durch L_x und L_y erinnern und diese umkehren, so finden Sie

$$L_x = (L_+ + L_-)/2 \quad \text{und} \quad L_y = (L_+ - L_-)/2i \quad (7.24)$$

bzw.

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.25)$$

Wenn wir nun noch von (x, y, x) zu $(1, 2, 3)$ übergehen, so haben wir schließlich

$$L_i = \sigma_i/2 \quad (7.26)$$

mit den bekannten Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (7.27)$$

Deren bekannte Kommutatorrelation

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (7.28)$$

ist natürlich mit der Lie-Algebra-Relation von $SO(3)$ konsistent.

Die Zwei-Komponenten-Wellenfunktion des Elektrons (oder jedes anderen Spin-1/2-Teilchens) transformiert sich also ganz explizit gemäß

$$\Psi(\bar{x}) \mapsto e^{i\epsilon_i S_i/\hbar} \Psi(e^{-i\epsilon_i(iT_i)\bar{x}}) , \quad (7.29)$$

wobei wir die Spin-Operatoren

$$S_i \equiv \frac{\hbar}{2}\sigma_i \quad (7.30)$$

eingeführt haben und \hbar nicht mehr unterdrücken.

Abschließend sei noch gesagt, dass wir den Hilbertraum eines solchen Teilchens auch als

$$L_2(\mathbb{R}^3) \otimes V_{1/2} \quad (7.31)$$

schreiben können. Der erste Faktor trägt die gesamte hochgradig komplizierte Darstellung von $SO(3)$ auf dem (spinlosen) Wellenfunktionsraum, der zweite die zweidimensionale Darstellung $D_{1/2}$. Aber man lasse sich durch diese kompakte Schreibweise nicht täuschen – es ist nicht damit getan, jedem Elektron ein Label für ‘up’ oder ‘down’ zu geben. Jeder der beiden Wellenfunktions-teile ist unabhängig, d.h. ein Elektron kann für seinen Up-Teil eine andere Ortraumabhängigkeit der Wellenfunktion haben als für seinen Down-Teil.

Was die Tensorprodukt-Schreibweise sehr klar macht ist, dass wir den Faktor $L_2(\mathbb{R}^3)$ wie vorher ausreduzieren können. Jedes Basis-Element jeder der Teildarstellungen bekommt nun ein Label für up oder down. Insbesondere wird das Spektrum des Wasserstoffatoms dadurch zusätzlich doppelt degeneriert (bzw., wegen der Wechselwirkung des Spins mit dem Bahndrehimpuls und dem Kern, nicht völlig degeneriert).

7.4 $SO(3)$ und $SU(2)$

Vergessen wir für den Moment die \bar{x} -Abhängigkeit der Wellenfunktion und denken nur an den ‘Spin-Raum’ $V_{1/2} = \mathbb{C}^2$. Auf diesem wirkt auf kanonische Weise eine sehr einfache und wichtige Gruppe – die Gruppe $SU(2)$ der unitären 2×2 -Matrizen mit Determinante Eins:

$$\Psi \mapsto U\Psi \quad , \quad U \in SU(2) . \quad (7.32)$$

Die zugehörige Lie-Algebra ist der Vektorraum der spurfreien, hermiteschen (2×2) -Matrizen. Dass diese Matrizen hermitesch sind, wissen wir (zumindest in etwa) schon: Wir hatten durch Diagonalisieren gezeigt, dass $U = \exp(iH)$, weil $u_i = \exp(-ih_i)$. Hierbei sind die Phasen u_i die

Eigenwerte von U und die reellen Zahlen h_i die Eigenwerte von H . Die Spurfreiheit ist auch leicht zu sehen

$$1 = \det U = \prod_i u_i = \prod_i e^{ih_i} = \exp\left(i \sum_i h_i\right), \quad (7.33)$$

so dass die Summe der Eigenwerte von H verschwinden muss.

Einschub: Der obige Kommentar ‘in etwa’ bezieht sich auf die Tatsache, dass wir genaue genommen noch nicht wissen, dass jeder unitäre Matrix diagonalisierbar ist. Doch das ist einfach: Jede Matrix hat einen Eigenvektor, sagen wir im konkreten Fall $|\psi\rangle$ mit $U|\psi\rangle = u|\psi\rangle$. Da unitäre Matrizen orthogonale Vektoren wieder in orthogonale Vektoren transformieren, und in unserem speziellen Fall der Vektor $|\psi\rangle$ seine Richtung nicht ändert, muss U das orthogonale Komplement \mathcal{H}_\perp von $|\psi\rangle$ in \mathcal{H} auf sich selbst abbilden. Auf diesem wirkt U wieder als unitäre Matrix und hat somit einen Eigenvektor. Wir können dieses Argument wiederholen, bis wir \mathcal{H} in eine Summe orthogonaler Unterräume zu U zerlegt haben.

Eine Basis spurfreier unitärer (2×2) -Matrizen kennen wir schon – die Pauli-Matrizen. Wir wissen auch, dass ihre Kommutator-Relationen (bis auf Normierung) die der $SO(3)$ -Generatoren sind. Wir haben also den Isomorphismus

$$\text{Lie}(SO(3)) \simeq \text{Lie}(SU(2)), \quad \text{mit} \quad iT_i \mapsto \sigma_i/2. \quad (7.34)$$

Da man die Gruppe durch Exponentieren der Lie-ALgebra bekommt, liegt es nun nahe zu vermuten, dass $SU(2)$ eine Darstellung von $SO(3)$ ist, und zwar genau diejenige Darstellung, welche für das Drehen des Spin-Teils von Wellenfunktionen von Spin-1/2-Teilchen zuständig ist. Dem ist aber **nicht** so!

Man sieht das Problem wie folgt: Legen wir uns (o.B.d.A.) auf eine bestimmte Richtung in $\text{Lie}(SO(3))$ fest, z.B. T_3 , und betrachten eine Drehung um α . Wie Sie wissen und auch leicht explizit nachrechnen können, gilt

$$R(\alpha) = e^{i\alpha(iT_3)} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

Noch einfacher ist es, die entsprechende Drehung der Spins zu berechnen:

$$U(\alpha) = e^{i\alpha\sigma_3/2} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}. \quad (7.36)$$

Jetzt könne wir das Problem klar erkennen: Es gilt zwar, wie erwartet, $R(2\pi) = \mathbb{1}_{3 \times 3}$, aber unerwarteterweise $U(2\pi) = -\mathbb{1}_{2 \times 2}$. Der in den letzten beiden Abschnitten dargelegte Weg, jeder Drehung, auf dem Umweg über die Lie-Algebra, eine Transformation von Spin-Teilchen zuzuordnen, scheint also in eine Katastrophe zu führen: Wir bekommen auf diese Art (im konkreten Spin-1/2-Fall) wegen der Zuordnungen

$$\mathbb{1}_{SO(3)} \rightarrow \mathbb{1}_{SU(2)} \quad \text{und} \quad \mathbb{1}_{SO(3)} \rightarrow -\mathbb{1}_{SU(2)} \quad (7.37)$$

nicht einmal eine Abbildung (geschweige denn einen Gruppen-Homomorphismus bzw. eine Darstellung).

Allerdings funktioniert es umgekehrt perfekt: Jedem Element der $SU(2)$ kann, auf dem bekannten Umweg über die Lie-Algebra, eindeutig ein Element der $SO(3)$ zugeordnet werden. Die Abbildung ist allerdings ‘zwei-zu-eins’ und damit nicht umkehrbar. In einer kleinen Umgebung der Eins ist sie jedoch eins-zu-eins, was natürlich konsistent mit der Isomorphie der beiden Lie-Algebren ist. Es gibt gewissermaßen nur global, nicht aber lokal, ein Problem. Anschaulich gesprochen ist die Situation analog zu der einfacheren zwei-zu-eins Abbildung von $U(1)$ auf sich selbst:

$$U(1) \rightarrow U(1)', \quad e^{i\varphi} \mapsto e^{2i\varphi}, \quad (7.38)$$

siehe auch Abb. 14.

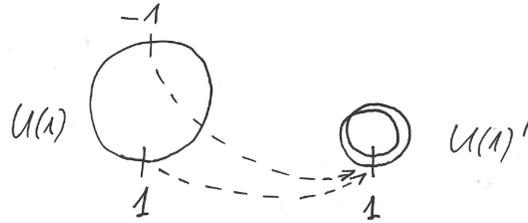


Abbildung 14: Illustration einer zwei-zu-eins Überlagerung am Beispiel der $U(1)$.

Damit liegt die physikalische Interpretation auf der Hand: Die eigentliche Rotations-Symmetrie-Gruppe des Raumes (mit darin befindlichen Teilchen mit halbzahligen Spin) ist nicht die $SO(3)$ – es ist die $SU(2)$. Letztere ist eine zwei-uns-eins Überlagerung der $SO(3)$. Wir bemerken dies im täglichen Leben nicht, weil uns nicht auffällt, dass z.B. die Drehung eines Spin-1/2-Teilchens um 360° die Phase der Wellenfunktion um ein Vorzeichen ändert. Vektoren transformieren unter der Darstellung der $SU(2)$ durch gewöhnliche Drehmatrizen: $R = R(U)$ mit $U \in SU(2)$.

Interessanterweise kann man die relevante Abbildung $SU(2) \rightarrow SO(3)$ auch ohne Umweg über die Lie-Algebra angeben. In der Tat, gegeben einen Vektor \bar{v} , definieren wir die spurfreie hermitesche Matrix

$$H(\bar{v}) \equiv v_i \sigma_i. \quad (7.39)$$

Für jedes $U \in SU(2)$ definieren wir die Matrix

$$H'(\bar{v}) \equiv UH(\bar{v})U^\dagger, \quad (7.40)$$

welche wieder hermitesch und spurfrei ist. Man kann H' demnach eindeutig in die Basis der σ_i zerlegen,

$$H'(\bar{v}) \equiv v'_i(\bar{v}) \sigma_i, \quad (7.41)$$

wobei obige Gleichung den Vektor $\bar{v}'(\bar{v})$ definiert. Es ist eine relative einfache Übungsaufgabe, zu beweisen, dass die somit definierte Abbildung

$$\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \bar{v} \mapsto \bar{v}'(\bar{v}) \quad (7.42)$$

eine Drehung darstellt (sie respektiert das Skalarprodukt und die Orientierung). Also hat man eine Drehmatrix $R = R(U)$ definiert und man kann weiter zeigen dass dies gerade die oben

gefundenen zwei-zu-eins Überlagerung realisiert. Man sieht z.B. sofort, dass $U = -\mathbb{1}$ zur Identitätsabbildung auf \mathbb{R}^3 führt.

Zum Abschluss sei noch angemerkt, dass (topologisch und als metrische Mannigfaltigkeit) $SU(2) \simeq S^3$. Man sieht dies, indem man an

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (7.43)$$

die Bedingungen $\det U = 1$ und $UU^\dagger = 1$ stellt. Diese lauten explizit

$$ad - bc = 1, \quad |a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1, \quad a\bar{c} + b\bar{d} = 0. \quad (7.44)$$

Sie werden durch $c = -\bar{b}$ und $d = \bar{a}$ gelöst, falls

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (7.45)$$

Wenn wir nun

$$a = x_1 + ix_2 \quad \text{und} \quad b = x_3 + ix_4 \quad (7.46)$$

schreiben, so wird aus (7.45) die äquivalente Bedingung

$$|\bar{x}|^2 = 1. \quad (7.47)$$

Damit haben wir $SU(2)$ durch einen Einheitsvektor $\bar{x} \in \mathbb{R}^4$ parametrisiert. Dies ist natürlich gerade die Definition von S^3 . Aus dem weiter oben zur kanonischen Abbildung $SU(2) \rightarrow SO(3)$ gesagten folgt, dass $SO(3) \simeq S^3/\mathbb{Z}_2$ gilt. Mit dieser Notation ist die Identifizierung von Punktpaaren gemeint, welche durch eine \mathbb{Z}_2 -Wirkung auf S^3 ineinander übergehen. Konkret ist hier die \mathbb{Z}_2 -Symmetrie die Spiegelung am Ursprung.

7.5 Clebsch-Gordan-Koeffizienten - Allgemeines

Dies sind Basiswechsel-Koeffizienten zwischen bestimmten kanonischen Basen von Darstellungen der $SU(2)$ (oder, allgemeiner, irgendeiner Lie-Gruppe). Sie sind physikalisch u.a. deshalb wichtig, weil sie es ermöglichen, die Messwerte des Gesamtdrehimpulses in zusammengesetzten Systemen von Teilchen mit jeweils gegebenem Teil-Drehimpuls vorherzusagen.

Wir beginnen mit einer kurzen mathematischen Vorbereitung. Gegeben sei eine Gruppe G mit Darstellungen D_1 und D_2 auf Vektorräumen V_1 und V_2 :

$$G \ni g \mapsto D_i(g) \in GL(V_i). \quad (7.48)$$

Wir betrachten die größere sogenannte **Produkt-Darstellung** $D_1 \otimes D_2$ auf $V_1 \otimes V_2$:

$$g \mapsto D_1(g) \otimes D_2(g) \in GL(V_1 \otimes V_2). \quad (7.49)$$

Diese wird in vielen Fällen **reduzibel** sein, also in eine direkte Summe von n Teildarstellungen zerfallen:

$$V_1 \otimes V_2 = V_3 \oplus \cdots \oplus V_{2+n} \quad \text{und} \quad D_1(g) \otimes D_2(g) = D_3(g) + \cdots + D_{2+n}(g). \quad (7.50)$$

Hierbei sind alle D_i irgendwelche, i.A. verschiedene, Darstellungen von G .

Bevor wir zur allgemeine Beschreibung kommen, betrachten wir ein einfaches, bereits vertrautes Beispiel: den Rang-2-Tensor von $SO(3)$. Sei die definierende oder fundamentale oder Vektor-Darstellung durch

$$v_i \mapsto R_{ij}v_j \quad (7.51)$$

gegeben. Hier ist eigentlich $R = R(g)$, wobei $g \in SO(3)$ das abstrakte Gruppenelement ist, aber wir unterdrücken das zur Kürze. Die Tensordarstellung ist durch

$$t_{ij} \mapsto R_{ik}R_{jl}t_{kl}, \quad \text{also} \quad D(R)_{ij,kl} \equiv R_{ik}R_{jl}, \quad (7.52)$$

definiert. Diese ist aber nicht irreduzibel - sie enthält z.B. die eindimensionale Darstellung auf dem Untervektorraum

$$\alpha \delta_{ij} \in \mathbb{R}^3 \otimes \mathbb{R}^3, \quad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (7.53)$$

Das dies eine Darstellung ist, sieht man daran, dass δ_{ij} eine invarianter Tensor ist und somit unter Drehungen in sich selbst übergeht. Man bezeichnet diese Darstellung als den Spur-Anteil, weil man durch Berechnung der Spur feststellt, wie groß der Anteil eines allgemeinen Tensors ist, der in dieser Darstellung transformiert.

Der normierte Basis-Vektor in dieser eindimensionalen Darstellung ist offensichtlich

$$|e_{Sp}\rangle = \delta_{ij}/\sqrt{3}. \quad (7.54)$$

Die kanonischen normierten Basis-Vektoren der gesamten Tensordarstellung seien

$$|e_{T,kl}\rangle = \delta_{ki}\delta_{lj}. \quad (7.55)$$

Dies sind Matrizen mit einer Eins auf der Position $\{kl\}$ und sonst Nullen. Jetzt betrachten wir den Überlapp eines beliebigen solchen Basis-Elements mit dem Basis-Element der Tensor-Darstellung:

$$\langle e_{T,kl}|e_{Sp}\rangle = \delta_{ki}\delta_{lj}\delta_{ij}/\sqrt{3} = \delta_{kl}/\sqrt{3}. \quad (7.56)$$

Das ist unser erster Satz von Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Wir behaupten nun (ohne Beweis), dass die Tensor-Darstellung in den Spur-Teil, den antisymmetrischen Teil und den symmetrischen Teil zerfällt,

$$D_V \otimes D_V = D_T = D_{Sp} \oplus D_A \oplus D_S. \quad (7.57)$$

Betrachten wir noch den Antisymmetrischen Teil, weil dieser auch sehr einfach und (wie wir gleich sehen werden) vertraut ist. Wir können einen allgemeinen Rang-2 antisymmetrischen Tensor mit Indizes ij als

$$\epsilon_{ijk}v_k \quad (7.58)$$

schreiben. Dies ergibt sich daraus, dass es nur drei linear unabhängige, reelle (3×3) -Matrizen gibt. Als Basis dieser Darstellung können wir also z.B.

$$|e_{A,k}\rangle = \epsilon_{ijk}/\sqrt{2} \quad (7.59)$$

wählen. Die zugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind also

$$\langle e_{T,mn} | e_{A,k} \rangle = \delta_{mi} \delta_{nj} \epsilon_{ijk} / \sqrt{2} = \epsilon_{mnk} / \sqrt{2}. \quad (7.60)$$

Man findet immer die invarianten Tensoren - das muss so sein, weil ein konsistenter Basiswechsel in allen involvierten Darstellungen nichts ändern darf.

Die Algebra der Dimensions-Zählung der Gesamt-Zerlegung lautet $3 \times 3 = 9 = 1 + 3 + 5$. Den 5-dimensionalen symmetrischen Teil, der natürlich der uns schon (zumindest abstrakt) bekannten Spin-2 Darstellung von $SU(2)$ entspricht, überlassen wir dem interessierten Leser.

7.6 Clebsch-Gordan-Koeffizienten und Drehimpuls-Addition

Im engeren Sinne sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten der nichtrelativistischen Quantenmechanik wie folgt definiert: Gegeben seien zwei unabhängige Drehimpuls-Systeme mit $l = j_1$ und $l = j_2$. Wir wollen in diesem Kapitel durchweg l durch j ersetzen, weil diese Variable in der Literatur in diesem Zusammenhang fast durchweg benutzt wird.

Das kombinierte System hat Dimension $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ und die kanonische Basis

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle, \quad (7.61)$$

wobei der rechts stehende Ausdruck nur der Abkürzung dient. Wie üblich laufen m_1 und m_2 jeweils in ganzzahligen Schritten von $-j_1$ bis j_1 und von $-j_2$ bis j_2 . Die Label j_1 und j_2 können ganz- oder halbzahlig sein.

Wir wissen nun schon, dass die (irreduziblen) Darstellungen von $SU(2)$ (wir reden ab sofort korrekterweise von $SU(2)$ und nicht von $SO(3)$, da wir halbzahligen Spin explizit mit einbeziehen) durch das Label j (ehemals l) vollständig klassifiziert sind. Außerdem zitieren wir ohne Beweis, dass endlichdimensionale unitäre Darstellungen kompakter Lie-Gruppen (das trifft hier alles zu) immer vollständig reduzibel sind. Sprich, sie zerfallen in eine direkte Summe irreduzibler Darstellungen.

Also haben wir (in hoffentlich selbsterklärender Notation)

$$D(j_1) \otimes D(j_2) = \sum_j \oplus D(j), \quad (7.62)$$

wobei wir aber noch nicht wissen, welche j (und jeweils wie oft) vorkommen. Nichtsdestotrotz ist damit klar, dass es einen Satz von Zahlen (**Clebsch-Gordan-Koeffizienten**)

$$C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \equiv \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, j m \rangle \equiv \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j, m \rangle \quad (7.63)$$

geben wird, welche den Basis-Wechsel (analog zum letzten Abschnitt) beschreiben. Das eigentlich unnötige extra Label $j_1 j_2$ des Ket-Vektors im ersten Ausdruck soll nur daran erinnern, aus welchem Produkt die fragliche Darstellung mit Drehimpuls-Label j hervorgegangen ist.

Man kann (durch Einfügen der Eins als Summe über alle Basis-Elemente) auch schreiben

$$|j_1 j_2, j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, j m \rangle. \quad (7.64)$$

Dies gibt die Zerlegung der neuen Basis (jm) in die alte Basis (m_1m_2) an.

Die physikalische Bedeutung ist sofort klar: Wenn wir z.B. zwei Teilchen mit gewissen, bekannten j_1m_1 und j_2m_2 zusammenfügen und den Gesamtdrehimpuls und die Gesamtdrehimpuls- z -Komponente messen, dann geben uns die Quadrate der CG-Koeffizienten die relevanten Wahrscheinlichkeiten.

Jetzt überlegen wir uns zunächst, welche j auf der rechten Seite von (7.62) überhaupt vorkommen. Dazu benutzen wir, wie schon beim Hamilton-Operator zusammengesetzter Systeme, die abkürzende Notation

$$\bar{J} = \bar{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \bar{J}_2 = \bar{J}_1 + \bar{J}_2, \quad (7.65)$$

wobei wir den Drehimpuls jetzt J statt L nennen (gewissermaßen weil $J = L$ oder $J = S$ – für Spin – sein kann). Unsere alte (m_1m_2) Basis hat nun scharfe Werte für $J_{1,z}$ und $J_{2,z}$ und demnach auch scharfe Werte für

$$J_z = J_{1,z} + J_{2,z}. \quad (7.66)$$

Der höchste vorkommende Wert ergibt sich für $m_1 = j_1$ und $m_2 = j_2$ und beträgt $j_1 + j_2$. Er kommt genau einmal vor, nämlich beim Vektor $|j_1j_2, j_1j_2\rangle$. Also kommt kein j mit $j > j_1 + j_2$ vor und $j = j_1 + j_2$ kommt genau einmal vor. Käme diese Darstellung z.B. zweimal vor, dann müsste es in der Produktdarstellung einen zweidimensionalen Unterraum mit Eigenwert $j_1 + j_2$ für J_z geben, im Widerspruch zum eben Gesagten.

Der zweithöchste vorkommende J_z -Wert ist $j_1 + j_2 - 1$. Der zugehörige Unterraum wird durch $|j_1j_2, (j_1 - 1)j_2\rangle$ und $|j_1j_2, j_1(j_2 - 1)\rangle$ aufgespannt und ist demnach zweidimensional. Die von uns schon gefundene Darstellung mit $j = j_1 + j_2$ trägt dazu bei, und zwar durch den Vektor $|j_1j_2, j(j - 1)\rangle$. Die fehlende Dimension kann nur dadurch geliefert werden, dass es auch die Darstellung mit $j = j_1 + j_2 - 1$ gibt, und zwar genau ein Mal.

Als nächstes zählen wir die Basisvektoren mit J_z -Eigenwert $j_1 + j_2 - 2$. Wir zeigen durch ein analoges Argument, dass die Darstellung mit $j = j_1 + j_2 - 2$ auch genau einmal vorkommen muss. Wenn wir dies fortführen und auch die schon erreichte Gesamtdimension der direkten Summe all dieser Darstellungen verfolgen, stellen wir fest, dass wir bei $j = |j_1 - j_2|$ die Zahl $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ ausgeschöpft haben. Es gilt also

$$D(j_1) \otimes D(j_2) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D(j). \quad (7.67)$$

Aus der obigen Diskussion und der Orthogonalität von Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten ergibt sich auch, dass die CG-Koeffizienten stets verschwinden, wenn $m = m_1 + m_2$ nicht erfüllt ist.

Will man über diese allgemeinen Aussagen hinausgehen und die CGs explizit bestimmen, so benutzt man eine Rekursions-Relation. Wir deuten diese Methode, Sakurai [1] folgend, aus Zeitgründen nur an. Man beginnt mit der Anwendung von J_{\pm} auf (7.64):

$$J_{\pm}|j_1j_2, jm\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1, m_2} |j_1j_2, m_1m_2\rangle \langle j_1j_2, m_1m_2|j_1j_2, jm\rangle. \quad (7.68)$$

Dann erinnert man sich an $|j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ und benutzt (dreimal) die Beziehung (vgl. (5.41))

$$J_{\pm}|jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle. \quad (7.69)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j_1 j_2, j, m\pm 1\rangle &= \sum_{m_1, m_2} \left(\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1\pm 1)}|j_1 j_2, m_1\pm 1, m_2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2\pm 1)}|j_1 j_2, m_1, m_2\pm 1\rangle \right) \\ &\quad \times \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, jm\rangle. \end{aligned} \quad (7.70)$$

Jetzt multiplizieren wir beide Seiten mit $\langle j_1 j_2, m'_1 m'_2 |$ und benutzen die Orthonormiertheit dieser Basis. Die Summen kollabieren auf jeweils nur einen Term und es folgt

$$\begin{aligned} &\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \langle j_1 j_2, m'_1 m'_2 | j_1 j_2, j, m\pm 1\rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - (m'_1 \mp 1)m'_1} \langle j_1 j_2, m'_1 \mp 1, m'_2 | j_1 j_2, jm\rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - (m'_2 \mp 1)m'_2} \langle j_1 j_2, m'_1, m'_2 \mp 1 | j_1 j_2, jm\rangle. \end{aligned} \quad (7.71)$$

Die Striche bei m_1 und m_2 kann man jetzt natürlich auch weglassen. Wir müssen dies als eine Beziehung für jeweils fest gewählte $j_1 j_2$ lesen. Außerdem ist, bei jeweils fest gewähltem Vorzeichen, m durch m_1 und m_2 bestimmt. Wir haben es also mit einer Beziehung zwischen jeweils 3 Punkten in der m_1 - m_2 -Ebene zu tun. Wenn man genau überlegt, welche Punkte in dieser Ebene überhaupt nichtverschwindende CGs haben dürfen, dann stellt man fest, dass man genug Information hat, alle relativen Faktoren zwischen den CGs zu bestimmen. Die relative Normierung zwischen den verschiedenen j -Werten fixiert man mittels Unitarität der Gesamt-CG-Matrix. Dies ist genauer in [1] erklärt. Auch der für die Atomphysik besonders relevante Fall j_1 ganzzahlig und $j_2 = 1/2$ (Addition von Bahn- und Spin-Drehimpuls) ist dort durchgerechnet.

Zum Abschluss betrachten wir hier nur noch den einfachsten nichttrivialen Fall der Addition zweier Spin-1/2-Systeme. Die ursprüngliche Basis ist hierbei klarerweise (in abgekürzter aber hoffentlich eindeutiger Notation)

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (7.72)$$

Die Dimensions-Algebra ist, wie oben erklärt, $2 \times 2 = 4 = 3 + 1$ – die erlaubten j -Werte sind also 1 und 0. Damit ist die zweite Basis, wieder in vereinfachter Notation,

$$|0, 0\rangle, \quad |1, 1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, -1\rangle. \quad (7.73)$$

Da sich J_z zwischen den Basen direkt überträgt, gilt

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (7.74)$$

Wir wenden nun z.B. $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ auf die erste Beziehung an und benutzen

$$J_-|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle \quad \text{und} \quad J_-|1/2, 1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle. \quad (7.75)$$

Es folgt

$$|1, 0\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}. \quad (7.76)$$

Orthogonalität liefert sofort

$$|0, 0\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}. \quad (7.77)$$

Damit ist der Basiswechsel explizit vollzogen und man kann, wenn gewünscht, die CGs sofort explizit hinschreiben.

7.7 Identische Teilchen – Spin und Statistik

Es ist eine grundlegende Tatsache, wenn man so will ein experimenteller Fakt, dass es identische bzw. ununterscheidbare Teilchen gibt. In der klassischen Physik ist das bedeutungslos, da Sie zumindest prinzipiell den Teilchen im Anfangszustand Labels geben können. Dann können Sie exakt verfolgen, welches Teilchen sich wohin bewegt und damit de facto für immer so tun, als seien die Teilchen doch unterscheidbar. In der Quantenmechanik geht dies wegen der Unschärferelation prinzipiell nicht.

Wenn wir diese prinzipielle Ununterscheidbarkeit bestimmter Teilchen (z.B. zweier Elektronen) akzeptieren, dann müssen wir darauf achten, dass unsere mathematische Beschreibung dem Rechnung trägt. Genaugenommen ist die Logik so, dass wir diese mathematische Beschreibung herleiten, anwenden und schließlich durch Vergleich mit dem Experiment feststellen, dass das Postulat der Existenz identischer Teilchen richtig war.

Erinnern wir uns zunächst an zusammengesetzte Systeme unterscheidbarer Teilchen, also

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad (7.78)$$

wobei wir annehmen, dass die Faktoren isomorph sind, $\mathcal{H}_1 \simeq \mathcal{H}_2$ (z.B. denke man an zwei nicht wechselwirkende Teilchen im gleichen Potentialtopf). Es ist dann klarer,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_0 \quad (7.79)$$

zu schreiben. Auf diesem Hilbertraum definieren wir einen Permutations-Operator

$$\mathcal{P} : |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \mapsto |\psi_B\rangle \otimes |\psi_A\rangle, \quad (7.80)$$

welcher die Zustände der beiden Teilchen (kodiert in dem ersten und zweiten Tensor-Faktor) vertauscht. Im Fall von ununterscheidbaren Teilchen darf es keine Zustände geben, die unter diesem Operator (physikalisch) nichttrivial transformieren.

Letzteres ist leicht zu realisieren: Da \mathcal{P} offensichtlich hermitesch und $\mathcal{P}^2 = \mathbb{1}$, hat er eine Eigenvektorbasis zu den Eigenwerten ± 1 . Wir definieren Projektionsoperatoren (Symmetrisierer und Antisymmetrisierer)

$$P_S = (\mathbb{1} + \mathcal{P})/2, \quad P_A = (\mathbb{1} - \mathcal{P})/2, \quad (7.81)$$

welche auf die entsprechenden Unterräume projizieren:

$$\mathcal{H}_S \equiv P_S \mathcal{H}, \quad \mathcal{H}_A \equiv P_A \mathcal{H}. \quad (7.82)$$

Da uns es uns aus physikalischer Sicht nicht stört, wenn bei Anwendung von \mathcal{P} ein Vorzeichen generiert wird, können wir im Fall identischer Teilchen unseren Hilbertraum **entweder** als \mathcal{H}_S **oder** als \mathcal{H}_A wählen – beides realisiert unsere Eingangs-Forderung.

Welche Wahl wir für eine gegebene Teilchenart treffen ist an dieser Stelle willkürlich – man erhält im Rahmen der **nichtrelativistischen** Quantenmechanik in jedem Fall ein konsistentes physikalisches System. Allerdings ist die fundamentale Beschreibung der Welt nicht die nicht-relativistische Quantenmechanik sondern die relativistische Quantenfeldtheorie. (Erstere ist ein Grenzwert letzterer im Fall kleiner Energien bzw. $c \rightarrow \infty$.) Dort wird man zeigen können, dass Teilchen mit **ganzzahligem intrinsischen Spin antisymmetrisiert** und solche mit **halbzahligem intrinsischen Spin symmetrisiert** werden müssen. Technisch hängt dies mit dem oben hergeleiteten Faktor (-1) bei Drehung um 360° zusammen, was man aber erst nach Einbettung der $SO(3)$ (eigentlich $SU(2)$) in die Symmetriegruppe $SO(1, 3)$ (eigentlich $SL(2, \mathbb{C})$) der speziellen Relativitätstheorie zu einer Herleitung nutzbar machen kann.

Wir fassen zusammen:

Ganzzahliger Spin \rightarrow Wellenfunktion symmetrisch (Bosonen bzw. Bose-Statistik)
 Halbzahliger Spin \rightarrow Wellenfunktion antisymmetrisch (Fermionen bzw. Fermi-Statistik).

Dass diese beiden Möglichkeiten physikalisch verschieden sind, macht man sich am Beispiel des Produktes zweier Zwei-Zustands-System sofort klar: Die Basis von \mathcal{H}_S ist

$$|0\rangle \otimes |0\rangle, \quad (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)/\sqrt{2}, \quad |1\rangle \otimes |1\rangle, \quad (7.83)$$

hingegen ist \mathcal{H}_A eindimensional, mit Basisvektor

$$(|0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle)/\sqrt{2}. \quad (7.84)$$

Man sieht hier auch eine besonders einfache Anwendung des Pauli-Prinzips, welches aus der obigen Logik zwingend folgt: Zwei Fermionen können nicht im gleichen Zustand sein – diese Situation ist in \mathcal{H}_A schlicht nicht enthalten.

Als etwas interessanteres Beispiel betrachten wir zwei nichtwechselwirkende Spin-1/2-Teilchen im gleichen Potentialtopf (z.B. Elektronen im Kern-Potential, aber ohne Beachtung der Wechselwirkung von Spin und elektromagnetischem Feld). Nun ist \mathcal{H}_0 selbst ein Tensorprodukt aus Ortsraum-Wellenfunktion und Spin-Teil,

$$\mathcal{H}_0 \ni |\psi_\uparrow(\bar{x})\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\psi_\downarrow(\bar{x})\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (7.85)$$

Wenn wir uns, die Ortsabhängigkeit betreffend, auf den Grundzustand beschränken, $\psi_\uparrow(\bar{x}) = \psi_\downarrow(\bar{x}) = \psi_0(\bar{x})$, dann beschränken wir uns in \mathcal{H}_0 auf einen zweidimensionalen Unterraum. Die entsprechende Basis ist

$$\mathcal{H}_0 \ni |\psi_0(\bar{x})\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\psi_0(\bar{x})\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (7.86)$$

Jetzt betrachten wir

$$\mathcal{H}_A \subset \mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_0 \quad (7.87)$$

und beschränken uns in \mathcal{H}_A wiederum nur auf den Unterraum, der aus dem oben definierten, zweidimensionalen ‘Grundzustands-Anteil’ von \mathcal{H}_0 resultiert. Es ist nicht schwer, sich zu überzeugen, dass dieser eindimensional ist, mit Basisvektor

$$|\Psi\rangle\sqrt{2} = \left(|\psi_0(\bar{x})\rangle \otimes |\uparrow\rangle\right) \otimes \left(|\psi_0(\bar{y})\rangle \otimes |\downarrow\rangle\right) - \left(|\psi_0(\bar{x})\rangle \otimes |\downarrow\rangle\right) \otimes \left(|\psi_0(\bar{y})\rangle \otimes |\uparrow\rangle\right). \quad (7.88)$$

Man kann die vier Tensor-Faktoren auch umgruppieren, so dass jeweils die beiden Ortsraum- und die Spin-Teile zusammengefasst werden. Ein allgemeiner Zustand in \mathcal{H}_A kann dann als

$$\mathcal{H}_A \ni \Phi_S(\bar{x}, \bar{y}) \otimes \Sigma_A + \Phi_A(\bar{x}, \bar{y}) \otimes \Sigma_S \quad (7.89)$$

geschrieben werden, wobei

$$\Sigma_S \in (V_{1/2} \otimes V_{1/2})_S \quad \text{und} \quad \Sigma_A \in (V_{1/2} \otimes V_{1/2})_A \quad (7.90)$$

die Spin-Anteile bezeichnen und $\Phi_{S,A}$ jeweils für symmetrische bzw. antisymmetrische Funktionen bzgl. der Vertauschung von \bar{x} und \bar{y} steht. Der Zustand aus (7.88) lebt im ersten Summanden von (7.89), wobei $\Phi_S \sim \psi_0(\bar{x}) \cdot \psi_0(\bar{y})$.

Als einfache Übung überlege man sich das Spektrum eines Systems zweier nichtwechselwirkender Bosonen bzw. Fermionen (wobei bei letzteren der Spin auf ‘Up’ festgelegt sei und somit keinen Freiheitsgrad darstelle), die beide in einem harmonischen Potentialtopf gefangen sind. Die Antwort ergibt sich daraus, dass die Wellenfunktion im ersten Fall symmetrisch und im zweiten antisymmetrisch bzgl. der Vertauschung von \bar{x} und \bar{y} sein muss.

Schließlich geben wir noch die sehr naheliegende Verallgemeinerung auf Systeme n identischer Teilchen (mit $n > 2$) an. Für unterscheidbare Teilchen wäre der Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_0 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_0 \ni |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle. \quad (7.91)$$

Wir definieren den auf diesem Raum wirkenden Transpositions-Operator P_{ij} ($i, j = 1 \cdots n$) dadurch, dass er auf einem faktorisierten (d.h. nicht verschränkten) Zustand, so wie dem in (7.91), die Vektoren an den Positionen i und j vertauscht. Zum Beispiel ist

$$P_{12} |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle = |\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle. \quad (7.92)$$

Unser Ziel ist es, jeweils einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Unterraum von \mathcal{H} zu definieren, so dass auf diesen alle P_{ij} auf \mathcal{H}_S als $\mathbb{1}$ und auf \mathcal{H}_A als $-\mathbb{1}$ wirken. Dazu bemerken wir, dass jede Permutation durch Hintereinanderschaltung mehrerer Transpositionen realisiert werden kann. Wir definieren einen entsprechenden Permutations-Operator auf \mathcal{H} :

$$\mathcal{P} = P_{ij} P_{kl} P_{mn} \cdots P_{pq}. \quad (7.93)$$

Die Indizes rechts können, müssen aber nicht verschieden sein - bei gleichen Indizes wird nicht summiert. Wir nennen eine Permutation gerade/ungerade falls sie aus geradzahlig/ungeradzahlig vielen Transpositionen aufgebaut ist und schreiben in diesen beiden Fällen jeweils $g(\mathcal{P}) = +1$ und $g(\mathcal{P}) = -1$. Jetzt definieren wir den Symmetrisierer und Antisymmetrisierer

$$S = \frac{1}{n!} \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \quad \text{und} \quad A = \frac{1}{n!} \sum_{\mathcal{P}} g(\mathcal{P}) \mathcal{P}, \quad (7.94)$$

wobei die Summe über alle $n!$ verschiedenen Permutationen läuft. Es ist leicht, sich zu überlegen, dass S und A Projektoren sind. Der eingangs diskutierte Fall $n = 2$ ist in dieser allgemeineren Definition inbegriffen, hat allerdings die Besonderheit, dass dann $S + A = \mathbb{1}$ gilt. Für $n > 2$ ist $S + A \neq \mathbb{1}$.

Wir definieren schließlich, jeweils für Bosonen und Fermionen,

$$\mathcal{H}_S = S\mathcal{H} \quad \text{und} \quad \mathcal{H}_A = A\mathcal{H} \quad (7.95)$$

und überlassen es dem Leser (bzw. der Quantenstatistik-Vorlesung), Anwendungen zu erkunden.

7.8 Kopplung an Magnetfelder

Wie aus der Elektrodynamik bekannt, besitzt eine auf einer Kreisbahn laufende Ladung q ein magnetisches Moment,

$$\bar{\mu}_{Bahn} = \frac{q}{2mc} \bar{L}, \quad (7.96)$$

wobei \bar{L} der der Kreisbewegung entsprechende Drehimpuls ist. Stellt man sich nun den Elektronen-Spin als Resultat der Rotation einer räumlich verteilten Ladungsdichte vor, so erwartet man ein entsprechendes, durch den Spin \bar{S} verursachtes magnetisches Moment. Dieses Bild ist falsch, doch das Resultat stimmt zumindest qualitativ:

$$\bar{\mu}_{Spin} = \frac{(-e)g}{2mc} \bar{S} \quad \text{mit} \quad g = 2. \quad (7.97)$$

Hier ist g der Landé oder gyromagnetische Faktor oder einfach g -Faktor. Der Wert $g = 2$ folgt aus der Quantenelektrodynamik (QED) und erhält bei genauerer Analyse kleine Korrekturen (unterdrückt durch die dimensionslose Kopplungskonstante α der QED), die jedoch sehr genau berechnet werden können.

In der klassischen Elektrodynamik geht die relative Orientierung eines magnetischen Momentes im äußeren (fest vorgegebenen) Magnetfeld mit einem energetischen Effekt $\Delta E = -\bar{\mu}_{Bahn} \cdot \bar{B}$ einher. Betrachten wir die Quantendynamik eines Elektrons (allgemeiner, eines geladenen Elementarteilchens mit Spin $1/2$) in einem äußeren (klassischen, fest vorgegebenen) Magnetfeld, so müssen wir zum Hamilton-Operator den Term

$$\Delta H = -\bar{\mu}_{Spin} \cdot \bar{B} = \frac{e\hbar}{2mc} \bar{\sigma} \cdot \bar{B} \equiv \mu_B \bar{\sigma} \cdot \bar{B} \quad (7.98)$$

hinzufügen. Hier ist $\bar{\sigma}$ der Vektor aus den drei Pauli-Matrizen und μ_B das Bohrsche Magneton. Der Vektor $\bar{B} = \bar{B}(\bar{x})$ darf ortsabhängig sein. Das Ganze ist als Korrektur zur zweikomponentigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi \quad \text{mit} \quad \Psi(\bar{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\bar{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\bar{x}) \end{pmatrix} \quad (7.99)$$

zu lesen. Diese heißt auch Pauli-Gleichung, beinhaltet aber noch andere Terme, die nichts mit dem Spin zu tun haben und zu denen wir gleich kommen werden.

8 Weitere konzeptionelle Themen

8.1 Heisenberg-Bild

Wir haben die große Bedeutung der Gruppe der unitären Transformation von \mathcal{H} bereits mehrfach gesehen. Zum einen können solche Transformation für Basiswechsel genutzt werden:

$$|i'\rangle = U|i\rangle, \quad i \in I. \quad (8.1)$$

Zum anderen sind Darstellungen von Symmetriegruppen, $D(G) \ni U(g)$ mit $g \in G$, von diesem Typ. Das spezielle an diesem Typ von Transformationen besteht darin, dass H mit Generatoren der Symmetriegruppe vertauscht,

$$[H, D(T_i)] = 0, \quad T_i \in \text{Lie}(G). \quad (8.2)$$

Dies führt dazu, dass die Dynamik mit der Wirkung der Symmetriegruppe vertauscht:

$$U(g)e^{-iHt/\hbar} = e^{-iHt/\hbar}U(g). \quad (8.3)$$

Nun wollen wir noch eine andere, sehr wichtige und allgemeine Anwendung der Gruppe unitärer Transformationen von \mathcal{H} kennenlernen: Wir erinnern uns zunächst, dass der Zeitentwicklungsoperator

$$U(t, t_0 = 0) = U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (8.4)$$

von diesem Typ ist. Wir können nun, zu **jedem** Zeitpunkt t , eine Transformation auf \mathcal{H} anwenden, welche der die Zeitentwicklung umkehrt bzw. jeden Vektor auf den Vektor bei $t = 0$ abbildet, aus dem er sich entwickelt hat:

$$|\psi_t\rangle \mapsto e^{iHt/\hbar}|\psi_t\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (8.5)$$

Wenn wir trotzdem die Physik zur Zeit t beschreiben wollen, dann müssen wir nur gleichzeitig, die Operatoren entsprechend transformieren:

$$O \mapsto O_H(t) \equiv e^{iHt/\hbar}Oe^{-iHt/\hbar}. \quad (8.6)$$

Man nennt $O_H(t)$ einen Operator im Heisenberg-Bild, und er ist zeitabhängig, weil die Transformation die ihn aus dem ursprünglichen Bild (dem **Schrödinger-Bild**) erzeugt hat, zeitabhängig ist. Wie gefordert, sind Erwartungswerte und damit physikalische Vorhersagen in beiden Bildern gleich:

$$\langle \psi_t | O | \psi_t \rangle = \langle \psi_0 | e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | O_H(t) | \psi_0 \rangle. \quad (8.7)$$

Wir fassen zusammen: Im uns bisher vertrauten Bild, dem **Schrödinger Bild**, sind Observablen zeitunabhängig und die Dynamik steckt in den Zuständen:

$$O = \text{const.}, \quad |\psi_t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi_0\rangle. \quad (8.8)$$

Im **Heisenberg-Bild** hingegen entwickeln sich die Operatoren in der Zeit und die Zustände sind konstant:

$$O_H(t) = e^{iHt/\hbar}Oe^{-iHt/\hbar}, \quad |\psi_H\rangle = |\psi_0\rangle = \text{const.} \quad (8.9)$$

Erwartungswerte werden in **beiden** Bildern durch ‘Sandwichen’ des Operators zwischen Bra- und Ket-Zustand berechnet und sind, wie es physikalisch sein muss, gleich.

Im Schrödinger-Bild kann man die Dynamik als Ergebnis des Lösen einer Differentialgleichung, der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_t\rangle = H |\psi_t\rangle \quad (8.10)$$

auffassen. Dies geht auch im Heisenberg-Bild, wobei die entsprechende Bewegungsgleichung für Operatoren

$$\frac{d}{dt}O_H = \frac{i}{\hbar}[H, O_H] \quad (8.11)$$

ist. Das rechnet man problemlos nach:

$$\frac{d}{dt}O_H = \frac{d}{dt}e^{iHt/\hbar}Oe^{-iHt/\hbar} = \frac{i}{\hbar}(He^{iHt/\hbar}Oe^{-iHt/\hbar} - e^{iHt/\hbar}Oe^{-iHt/\hbar}H) = \frac{i}{\hbar}[H, O_H]. \quad (8.12)$$

Bemerkenswert ist noch, dass die obige Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild bis auf die Ersetzung $[\cdot, \cdot] \mapsto \{\cdot, \cdot\}$ und den Faktor $1/i\hbar$ genau den Bewegungsgleichungen der klassischen Hamiltondynamik entspricht:

$$\frac{d}{dt}O = \{O, H\}. \quad (8.13)$$

Speziell für die Observablen bzw. Operatoren x und p sind dies natürlich die Hamilton-Gleichungen bzw. deren quantenmechanische Version:

$$\frac{d}{dt}p_H = \frac{i}{\hbar}[H, p_H] \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}x_H = \frac{i}{\hbar}[H, x_H]. \quad (8.14)$$

Jetzt wollen wir von diesen Gleichungen jeweils den Erwartungswert im Zustand $|\psi_0\rangle$ nehmen,

$$\langle\psi_0|\cdots|\psi_0\rangle \equiv \langle\cdots\rangle_{\psi(0)} \quad (8.15)$$

und anschließend wieder zum Schrödinger-Bild zurückkehren (was man, wie wir gezeigt haben, bei Erwartungswerten immer tun darf). Der Hamilton-Operator ist in beiden Bildern der selbe. Es folgt

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle_{\psi(t)} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, p] \rangle_{\psi(t)} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}\langle x \rangle_{\psi(t)} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, x] \rangle_{\psi(t)}. \quad (8.16)$$

Nun betrachten wir speziell (zur Einfachheit in $d = 1$)

$$H = p^2/2m + V(x) \quad (8.17)$$

und berechnen die relevanten Kommutatoren:

$$[p^2, x] = p[p, x] + [p, x]p = -2i\hbar p \quad (8.18)$$

und

$$[V(x), p] = V(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)V(x) = i\hbar V'(x). \quad (8.19)$$

Damit wird aus (8.16)

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle_{\psi(t)} = -\langle V'(x) \rangle_{\psi(t)} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}\langle x \rangle_{\psi(t)} = \langle p/m \rangle_{\psi(t)}. \quad (8.20)$$

Man bezeichnet diese beiden Gleichungen (bzw. die naheliegende Übertragung auf $d = 3$) als **Ehrenfest-Theorem**: Die Erwartungswerte von x und p gehorchen den klassischen Bewegungsgleichungen.

Abschließend sei noch angemerkt, dass wir die Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild auch für Operatoren herleiten können, welche schon von vornherein eine **intrinsic** oder **explizite** Zeitabhängigkeit besitzen: $O = O(t)$ bereits im Schrödinger-Bild. Für diese gilt

$$\frac{d}{dt}O_H = \frac{i}{\hbar}[H, O_H] + \frac{\partial}{\partial t}O_H, \quad (8.21)$$

wie man leicht nachrechnet. Außerdem können wir auch im Fall eines explizit zeitabhängigen Hamilton-Operators zum Heisenberg-Bild wechseln. Dann können wir bei der entsprechenden Transformation aber nicht mit $\exp(\mp iHt/\hbar)$ arbeiten, sondern müssen $U(t, 0)$ und $U(t, 0)^{-1}$ benutzen.

8.2 Zeitunabhängige Störungstheorie

Es kommt sehr oft vor, dass man ein gewisses einfaches System (mit Hamilton-Operator H_0) gelöst hat, sich aber physikalisch für ein System interessiert, dessen Dynamik geringfügig von diesem abweicht:

$$H = H_0 + \lambda H_1. \quad (8.22)$$

Hier ist λ unser **kleiner Parameter** und wir wollen unsere Analyse auf Reihenentwicklungen in λ stützen. Wir folgen der sehr prägnanten Darstellung in Schwabl [14].

Sei also eine Eigenvektorbasis von H_0 bekannt:

$$H_0|i^0\rangle = E_i^0|i^0\rangle. \quad (8.23)$$

Wir suchen die Eigenvektorbasis des gestörten Systems:

$$H|i\rangle = E_i|i\rangle. \quad (8.24)$$

Da λ unser kleiner Parameter ist und der Limes $\lambda \rightarrow 0$ vom gestörten zum ungestörten System zurückführt, liegt es nahe, einen Potenzreihensatz in λ zu machen:

$$E_i = E_i^0 + \lambda E_i^1 + \lambda^2 E_i^2 + \dots \quad (8.25)$$

$$|i\rangle = |i^0\rangle + \lambda|i^1\rangle + \lambda^2|i^2\rangle + \dots. \quad (8.26)$$

Die Konvergenz dieser λ^n -Reihen ist a priori nicht garantiert. Oft ist sie selbst bei einfachen Systemen nicht gegeben. Trotzdem geben in vielen Fällen die ersten Teilsummen immer besser werdende Näherungen, die jedoch dann ab einem gewissen kritischen n wieder schlechter werden (**asymptotische Reihe**). Manchmal kann man trotzdem (durch gewisse mathematische Prozeduren, z.B. **Borel-Summation**) aus der Reihe auf eindeutige und exakte Art Funktionen $E(\lambda)$ und $|i(\lambda)\rangle$ definieren, so dass das gestörte System exakt oder zumindest gut beschrieben wird. Es gibt jedoch auch Fälle, in denen gewisse qualitative Änderungen zwischen $\lambda = 0$ und $\lambda \neq 0$ von der Störungsreihe prinzipiell nicht gesehen werden.

Jetzt setzen wir (8.25), (8.26) und (8.22) in (8.24) ein und fordern die Gleichheit der Koeffizienten von λ^0 , λ^1 , λ^2 usw. usf. Man findet

$$H_0|i^0\rangle = E_i^0|i^0\rangle \quad (8.27)$$

$$H_0|i^1\rangle + H_1|i^0\rangle = E_i^0|i^1\rangle + E_i^1|i^0\rangle \quad (8.28)$$

$$H_0|i^2\rangle + H_1|i^1\rangle = E_i^0|i^2\rangle + E_i^1|i^1\rangle + E_i^2|i^0\rangle \quad (8.29)$$

$$\dots \quad (8.30)$$

Die erste Zeile reproduziert natürlich nur, was wir über das ungestörte System schon wissen. Aber die folgenden Zeilen können wir nutzen, um systematisch die Korrekturen zu Eigenwerten und Eigenvektoren zu bestimmen.

Zunächst kann man (8.28) von links mit $\langle i^0|$ multiplizieren und findet, unter Ausnutzung von $\langle i^0|H_0 = \langle i^0|E_i^0$, dass

$$E_i^1 = \langle i^0|H_1|i^0\rangle. \quad (8.31)$$

Dies ist bereits ein sehr wichtiges Ergebnis: **Die führende Korrektur zum Energieeigenwert ist gleich entsprechenden Matrixelement des Störungsoperators.**

Um auch die Korrekturen zu den Eigenvektoren zu bestimmen, wählt man die Normierung von $|i\rangle$ am geschicktesten als

$$\langle i^0|i\rangle = 1. \quad (8.32)$$

Die Tatsache, dass unsere gestörten Eigenvektoren dann nicht auf Eins normiert sind, wird uns nicht stören. (Wir müssen uns dessen aber natürlich bewusst sein.) Mit (8.26) folgt daraus

$$1 + \lambda\langle i^0|i^1\rangle + \lambda^2\langle i^0|i^2\rangle + \dots = 1. \quad (8.33)$$

Damit dies für alle λ gelten kann, muss

$$\langle i^0|i^1\rangle = 0, \quad \langle i^0|i^2\rangle = 0, \quad \text{usw.} \quad (8.34)$$

gelten. Die Korrekturterme zu jedem der Eigenvektoren sind also alle zum entsprechenden ungestörten Eigenvektor orthogonal. Insbesondere lautet die Zerlegung der Korrektur erster Ordnung in die ungestörte Basis

$$|i^1\rangle = \sum_{j \neq i} c_j |j^0\rangle, \quad \text{wobei} \quad c_j = \langle j^0|i^1\rangle. \quad (8.35)$$

Die c_j können wir nun aus (8.28) extrahieren, indem wir von links mit $\langle j^0|$ (für $j \neq i$) multiplizieren:

$$\langle j^0|H_0|i^1\rangle + \langle j^0|H_1|i^0\rangle = \langle j^0|E_i^0|i^1\rangle \quad (8.36)$$

$$E_j^0 c_j + \langle j^0|H_1|i^0\rangle = E_i^0 c_j, \quad (8.37)$$

wobei hier *nicht* über j summiert wird. Es folgt

$$c_j = \frac{\langle j^0|H_1|i^0\rangle}{E_i^0 - E_j^0} \quad (8.38)$$

und schließlich unser **Hauptresultat**:

$$|i^1\rangle = \sum_{j \neq i} \frac{|j^0\rangle \langle j^0|H_1|i^0\rangle}{E_i^0 - E_j^0}. \quad (8.39)$$

Man kann das Verfahren systematisch zu höheren Ordnungen fortsetzen, aber wir begnügen uns mit diesem Resultat in **linearer Ordnung**.

Stattdessen wollen wir uns mit einer Einschränkung befassen, die wir oben stillschweigend vorgenommen haben: Wir haben angenommen, und das sieht man am deutlichsten in der Ergebnisformel, dass $E_i^0 \neq E_j^0$ für alle $i \neq j$. Unsere obige Analyse bezeichnet man deshalb auch als **nicht entartete Störungstheorie**.

Wir müssen also zusätzlich den sogenannten **entarteten Fall** betrachten. Dazu nehmen wir o.B.d.A. an, dass die ersten N Zustände entartet sind:

$$H_0|i^0\rangle = E^0|i^0\rangle \quad \text{für} \quad i = 1, \dots, N. \quad (8.40)$$

Wir betrachten die $N \times N$ -Matrix

$$\langle i^0|H_1|j^0\rangle, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (8.41)$$

welche, wie man sich leicht überzeugt, hermitesch ist. Wir können also auf dem E^0 Eigenraum eine neue Basis

$$|\alpha\rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (8.42)$$

finden, so dass die zu diesen Vektoren gehörige Matrix

$$\langle \alpha|H_1|\beta\rangle, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N \quad (8.43)$$

diagonal ist. Wir haben also eine teilweisen Basiswechsel,

$$|i^0\rangle \rightarrow |\alpha\rangle \quad (8.44)$$

auf dem N -dimensionalen E^0 -Unterraum durchgeführt, wobei wir die alte Basis lateinisch und die neue griechisch indizieren. Insgesamt haben wir immer noch eine Eigenvektorbasis auf \mathcal{H} :

$$|\alpha\rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad \text{zusammen mit} \quad |i^0\rangle, \quad i = N + 1, N + 2, \dots. \quad (8.45)$$

In dieser Basis können wir jetzt problemlos unsere Formeln aus der nicht entarteten Störungstheorie anwenden, weil per Konstruktion

$$\langle \alpha|H_1|\beta\rangle = 0 \quad \text{falls} \quad \alpha \neq \beta, \quad (8.46)$$

so dass in (8.39) alle potentiell divergierenden Terme verschwinden.

Zum Abschluss geben wir ein besonders einfaches Beispiel. Wir betrachten ein Modell mit zwei Potentialmulden, die durch eine Barriere getrennt sind. Als ungestörtes System sehen wir den Grenzwert einer unendlich hohen Barriere an, so dass

$$\mathcal{H}_\psi = \text{Span}\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots\}, \quad \mathcal{H}_\chi = \text{Span}\{|\chi_0\rangle, |\chi_1\rangle, \dots\}, \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_\psi \oplus \mathcal{H}_\chi. \quad (8.47)$$

Die jeweiligen Spektren könnten z.B. zwei harmonische-Oszillator-Spektren sein. Die obigen Zustände seien alle Energie-Eigenzustände mit typischer Energie-Skala E .

Jetzt korrigieren wir den Hamilton-Operator, indem wir von Null verschiedene **Tunnel-Amplituden**

$$\langle \psi_i | H_1 | \chi_j \rangle \sim \epsilon \ll E \quad (8.48)$$

zulassen. Machen wir dies ganz explizit, indem wir uns auf den zweidimensionalen Raum beschränken, der von $|\psi_0\rangle$ und $|\chi_0\rangle$ aufgespannt wird. Wir haben dann $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ und

$$H = H_0 + H_1 = \begin{pmatrix} E & \epsilon \\ \epsilon & E \end{pmatrix}, \quad |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\chi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.49)$$

Es ist nun leicht, den Stör-Hamiltonian

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix} \quad (8.50)$$

zu diagonalisieren. Die entsprechende Basis ist

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (8.51)$$

Der ungestörte Hamilton-Operator ist in dieser Basis natürlich immer noch diagonal, weil er zur Einheitsmatrix proportional ist. Die korrigierten Eigenwerte sind, wie man sofort nachrechnet, $E \pm \epsilon$.

Eine entsprechende Analyse der Schrödingergleichung in einem Doppelmuldenpotential liefert, dass die symmetrische Kombination (unser $|\psi\rangle$) immer die kleinere Energie hat. Das würde in unserem Spielzeugmodell negativem ϵ entsprechen. Letzteres leuchtet auch ein, da wir das Modell so aufgezogen haben, dass das von Null verschiedene ϵ von der Senkung einer ursprünglich unendlich hohen Barriere herkommt.

Man beachte noch, dass in diesem degenerierten Fall auch unsere ganz am Anfang stehende Formel für die Korrektur des Energie-Eigenwertes versagt. Diese hätten wir als Null berechnet, da $(H_1)_{11} = (H_1)_{22} = 0$. Der Grund ist, dass wir die Annahme gemacht hatten, dass die korrigierte Eigenzustände nahe bei den ursprünglichen liegen. Das war aber (und dies passiert im degenerierten Fall generisch) nicht der Fall: Die neuen Eigenfunktionen sind, selbst bei sehr kleinem ϵ , stark von den alten verschieden.

8.3 Zeitabhängige Störungstheorie

Wir beginnen mit einer Darstellung der Quantenmechanik, die gewissermaßen auf halber Strecke zwischen Schrödinger- und Heisenbergbild liegt. Dieses sogenannte **Wechselwirkungsbild** ist besonders dann nützlich, wenn

$$H = H_0 + H_{int}(t), \quad (8.52)$$

wobei der freie oder ungestörte Hamilton-Operator H_0 zeitunabhängig und die Wechselwirkung oder Störung H_{int} (*int* für 'interaction') zeitabhängig sein sei. Eine andere wichtige Anwendung

liegt in der störungstheoretischen Behandlung der Quantenfeldtheorie, wo diese Bild selbst dann nützlich ist, wenn H_{int} auch zeitunabhängig ist.

Das Wechselwirkungsbild definiert sich dadurch, dass wir einen Teil der Zeitevolution – und zwar genau den freien Teil – von den Zuständen auf die Operatoren übertragen:

$$|\psi_t\rangle_I \equiv e^{iH_0t}|\psi_t\rangle, \quad O_I(t) \equiv e^{iH_0t}O(t)e^{-iH_0t}. \quad (8.53)$$

Wir haben hier zur besseren Lesbarkeit wieder $\hbar = 1$ gesetzt. Außerdem wir der Index I für Größen im Wechselwirkungsbild benutzt – analog zum Index H für Größen im Heisenbergbild. Bitte verwechseln Sie nicht den Index int für den Störungsteil oder Wechselwirkungsteil des Hamilton-Operators mit dem Index I für Wechselwirkungsbild.

In den obigen Formeln sind $|\psi_t\rangle$ und $O(t)$ der Zustand und Operator im Schrödinger-Bild. Der Zustand $|\psi_t\rangle_I$ im Wechselwirkungs-Bild wäre zeitunabhängig, wenn $H = H_0$ gelten würde oder wenn wir den vollen Hamilton-Operator H zur Transformation benutzt hätten. Dies ist jedoch nicht der Fall und so bleibt $|\psi_t\rangle_I$ zeitabhängig. Wir haben in $O(t)$ eine explizite Zeitabhängigkeit zugelassen (obwohl viele Operatoren des Schrödinger-Bildes diese nicht haben), weil wir diesen allgemeinen Fall gleich brauchen werden.

Jetzt prüfen wir, welcher Differentialgleichung der WW-Bild-Zustand gehorcht:

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle_I &= i^2H_0e^{iH_0t}|\psi_t\rangle + e^{iH_0t}i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle \\ &= -H_0e^{iH_0t}|\psi_t\rangle + e^{iH_0t}[H_0 + H_{int}(t)]|\psi_t\rangle \\ &= e^{iH_0t}H_{int}(t)e^{-iH_0t}e^{iH_0t}|\psi_t\rangle = H_{int,I}(t)|\psi_t\rangle_I. \end{aligned} \quad (8.54)$$

Wir sehen, dass die Zeitentwicklung von $|\psi_t\rangle_I$ einer Gleichung folgt, die exakt die Form einer Schrödinger-Gleichung hat, nur dass der Hamilton-Operator durch den Wechselwirkungs-Hamiltonian $H_{int}(t)$ im Wechselwirkungsbild, also durch $H_{int,I}(t)$ ersetzt worden ist.

Wir kennen aber schon die allgemeine Lösung einer solchen Gleichung als Reihenentwicklung in $H_{int,I}$: Es ist dies die Dyson-Reihe bzw., in aufsummierter Form und angewandt auf unseren speziellen Fall:

$$|\psi_t\rangle_I = T \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt' H_{int,I}(t')\right) |\psi_{t_0}\rangle_I. \quad (8.55)$$

Details zur Herleitung dieser Formel und zur expliziten Angabe der einzelnen Term (sowie der präzisen Definition des Zeitordnungsoperators T) können Sie im entsprechenden Kapitel nachschlagen. Wir begnügen uns hier mit der prinzipiellen Aussage, dass wir eine explizite Formel für den zeitentwickelten Zustand als Reihe in H_{int} haben. Die Nützlichkeit hängt natürlich daran, dass wir die freie, durch H_0 definierte Theorie gut verstehen und nach Belieben zwischen Schrödinger- und Wechselwirkungsbild wechseln können.

8.4 Kanonische Quantisierung

Grundsätzlich ist es nicht möglich, ein klassisches System herzunehmen und auf eine wohldefinierte, eindeutige Art das entsprechende Quantensystem hinzuschreiben. Dies zu erwarten wäre auch

konzeptionell falsch, weil die Welt fundamental quantenmechanisch ist und die klassische Physik nur einen bestimmten Grenzwert bzw. eine bestimmte Näherung darstellt. Für eine sehr große und relevante Klasse von Systemen geht dies aber in gewisser Weise doch. Genauer gesagt definieren Lagrange-Funktionen mit Zeitableitungen bis zu zweiter Ordnung in den meisten Fällen vernünftige klassische wie auch Quantensysteme. Der Übergang zu letzteren heißt kanonische Quantisierung.

Wir starten mit einer Wirkung

$$S = \int dt L(q, \dot{q}) , \quad q \equiv \{q_1, \dots, q_n\} \quad (8.56)$$

und definieren wie üblich

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (8.57)$$

und

$$H = H(p, q) = p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}(p, q)) . \quad (8.58)$$

Es ist wichtig, sich stets klarzumachen, dass (8.57) nach den \dot{q}_i aufgelöst werden muss, um (8.58) zu erhalten. Die Poisson-Klammern zwischen den Sätzen kanonischer Variablen p und q sind

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} , \quad \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 . \quad (8.59)$$

Die kanonische Quantisierung (im engeren Sinne) besteht nun darin, dass man einen Hilbertraum und einen Satz von $2n$ hermiteschen Operatoren \hat{p}, \hat{q} darauf sucht, so dass **die Kommutatoren dieser Operatoren den Poisson-Klammern entsprechen, aber mit einem zusätzlichen $i\hbar$ auf der rechten Seite:**

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} , \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 . \quad (8.60)$$

Da man alle klassischen Observablen aus den p, q bauen kann und da sowohl Poisson-Klammer (auf der klassischen Seite) als auch Kommutator (auf der Quanten-Seite) distributiv sind, ergibt sich eine ‘Darstellung’ aller Observablen durch Hilbertraum-Operatoren. Dabei sind allen Poisson-Klammern durch Kommutatoren realisiert. (Wir schreiben hier ‘Darstellung’ in Anführungsstrichen, da die algebraischen Strukturen auf den beiden Seiten nicht ganz die selben sind und es zusätzlich das $i\hbar$ gibt.) Die Dynamik wird durch den Operator $H = H(\hat{p}, \hat{q})$ definiert, wobei es u.U. eine unvermeidliche Ambiguität bzgl. der Reihenfolge der p und q (‘operator ordering ambiguity’) gibt.

Auf den ersten Blick ist das sehr schön, auf den zweiten Blick aber nichts Neues: Wir wissen im Fall von $q_i \in \mathbb{R}$ durch Stone-von-Neumann schon, dass als Darstellung nur die Heisenberg-Algebra auf $L_2(\mathbb{R}^n)$ (mit dem \mathbb{R}^n parametrisiert durch die q_i) in Frage kommt:

$$\hat{q}_i = q_i \quad \text{und} \quad \hat{p}_i = -i\hbar \partial / \partial q_i . \quad (8.61)$$

Etwas interessanter wird es, wenn die q_i nicht \mathbb{R}^2 sondern einen kompakten Raum parametrisieren. Der einfachste Fall ist der starre Rotator: $n = 1$ und $q_1 \equiv x \in S^1$. Wir müssen die kanonische Quantisierung etwas allgemeiner formulieren, da x , wie wir gesehen haben, kein vernünftiger Operator werden kann. Dazu verlangen wir schlicht, dass **die Observablen eine**

Entsprechung in hermiteschen Hilbertraum-Operatoren haben, so dass die Poisson-Klammern wie oben durch Kommutatoren realisiert werden.

Im konkreten Fall müssen wir statt $x \in (0, 2\pi)$ mit $\sin(mx + \delta)$ arbeiten, wobei $m \in \mathbb{Z}$: Klassisch gilt sowohl

$$\{x, p\} = 1 \quad \text{als auch z.B.} \quad \{\sin(mx + \delta), p\} = m \cos(mx + \delta). \quad (8.62)$$

Quantenmechanisch müssen wir auf die Observable x verzichten, haben aber (auf $L_2(S^1)$ und mit $p = -i\hbar \partial/\partial x$)

$$[\sin(mx + \delta), p] = i\hbar m \cos(mx + \delta). \quad (8.63)$$

Es ist also alles so, wie man es erwartet hätte.

Die hier diskutierte kanonische Quantisierung ist natürlich vor allem dann interessant, wenn man es (z.B. in Feldtheorie, Quantengravitation, Stringtheorie etc.) mit Systemen zu tun hat, bei denen man sich aufgrund einer oft nur geratenen klassischen Wirkung an die eigentliche Definition des Quanten-Systems herantasten muss.

Ein weiteres, einfaches aber nicht ganz triviales Beispiel für die kanonische Quantisierung folgt im nächsten Abschnitt.

8.5 Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Wir erinnern uns (siehe z.B. [19]) an die klassische Wirkung

$$S = - \int_{WL} mc ds - \frac{e}{c} \int_{WL} A. \quad (8.64)$$

Hier steht ‘ WL ’ für die Weltlinie des Teilchens in $\mathbb{R}^{1,3}$ und

$$A = A_\mu dx^\mu, \quad A^\mu = (\varphi, \bar{A}) \quad (8.65)$$

ist das Eichpotential. Letzteres ist eine 1-Form, so dass das Integral im zweiten Term ohne Weiteres auf kanonische Art (siehe Theorie II) definiert ist. Wem diese abstrakte Sichtweise nicht liegt, der mag auch gerne mit

$$S = - \int_{WL} \left(mc ds + \frac{e}{c} A_\mu dx^\mu \right) \quad (8.66)$$

starten. Mit $x^\mu = (ct, \bar{x})$ und $ds^2 = c^2 dt^2 - d\bar{x}^2$ folgt sofort

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} + \frac{e}{c} \bar{A} \cdot \bar{v} - e\varphi \simeq \frac{m}{2} v^2 + \frac{e}{c} \bar{A} \cdot \bar{v} - e\varphi + \text{const.} \quad (8.67)$$

Jetzt quantisieren wir kanonisch, wozu wir zunächst zum Hamilton-Formalismus übergehen müssen. Dies geschieht mit der Definition

$$\bar{\pi} = \frac{\partial L}{\partial \bar{v}} = m\bar{v} + \frac{e}{c} \bar{A} \quad (\bar{v} \equiv \dot{\bar{x}}), \quad (8.68)$$

wobei wir die kanonischen Impulse π_i nennen, um sie von den naiven, physikalischen Impulsen $p_i = mv_i$ zu unterscheiden. Es folgt

$$H = \bar{\pi} \cdot \bar{v} - L = \left(m\bar{v} + \frac{e\bar{A}}{c} \right) \cdot \bar{v} - \frac{m}{2}\bar{v}^2 - \frac{e\bar{A}}{c} \cdot \bar{v} + e\varphi = \frac{m}{2}\bar{v}^2 + e\varphi, \quad (8.69)$$

was zunächst erschreckend einfach aussieht. Das ist aber natürlich noch nicht das Ende, weil wir H immer durch $\bar{\pi}$ statt durch \bar{v} ausdrücken müssen. Mit $m\bar{v} = \bar{\pi} - (e/c)\bar{A}$ folgt

$$H = \frac{1}{2m} \left(\bar{\pi} - \frac{e}{c}\bar{A}(\bar{x}) \right)^2 + e\varphi(\bar{x}). \quad (8.70)$$

Die eigentlich Quantisierung ist nun einfach, weil wir wissen, dass die zu den kanonischen Impulsen gehörenden Operatoren $\hat{\pi}_i$

$$[\hat{x}_i, \hat{\pi}_i] = i\hbar\delta_{ij} \quad (8.71)$$

erfüllen müssen und deshalb durch Ableitungen nach den x^i dargestellt werden:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\pi} - \frac{e}{c}\bar{A}(\hat{x}, t) \right)^2 + e\varphi(\hat{x}, t), \quad \text{mit} \quad \bar{\pi} = -i\hbar\nabla. \quad (8.72)$$

Die daraus resultierende Schrödinger-Gleichung für eine geladenes Spin-Null Teilchen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(i\hbar\nabla + \frac{e\bar{A}}{c} \right)^2 + e\varphi \right] \psi \quad (8.73)$$

kann auch als

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) \psi = \frac{1}{2m} \left(i\hbar\nabla + \frac{e\bar{A}}{c} \right)^2 \psi \quad (8.74)$$

umgeschrieben werden.

In dieser Form zeigt sie, dass sie die bekannte **Invarianz der Elektrodynamik unter Eichtransformationen**

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu\chi \quad (8.75)$$

respektiert. In der Tat, gegeben eine Lösung, können wir diese ohne die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens zu ändern mit einer raumzeitabhängigen Phase transformieren:

$$\psi(\bar{x}, t) \rightarrow \psi(\bar{x}, t) e^{-ie/(\hbar c)\chi(\bar{x}, t)}. \quad (8.76)$$

Es ist leicht nachzurechnen, dass unter der Kombination von (8.75) und (8.76) eine Lösung der Schrödinger-Gleichung wieder in eine Lösung übergeht. Betrachten wir z.B. die linke Seite von (8.74):

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi' \right) \psi' = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi - \frac{e}{c}\dot{\chi} \right) \psi e^{-ie/(\hbar c)\chi} = e^{-ie/(\hbar c)\chi} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) \psi. \quad (8.77)$$

Der entscheidende Punkt besteht darin, dass sich der Term $\sim \dot{\chi}$ mit dem Term weghebt, welcher entsteht, wenn die Zeitableitung auf den Phasenfaktor von ψ wirkt. Es bleibt nur eine Gesamtphase übrig. Auf der rechten Seite der Schrödingergleichung passiert das Gleiche. Die Phasen

links und rechts kürzen sich – die transformierte Gleichung nimmt die Form der nichttransformierten Gleichung an.

Wenn man in der obigen Schrödinger-Gleichung ψ durch eine Zweikomponentenspinor Ψ ersetzt und den weiter oben diskutierten Term für die Spin-Magnetfeld-Kopplung hinzufügt, so erhält man die sogenannte **Pauli-Gleichung** für ein Teilchen mit Spin im äußeren Feld.

Um die Pauli-Gleichung für eine präzisere Beschreibung von Atomspektren zu benutzen, fügt man u.a. noch relativistische Korrekturen (höhere Potenzen in $\bar{\pi}$) und einen Spin-Bahn-Kopplungs-Term $\sim \bar{L} \cdot \bar{S}$ hinzu. Letzterer beschreibt die Tatsache, dass der Bahn-Drehimpuls ein magnetisches Moment verursacht, mit welchem der Spin wechselwirkt. Die Ableitung dieser Terme erfolgt über den nichtrelativistischen Limes der Quantenelektrodynamik. Eine Motivation über die Dirac-Gleichung (ohne volle Feld-Quantisierung ist möglich bleibt m.E. aber konzeptionell unbefriedigend). Deshalb und aus Zeitgründen verzichten wir hier darauf.

Stattdessen wollen wir zwei einfachere Phänomene anreißen, die durch die Schrödingergleichung im elektromagnetischen Feld beschrieben werden. Der erste ist der **Aharonov-Bohm-Effekt**, vgl. Abb. 15. Dazu mache man sich zunächst klar, dass eine unendlich lange zylindrische Spule nur im inneren ein Magnetfeld erzeugt - außerhalb ist der Raum feldfrei. Das Bild zeigt einen Schnitt durch eine solche Konfiguration. Aber wegen Stokes gibt es außen natürlich ein \bar{A} -Feld. Dessen Effekt wird nun quantenmechanisch sichtbar, wenn man Teilchen auf interferenzfähige Weise oberhalb und unterhalb der Spule passieren lässt: Das Interferenzmuster wird vom \bar{A} -Feld beeinflusst, welches, wie wir oben gesehen haben, eng mit der Phase der Wellenfunktion zusammenhängt und diese beeinflusst. Man beachte auch, dass man das \bar{A} -Feld nicht wegheben kann, obwohl der Außenraum feldfrei ist ($rot(\bar{A}) = 0$). Das liegt am ‘Loch’ in der Mitte – das Gebiet ohne Feld ist nicht einfach zusammenhängend (vgl. Diskussion konservativer Kräfte in der Mechanik).

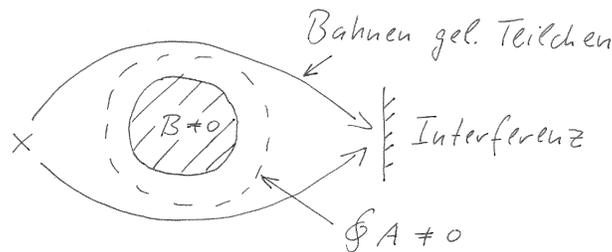


Abbildung 15: Zum Aharonov-Bohm-Effekt.

Das zweite Phänomen sind elektrisch geladene Teilchen im Magnetfeld. Zur Einfachheit schränken wir deren Bewegung auf die x - y -Ebene ein und betrachten ein homogenes Magnetfeld in z -Richtung. Klassisch gibt es ein Kontinuum von Kreisbahnen, mit beliebigem Mittelpunkt und verschiedenen Radien (je nach Energie des Teilchens). Quantenmechanisch kommt es zur Quantisierung - die entsprechenden Zustände sind als **Landau-Levels** bekannt. Die oben hergeleitete Schrödingergleichung fuer Spin-Null-Teilchen liefert dies nach einer nicht zu komplizierten Analyse – wir haben leider schlicht keine Zeit.

8.6 Die Dichtematrix

Einem beliebig aber fest gewählten Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ kann man einen Operator

$$\rho_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi| \quad (8.78)$$

zuordnen. Den Erwartungswert einer Observablen O im Zustand $|\psi\rangle$,

$$\langle O \rangle_\psi = \langle \psi | O | \psi \rangle, \quad (8.79)$$

kann man auch als

$$\langle O \rangle_\psi = \text{tr}(O\rho_\psi) \quad (8.80)$$

schreiben. Dies sieht man, indem man eine beliebige Basis wählt und die Spur berechnet:

$$\text{tr}(O\rho_\psi) = O_{ij}(\rho_\psi)_{ji} = O_{ij}\langle j|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle = \psi_i^* O_{ij}\psi_j = \langle \psi | O | \psi \rangle. \quad (8.81)$$

Noch einfacher, man ergänze $|\psi\rangle$ zu einer Orthonormalbasis und benutze diese zur Spurberechnung. Dann ist sofort klar, dass die beiden Definitionen der Erwartungswerts $\langle O \rangle_\psi$ übereinstimmen. Wir können auch die Dynamik komplett in der Sprache von sogenannten **Dichtematrizen** ρ_ψ beschreiben. Es gilt offensichtlich

$$\rho_\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho_\psi(0) e^{iHt/\hbar}. \quad (8.82)$$

Soweit haben wir nur Bekanntes in einer etwas anderen Sprache formuliert. Wir können mit dem Begriff der Dichtematrix jedoch darüber hinausgehen und den Begriff der klassischen Wahrscheinlichkeit in die Quantenmechanik einführen. In der Tat, definieren wir eine Dichtematrix (also einen Operator)

$$\rho = |\psi_1\rangle w_1 \langle\psi_1| + |\psi_2\rangle w_2 \langle\psi_2|, \quad (8.83)$$

wobei $w_i \in \mathbb{R}_+$ und $w_1 + w_2 = 1$. Wir können dieser Dichtematrix jetzt offensichtlich keinen Index ψ mehr geben, da es keinen bestimmten Zustand gibt, aus dem sie (durch Kombination von Ket und Bra) zusammengesetzt ist. Offensichtlich ist

$$\text{tr}(O\rho) = w_1 \langle \psi_1 | O | \psi_1 \rangle + w_2 \langle \psi_2 | O | \psi_2 \rangle, \quad (8.84)$$

was folgende Interpretation nahelegt:

Dichtematrizen beschreiben physikalische Situationen, in denen die klassische Wahrscheinlichkeiten für das Vorliegen gewisser Hilbertraum-Zustände gegeben sind. Es fehlt also Information, so wie in der klassischen Statistik, aber hier auf der Grundlage einer prinzipiell quantenmechanischen Beschreibung der Welt.

Die Erweiterung von (8.83) von $i = 1, 2$ auf $i = 1, \dots, N$ oder sogar zum Kontinuum,

$$\rho = \int dx w(x) |x\rangle\langle x|, \quad (8.85)$$

ist offensichtlich. Fälle, in denen ρ aus einem einzigen Ket-Bra-Term besteht, nennt man **reine Zustände**. Alle anderen **gemischte Zustände**. Wenn man ρ nicht, wie oben, als Summe vieler Ket-Bra-Terme mit Wahrscheinlichkeits-Koeffizienten definieren will, sondern axiomatisch, dann

muss man fordern, dass ρ

- (1) hermitesch ist.
- (2) positiv semidefinit ist (keine negativen Eigenwerte hat).
- (3) Spur Eins hat.

Die erste Bedingung trägt der Tatsache Rechnung, dass Erwartungswerte von Observablen reell sind; die zweite, dass Wahrscheinlichkeiten nichtnegativ sind; die dritte, dass die Summe aller Wahrscheinlichkeiten Eins ist. Man sieht letzteres auch, indem man die Observable $\mathbb{1}$ misst, und fordert, dass das Ergebnis 1 lautet:

$$1 = \text{tr}(\mathbb{1}\rho) = \text{tr}\rho. \quad (8.86)$$

Ob eine gegebene Dichtematrix zu einen reinen oder gemischten Zustand beschreibt kann man auch an der Spur Ihres Quadrats ablesen:

$$\text{tr}\rho^2 = 1 \Leftrightarrow \text{reiner Zustand} \quad , \quad \text{tr}\rho^2 < 1 \Leftrightarrow \text{gemischter Zustand} . \quad (8.87)$$

Um dies zu zeigen, diagonalisiert man ρ , nennt die (nichtnegativen) Eigenwerte w_i und findet

$$\text{tr}\rho^2 = \sum_i w_i^2 \leq \left(\sum_i w_i \right)^2 = 1. \quad (8.88)$$

Gleichheit gilt offensichtlich genau dann, wenn alle Mischterme verschwinden, d.h. wenn es nur einen von Null verschiedenen Eigenwert gibt. Dies entspricht gerade dem reinen Zustand.

8.7 Dekohärenz, Messprozess, Interpretationen der Quantenmechanik

Die Dichtematrix hat viele wichtige Anwendungen, insbesondere in der Quantenstatistik, wir wollen sie hier aber nur nutzen, um etwas zu Dekohärenz und Messprozess zu sagen. Betrachten wir ein System (z.B. unser Experiment samt Messgerät) und die Umwelt (bezeichnet mit E für Environment):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E. \quad (8.89)$$

Im Allgemeinen sind beide Hilberträume sehr groß, allein schon weil S ein klassisches Messgerät beinhaltet. Der Raum für E ist offensichtlich riesig - man denke nur an die CMB-Photonen, die ständig an allem streuen.

Wir wollen (in extremer Vereinfachung) annehmen, dass \mathcal{H}_S ein Zwei-Zustands-System ist:

$$\mathcal{H}_S = \text{Span}\{|1\rangle, |2\rangle\}. \quad (8.90)$$

Wir starten mit einem Zustand, der “kohärenten” (im Sinne einer Summe von Hilbertraumvektoren) Überlagerung von $|1\rangle$ und $|2\rangle$ entspricht:

$$|\psi_0\rangle = (|1\rangle + |2\rangle) \otimes |e\rangle. \quad (8.91)$$

Die Dynamik wird, selbst wenn wir unser System sehr gut isolieren, immer mit einer gewissen Wechselwirkung zwischen S und E einhergehen. Der Hamilton-Operator wird nie ganz perfekt eine Summe von Operatoren nur auf \mathcal{H}_S und nur auf \mathcal{H}_E sein. Also wird sich unser Zustand nach einer Weile in einen allgemeinen Zustand in \mathcal{H} entwickeln, der insbesondere nicht mehr faktorisiert. O.B.d.A. kann man diesen Zustand als

$$|\psi\rangle = |1\rangle \otimes |e_1\rangle + |2\rangle \otimes |e_2\rangle \quad (8.92)$$

schreiben, wobei die e_i gewisse (von $|e\rangle$ verschiedene) Zustände in \mathcal{H}_E bezeichnen. Wir können auch die Summenkonvention benutzen:

$$|\psi\rangle = |1\rangle \otimes |e_1\rangle + |2\rangle \otimes |e_2\rangle = |i\rangle \otimes |e_i\rangle. \quad (8.93)$$

Nun messen wir eine Observable $\mathcal{O} \otimes \mathbb{1} \in \mathcal{A}(\mathcal{H}_S) \otimes \mathcal{A}(\mathcal{H}_E)$, welche nur unser experimentelles System betrifft. Dies wird in vielen Fällen genau das sein, was wir maximal erreichen können: Die Photonen, welche aus dem Labor entkommen sind, können wir nicht zurückholen und die Messung einbeziehen. Wir finden

$$\langle O \rangle = \langle i | O | j \rangle \langle e_i | e_j \rangle. \quad (8.94)$$

Dies kann man auch als

$$\langle O \rangle = \text{tr}_S(O \rho_S) \quad \text{mit} \quad \rho_S \equiv |j\rangle \langle e_i | \mathbb{1} | e_j \rangle \langle i| \quad (8.95)$$

schreiben. Man prüft dies sofort nach, indem man die Spur (an sich eine basisunabhängige Größe) in der $(|1\rangle, |2\rangle)$ -Basis ausrechnet. Wichtig ist auch, dass natürlich O und ρ_S nur auf \mathcal{H}_S operieren, so dass die Spur auch nur über diesen Teilraum zu nehmen ist (deshalbe der Index S and 'tr').

Das für unsere Interpretation entscheidende ist nun, dass man ρ_S auch als **Teilspur** der Dichtematrix ρ_ψ über den zweiten Teilraum \mathcal{H}_E auffassen kann:

$$\rho_S = \text{tr}_E(\rho_\psi). \quad (8.96)$$

Um dies zu verstehen, wählen wir eine Basis $|\alpha\rangle$ von \mathcal{H}_E und bemerken, dass man (sowohl allgemein als auch in diesem konkreten Fall) die Spur eines Operators O_E auf \mathcal{H}_E als

$$\text{tr}_E(O_E) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | O_E | \alpha \rangle \quad (8.97)$$

schreiben kann. Wenn wir diese Formel zur Spurberechnung nun auf den Operator ρ_ψ auf $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ anwenden, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \text{tr}_E(\rho_\psi) &\equiv \sum_{\alpha} \langle \alpha | \rho_\psi | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \left[(|j\rangle \otimes |e_j\rangle) (\langle i| \otimes \langle e_i|) \right] | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha} |j\rangle \langle \alpha | e_j \rangle \langle e_i | \alpha \rangle \langle i| = \sum_{\alpha} |j\rangle \langle e_i | \alpha \rangle \langle \alpha | e_j \rangle \langle i| = |j\rangle \langle e_i | \mathbb{1} | e_j \rangle \langle i|. \end{aligned} \quad (8.98)$$

Der letzte Ausdruck entspricht natürlich genau unserer ursprünglichen Definition von ρ_S in (8.95). Wichtig ist, dass man nach Nehmen der Teilspur immer noch einen Operator hat, keine Zahl.

Lassen sie uns die Teilspur noch auf eine andere, äquivalente Art erklären: ρ_ψ ist ein Operator auf dem Gesamtraum, also eine Matrix mit Doppelindizes: $\rho_{i\alpha,k\beta}$. Dabei laufen ik über 1, 2 und α, β über die Basis von \mathcal{H}_E . Mit tr_E ist nun die Spur nur über das zweite Index-Paar gemeint. Es ist also wortwörtlich eine **teilweise Spur**, nur den Faktor-Raum \mathcal{H}_E betreffend. Das Resultat ist eine Matrix mit Indizes ik , also ein Operator, die nur noch auf \mathcal{H}_S wirkt.

Während nun ρ_ψ einen reinen Zustand beschreibt, entspricht ρ_S i.A. einem gemischten Zustand. Die entsprechende Matrix ist, ganz explizit,

$$(\rho_S)_{ij} = \langle e_i | e_j \rangle, \quad (8.99)$$

wie wir z.B. aus (8.95) ganz explizit sehen.

Damit erhält unsere Rechnung folgende physikalische Interpretation: Aus Sicht des Systems ergibt sich durch Wechselwirkung mit der Umgebung und durch die Annahme, dass wir die Umgebung nicht mitmessen können, die Möglichkeit, den Erwartungswert der Observablen O als Messung im gemischten Zustand ρ_S zu beschreiben. Es kommt sozusagen zu einem Übergang von einem reinen Zustand zu einem (effektiv) gemischten Zustand. Das Adjektiv effektiv ist wichtig, weil die Quantenevolution der ganzen Welt natürlich der Schrödingergleichung folgt und demnach ein reiner Zustand, global betrachtet, immer rein bleiben wird. Diesen Prozess des ‘effektiven’ (also nur aus Systemsicht auftretenden) Reinheits- oder Kohärenzverlustes (in unserem Fall des Zustandes $|1\rangle + |2\rangle$) nennt man **Dekohärenz**.

Nur sehr grob anreißen können wir hier noch den Aspekt der sogenannten **Pointer-States**: Bestimmte Zustände unterliegen der Dekohärenz weniger als andere bzw. sie sind sogar das natürliche Resultat des Dekohärenz-Prozesses: Nehmen wir an $|1\rangle$ und $|2\rangle$ entsprächen einer Eins bzw. Zwei auf dem Bildschirm eines Messgeräts. Dann kann man grob gesagt zeigen, dass die Dynamik der Wechselwirkung mit der Umgebung so sein wird, dass $(\rho_S)_{12}$ und $(\rho_S)_{21}$ sehr schnell extrem klein werden. Mit anderen Worten, schon bevor wir beobachten ist das Experiment de-facto in einem Zustand, der entweder ein der Eins oder der Zwei entspricht (mit Wahrscheinlichkeiten $(\rho_S)_{11}$ und $(\rho_S)_{22}$). Der Beitrag von der Superposition, kodiert in den nicht-diagonalen Dichtematrixelementen, wird extrem schnell vernachlässigbar. Zustände, für die das gilt, sind per Definition die Pointer-States. Es sind gewissermaßen die ‘normalen’ klassischen, physikalischen Situationen.

In unserem Fall liegt die Dekohärenz daran, dass das makroskopische Gerät mit dem Bildschirm stark und unvermeidlich mit der Umgebung wechselwirkt. Die Pointer-States sind die beiden klassischen Anzeige-Möglichkeiten. Ähnliches gilt für die lebende oder tote Katze, aber eben nicht für die kohärente Summe der beiden.

Kritisch wird es trotzdem, wenn wir einen Blick auf das Gerät werfen und die Eins ablesen. In der Dichtematrix-Beschreibung des Systems gibt es kein Problem, die eine klassische Situation hatte eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit und ist eingetreten. Aber die ganze Welt entwickelt sich unitär, was ist also aus globaler Sicht mit dem anderen Teil der Wellenfunktion passiert? Die **Copenhagen Interpretation** sagt, dass dieser schlicht verschwindet (die Wellenfunktion kollabiert) oder, vielleicht etwas moderner und detaillierter, dass dies eine physikalisch irrelevante Frage ist, weil man nie die ganze Wellenfunktion sehen kann.

Man kann durchaus argumentieren, dass die oben gegebene, sehr pragmatische Copenhagen Interpretation nicht völlig zufriedenstellend ist. In der Tat, ich kann z.B. als außenstehender den

Experimentator beobachten, der die Eins oder Zwei vom Bildschirm abliest. Für mich ist er nur eine komplexe Maschine und ich beschreibe ihn durch eine Dichtematrix, die (bis auf winzige Nichtdiagonalelemente) mit gewissen klassischen Wahrscheinlichkeiten das Vorliegen der Zustände ‘Eins abgelesen’ und ‘Zwei abgelesen’ anzeigt. Wenn ich ihn dann frage, was er abgelesen hat, dann verschwindet für mich eine der beiden Möglichkeiten. Das ist aber später, als es für ihn passiert ist. Wenn ich eine konsistente Beschreibung aus allen Perspektiven fordere, sieht dies problematisch aus. Eine weit verbreitete und m.E. relativ naheliegende Interpretation, die dieses Problem nicht hat, geht auf Everett zurück und wird auch **Many Worlds Interpretation** genannt. Sie besagt, dass keiner der beiden Branches (mit Eins oder mit Zwei auf dem Bildschirm) verschwindet. Es gibt beide und es gibt auch beide Experimentatoren - den, der Eins abgelesen hat und den, der Zwei abgelesen hat. Die Realität besteht also aus einem sich immer weiter verzweigenden Baum aller möglichen Welten. Wir erleben das nicht, weil unser Gehirn nicht wahrnimmt, dass es seine Existenz in beiden (im Laufe der Zeit natürlich in unendlich vielen) Branches fortsetzt. Warum wir dies nicht wahrnehmen können, ist eine Frage, die wir als Physiker an die Gehirn- oder Bewusstseinsforschung delegieren müssen. Aus Physik-Sicht ist die Everett-Many-World-Interpretation m.E. sehr befriedigend, in sich geschlossen und, was natürlich entscheidend ist, mit der experimentell perfekt funktionierenden Copehagen Interpretation konsistent.

8.8 Pfadintegralzugang

Das sogenannte Pfadintegral – ein Integral über alle möglichen Trajektorien eines Teilchens – bietet einen zur kanonischen Quantisierung alternativen Zugang zur Quantenmechanik. Wir leiten ihn zunächst aus dem Bekannten ab und erklären dann, wie man ihn als primären Zugang auffassen kann.

Wir fragen nach der sogenannten **Übergangsamplitude** von

$$|x_a\rangle \text{ bei } t_a = 0 \quad \text{zu} \quad |x_b\rangle \text{ at } t_b = t. \quad (8.100)$$

Sie ist durch

$$\langle x_b | e^{-iHt} | x_a \rangle = \langle x_b | e^{-iH\Delta} e^{-iH\Delta} \dots e^{-iH\Delta} | x_a \rangle \quad (8.101)$$

definiert und ermöglicht es uns z.B. die Wahrscheinlichkeit zu berechnen, mit der ein Teilchen, das zur Anfangszeit an einem Ort war, zu einer gewissen Endzeit an einem anderen Ort sein wird.

Wir haben oben bewusst die Zeitentwicklung in n Intervalle $\Delta \equiv t/n$ aufgeteilt. Wir fügen dazwischen nun $n - 1$ Identitäts-Operatoren ein:

$$\langle x_b | e^{-iHt} | x_a \rangle = \prod_{i=1}^{n-1} \left(\int dx_i \right) \langle x_b | e^{-iH\Delta} | x_{n-1} \rangle \langle x_{n-1} | e^{-iH\Delta} | x_{n-2} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-iH\Delta} | x_a \rangle. \quad (8.102)$$

Als nächstes schreiben wir jeden der Bra-Ket-Faktoren weiter um, indem wir auch den Identitäts-Operator in der Impuls-Eigenbasis benutzen:

$$\langle x_{i+1} | e^{-iH\Delta} | x_i \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \langle x_{i+1} | p \rangle \langle p | e^{-iH\Delta} | x_i \rangle. \quad (8.103)$$

Wir benutzen weiterhin

$$\langle x_{i+1}|p\rangle = e^{ix_{i+1}p} \quad \text{und} \quad e^{-iH\Delta} = \mathbb{1} - iH\Delta + \mathcal{O}(\Delta^2). \quad (8.104)$$

Wir haben $\Delta = t/n$ und wir werden am Limes $n \rightarrow \infty$ interessiert sein. Dazu werden die n Terme $\mathcal{O}(\Delta)$ beitragen. Aber Terme höherer Ordnung in Δ werden diesen Limes nicht überstehen und können vernachlässigt werden.

Jetzt machen wir von den Relationen

$$\langle p|\mathbb{1}|x\rangle = \langle p|x\rangle = e^{-ipx} \quad (8.105)$$

und

$$\langle p|H|x\rangle = \langle p|\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|x\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)\langle p|x\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)e^{-ipx} \quad (8.106)$$

gebrauch. Damit finden wir

$$\langle x_{i+1}|e^{-iH\Delta}|x_i\rangle \simeq \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x_{i+1}-x_i)} \left[1 - i\left(\frac{p^2}{2m} + V(x_i)\right)\Delta\right] \quad (8.107)$$

$$\simeq \int \frac{dp}{2\pi} \exp i \left[p(x_{i+1} - x_i) - \left(\frac{p^2}{2m} + V(x_i)\right)\Delta \right]. \quad (8.108)$$

Wir ersetzen die Integrationsvariable gemäß $p \rightarrow p - (x_{i+1} - x_i)m/\Delta$ und benutzen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-ap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (8.109)$$

Es folgt

$$\langle x_{i+1}|e^{-iH\Delta}|x_i\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi i\Delta/m}} \exp i \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta}\right)^2 - V(x_i) \right] \Delta \simeq \frac{1}{C(\Delta)} e^{iL(x_i, \dot{x}_i)\Delta}. \quad (8.110)$$

Hier haben wir im letzten Schritt die eckige Klammer als die ‘diskretisierte’ Lagrangefunktion L interpretiert. Dabei fassen wir x_i und x_{i+1} als die Werte der Trajektorie $x(t)$ bei $t = \Delta \cdot i$ und $t = \Delta \cdot (i + 1)$ auf. Der Ausdruck $C(\Delta) \equiv \sqrt{2\pi\Delta/m}$ ist nur eine Abkürzung.

Natürlich haben wir bislang nur einen der Faktoren in (8.102) betrachtet. Die Kombination aller solchen Faktoren liefert

$$\langle x_b|e^{-iHt}|x_a\rangle = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{C(\Delta)} \prod_{i=1}^{n-1} \left(\int \frac{dx_i}{C(\Delta)} \right) \exp i \sum_{i=0}^{i=n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta}\right)^2 - V(x_i) \right] \Delta, \quad (8.111)$$

wobei wir die Identifikationen $x_a \equiv x_0$ und $x_b = x_n$ benutzt haben. Die Summe im Exponenten ist eine diskretisierte Version der Wirkung

$$S[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(x(t), \dot{x}(t)). \quad (8.112)$$

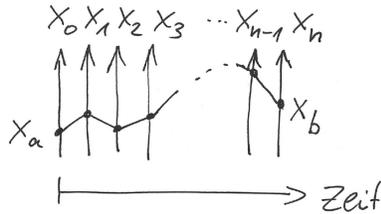


Abbildung 16: Eine der diskretisierten Trajektorien über die im Pfadintegral summiert wird.

Die Kombination aller x_i -Integrationen kann als Integral über alle Trajektorien (Pfade) aufgefasst werden, welche zu den vorgegebenen Zeiten bei x_a beginnen und bei x_b enden, vgl. Abb. 16. Der Integrand in einem derartigen Integral über Funktionen ist naturgemäß ein Funktional. Man spricht deshalb auch von einem Funktionalintegral. In unserem Fall ist das relevante Funktional $\exp(iS)$. Eine weniger präzise aber intuitivere Form unserer letzten Formel lautet

$$\langle x_b | e^{-iHt} | x_a \rangle = \int Dx e^{iS[x]}. \quad (8.113)$$

Hier symbolisiert Dx (manche Autoren schreiben auch $[Dx]$) ein Integral über alle hinreichend glatten (die nicht ganz einfache präzise Definition diskutieren wir hier nicht) Funktionen $x : [t_a, t_b] \mapsto \mathbb{R}$ mit festen Randbedingungen $x(t_a) = x_a$ und $x(t_b) = x_b$.

Gleichung (8.113) ist eine besonders einfache Pfadintegralformeln für eine quantenmechanische Größe. Sie berechnet eine Übergangsamplitude. Es gibt Pfadintegralformeln für viele andere interessante Größen, die Sie besonders in der Quantenfeldtheorie herleiten und benutzen werden. Dort ist das Pfadintegral in vielen Fällen nahezu unumgänglich. Aber auch in der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist es nützlich. Wichtiger noch: Es eröffnet einen neuen konzeptionellen Blick auf die Theorie, ihren Zusammenhang mit der klassischen Wirkung, und den klassischen Limes. Wie sie natürlich bemerkt haben, haben wir wie so oft $\hbar = 1$ gesetzt. Es wieder einzuführen ist leicht: $S \rightarrow S/\hbar$ aus Dimensionsgründen. Damit wird der klassische Limes sehr intuitiv: Der Beitrag von Trajektorien, deren Wirkung sich von der klassischen, externalisierten Wirkung $S_{ext.}$ um mehr als $\mathcal{O}(\hbar)$ unterscheidet, wird durch die schnelle Oszillation des Integranden $e^{iS/\hbar}$ unterdrückt. Deshalb dominiert die klassische Trajektorie Systeme mit großer typischer Wirkung.

Schließlich, wie am Anfang versprochen, zur **Pfadintegralquantisierung**: Wir können die Logik der obigen Herleitung einfach umdrehen und sagen, dass die Quantenmechanik (zumindest die Berechnung von Amplituden – aber das läßt sich auf alle Größen erweitern) durch das Pfadintegral **definiert** ist. Der Integrand ist per Definition $e^{iS/\hbar}$, so dass also die Wirkungsformulierung der Theorie explizit die Grundlage für die Quantisierung bildet. Wie wir gesehen haben, ist die Operator-Formulierung bzw. die damit verbundene kanonische Quantisierung dazu äquivalent.

Literatur

- [1] Sakurai, Modern Quantum Mechanics

- [2] Messiah, Quantenmechanik I+II
- [3] Landau/Lifshitz, Quantenmechanik
- [4] Quantenmechanik-Skript von Julius Wess:
<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~hebecker/QM/wess-qm1.pdf>
und <http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~hebecker/QM/wess-qm12.pdf>
- [5] Quantenmechanik-Skript von Timo Weigand:
<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~weigand/Skript-QM2011/skript.pdf>
- [6] Schwindt: Tutorium Quantenmechanik
- [7] Münster: Quantentheorie
- [8] Shankar: Principles of Quantum Mechanics
- [9] Griffiths: Introduction to Quantum Mechanics
- [10] Gottfried/Yan: Quantum Mechanics - Fundamentals
- [11] Townsend: A Modern Approach to Quantum Mechanics
- [12] Cohen-Tannoudji/Diu/Laloë: Quantenmechanik
- [13] Nolting, Grundkurs Theoretische Physik, 5/1 und 5/2
- [14] Schwabl: Quantenmechanik
- [15] Jordan: Linear Operators for Quantum Mechanics
- [16] Rynne/Youngson: Linear Functional Analysis
- [17] Reed/Simon: Functional Analysis I + II
- [18] Choquet-Bruhat/DeWitt-Morette/Dillard-Bleick: Analysis, Manifolds and Physics
- [19] Landau/Lifshitz, Feldtheorie
- [20] The Feynman lectures on Physics (Vol. 2)
- [21] Schiff, Quantum Mechanics