

Quantentheorie I

— Skript zur Vorlesung —
UNVOLLSTÄNDIGE ENTWURFSVERSION

13. Februar 2008

Prof. Dr. Haye Hinrichsen

Lehrstuhl für Theoretische Physik III
Fakultät für Physik und Astronomie
Universität Würzburg

Wintersemester 06/07

Vorwort

Dies ist die aktuelle Version des Skripts zur Vorlesung 'Quantenmechanik I', das ich parallel zur Vorlesung schreibe.

Ergänzende Abschnitte, die über den eigentlichen Vorlesungsstoff hinausgehen, sind durch drei Sternchen *** gekennzeichnet.

Skripte sind nie fehlerfrei. Bitte helfen Sie mit und benachrichtigen Sie mich bei Fehlern in den bereits vollständigen Kapiteln per Email. (hinrichsen at physik uni-wuerzburg de).

Vielen Dank

H. Hinrichsen
Würzburg, Sommersemester 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	1
1.1	Von der klassischen Physik zur Quantentheorie	1
1.1.1	Klassische Physik	1
1.1.2	Prinzip der kleinsten Wirkung	2
1.1.3	Form des Wirkungsfunktional	3
1.1.4	Quantentheorie: Eine Erklärung des Prinzips der kleinsten Wirkung	4
1.1.5	Der Messprozess	5
1.1.6	Kritik an der Theorie des Messprozesses	6
1.1.7	Verträglichkeit mit anderen Theorien	7
1.2	Wellenfunktionen	8
1.2.1	Zeitentwicklung der Amplituden	8
1.2.2	Punktförmiges Teilchen im Potential	10
1.3	Die Schrödingergleichung	12
1.3.1	Allgemeine Form der Schrödingergleichung	12
1.3.2	Wahrscheinlichkeitsdichte, Kontinuitätsgleichung und Normierung der Wellenfunktion	12
1.3.3	Erwartungswerte	14
1.3.4	Ehrenfest'sches Theorem	16
1.4	Einfache Quantensysteme	16
1.4.1	Das freie Teilchen	16
1.4.2	Der unendliche hohe Potentialtopf	20
1.5	Übungsaufgaben	28
2	Formalismus	31
2.1	Zustände und Operatoren im Hilbertraum	31
2.1.1	Quantenmechanische Zustände als Vektoren im Hilbertraum	31
2.1.2	Operatoren	36
2.2	Messungen, Observable und Unschärfe	50
2.2.1	Observable	50
2.2.2	Heisenberg-Algebra	55
2.2.3	Darstellungen der Heisenberg-Algebra	60
2.2.4	Dynamik	66
3	Drehimpuls	73
3.1	Drehimpuls	73
3.1.1	Räumliche Drehungen: Die Gruppe $SO(3)$	73
3.1.2	Räumliche Drehungen in der Quantentheorie	75
3.1.3	Drehimpulsalgebra	77
3.1.4	Bahndrehimpuls	82
3.2	Zentralfeldpotentiale	84

3.2.1	Allgemeine Formulierung	84
3.2.2	Dreidimensionaler harmonischer Oszillator	87
3.2.3	Wasserstoffatom	90
3.2.4	Magnetfeld	94
3.2.5	Eichinvariante Ankopplung	94
3.2.6	Homogenes Magnetfeld	95
4	Spin	97
4.1	Grundlagen	97
4.1.1	Was ist Spin?	97
4.1.2	Spin- $\frac{1}{2}$	100
4.1.3	Addition von Drehimpulsen	105
5	Vielteilchensysteme	113
5.1	Symmetrien von Vielteilchenzuständen	113
5.1.1	Konstruktion des Hilbertraums	113
5.1.2	Messungen	114
5.1.3	Austauschentartung	115
5.1.4	Eigenschaften des Transpositionsoperators	116
5.1.5	Symmetrisierungspostulat	116
5.1.6	(Anti-)Symmetrisierungsoperator	117
5.1.7	Pauli-Prinzip	118
5.1.8	Periodensystem der Elemente	119
5.1.9	Helium-Atom	120
5.1.10	Statistiken*	121
6	Näherungsmethoden	123
6.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	123
6.1.1	Formulierung des Problems	123
6.1.2	Stationäre Störungsrechnung ohne Entartung	124
6.1.3	Stationäre Störungsrechnung mit Entartung	126
6.2	Zeitabhängige Störungstheorie	127
6.2.1	Formulierung des Problems im Wechselwirkungsbild	127
6.2.2	Potenzreihenansatz	127
6.2.3	Übergangswahrscheinlichkeiten	128
6.2.4	Konstante Störung auf Intervall $[0, T]$	129
7	Streutheorie	131
7.1	Grundlagen	131
7.1.1	Wirkungsquerschnitt	131
7.1.2	Annahmen	132
7.1.3	Streuamplitude	133
A	Anhänge	135
A.1	Dirac δ -Funktion	135
A.2	Levi-Civita-Symbole	136
A.3	Direkte Summe und Tensorprodukt von Vektorräumen	137

1 Grundlagen

Die Quantentheorie ist die wohl wichtigste Errungenschaft der modernen Naturwissenschaften. Sie ist von fundamentaler Bedeutung, da sie auf radikale Weise das deterministische Konzept der klassischen Physik ersetzt. Die Quantentheorie ist nicht auf spezielle Systeme beschränkt, sondern universell auf alle Phänomene in der Natur anwendbar.

In den vergangenen 100 Jahren hat die Quantentheorie einen beispiellosen Siegeszug erlebt. Sie ist mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-12} verifiziert worden, – genauer als jede andere Theorie. Trotzdem ist die Interpretation der Quantentheorie bis heute umstritten. Der einfach zu verstehende präzise Formalismus einerseits und die komplexe Begrifflichkeit und Interpretation andererseits sind Ursache für die Faszination, welche die Quantentheorie ausstrahlt.

1.1 Von der klassischen Physik zur Quantentheorie

1.1.1 Klassische Physik

Bevor wir uns der Quantentheorie zuwenden, wollen wir uns zunächst die Grundlagen der klassischen Physik in Erinnerung rufen.

Der Begriff ‘klassisch’ wird in der Physik gleichbedeutend mit ‘nicht quantenmechanisch’ verwendet. Zu den klassischen Theorien gehören die theoretische Mechanik aus der ersten und die klassische Elektrodynamik aus der zweiten Kursvorlesung. Auch die spezielle und allgemeine Relativitätstheorie sind klassische Theorien.

Klassische Theorien beruhen auf folgenden grundlegenden Annahmen:

- Es gibt eine objektive beobachterunabhängige Realität.
- Die ‘Bühne’ dieser Realität ist die 3+1-dimensionale Raumzeit, in der sich Objekte (Teilchen bzw. Felder) befinden.
- Die Dynamik dieser Objekte folgt bestimmten Regeln und ist *deterministisch*, d.h. bei bekannten Anfangsbedingungen ist die Zeitentwicklung der Bewegung vollständig vorherbestimmt.

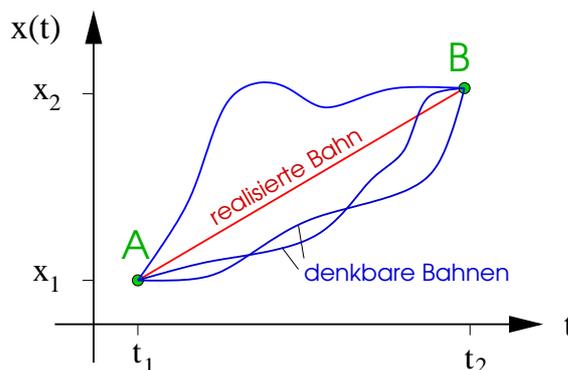
Die Regeln, welche die erlaubten Bewegungsabläufe charakterisieren, werden in der klassischen Physik in Form von *Bewegungsgleichungen* formuliert. Beispiele sind die Newtonschen Bewegungsgleichungen und die Maxwell-Gleichungen. Sie sind so beschaffen, dass sie die Bewegung der Teilchen bzw. Felder im Prinzip bei bekannten Anfangsbedingungen für alle Zeiten eindeutig vorhersagen. Wenn man dieses Konzept in radikaler Weise auf die gesamte Welt anwendet, erscheint das Universum als ein gigantisches Uhrwerk, in

dem alle Abläufe vollständig determiniert sind so dass der ‘freie Wille’ des Menschen eine Illusion ist. Diese als *Laplace’scher Dämon* bekanntgewordene Sichtweise wurde lange Zeit im Grenzbereich zwischen Physik und Philosophie kontrovers diskutiert.

Im 19. Jahrhundert kam als neue Theorie die Thermodynamik hinzu, die sich dann im 20. Jahrhundert zur klassischen statistischen Mechanik fortentwickelt hat. Hier betrachtet komplexe Vielteilchensysteme, deren Zeitentwicklung zwar noch im Prinzip, jedoch wegen der hohen Komplexität in der Praxis nicht mehr vorhergesagt werden kann. Das Vorhersagevermögen dieser Theorien beruht darauf, dass die Dynamik hinreichend komplexer Systeme als effektiv zufällig interpretiert werden kann. Thermodynamik und statistische Physik sind also nichtdeterministische Theorien, deren probabilistische Elemente aber nur auf unserer unvollständigen Kenntnis des Systems beruhen, dem dennoch zumindest *im Prinzip* eine deterministische Dynamik zugrundeliegt. In diesem Sinne sind auch Thermodynamik und statistische Physik ‘klassische’ Theorien.

1.1.2 Prinzip der kleinsten Wirkung

Klassische Theorien folgen einem übergreifenden Konstruktionsprinzip, dem so genannten *Prinzip der kleinsten Wirkung*. Als Beispiel betrachten wir einen Massepunkt, der sich in einer vorgegebenen Zeitspanne von A nach B bewegen soll (siehe Abbildung). Jeder denkbaren Trajektorie \mathcal{C} von A nach B wird dabei eine reelle Zahl $S[\mathcal{C}] \in \mathbb{R}$ zugeordnet, die als *Wirkung* (engl. action) bezeichnet wird. Das Prinzip besagt, dass diejenige Trajektorie in der Natur realisiert ist, deren Wirkung im Vergleich zu allen anderen denkbaren Bahnen minimal ist.



Von allen denkbaren Bahnen von A nach B selektiert das Prinzip der kleinsten Wirkung genau eine, die so genannte klassische Bahn.

Eigentlich fordert das Prinzip lediglich, dass die Wirkung *extremal* ist, in der Regel handelt es sich aber dabei um ein Minimum. Wie bei einer Kurve, in deren Minimum die erste Ableitung verschwindet, darf sich demzufolge die Wirkung der realisierten Trajektorie bei einer infinitesimalen Variation der Bahn $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C} + \delta\mathcal{C}$ in erster Ordnung nicht ändern, d.h.

$$\delta S = 0. \quad (1.1)$$

Die Wirkung $S[\mathcal{C}]$ ist ein *Funktional*¹, da die komplette Trajektorie \mathcal{C} auf eine reelle Zahl abgebildet wird. Aus der Bedingung $\delta S = 0$ lassen sich Bewegungsgleichungen ableiten, die in der Regel als partielle Differentialgleichungen formuliert werden können und deren Lösung die realisierte Trajektorie ist. Diese Lösung ist (von Spezialfällen abgesehen) bei gegebenen Anfangsbedingungen eindeutig, so dass das Prinzip der kleinsten Wirkung die in der Natur realisierte Bahn vollständig determiniert.

¹Eine Funktion $f(x)$ ist eine Abbildung, die eine Zahl auf eine Zahl abbildet. Ein Funktional $F[f]$ ist eine Abbildung, die eine Funktion f auf eine Zahl abbildet. Die Argumente von Funktionalen werden in eckigen Klammern geschrieben.

Wie bereits erwähnt, ist das Prinzip der kleinsten Wirkung nicht auf die Mechanik von Massepunkten beschränkt, sondern liegt allen klassischen Theorien als übergreifendes Prinzip zugrunde. Dies gilt auch für Feldtheorien wie der Elektrodynamik. \mathcal{C} ist dann natürlich keine Trajektorie mehr, sondern steht für einen bestimmten raumzeitlichen Feldverlauf, d.h. für eine bestimmte Konfiguration der Vektorfelder $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und $\vec{B}(\vec{r}, t)$ mit gewissen Randbedingungen. Auch die spezielle und allgemeine Relativitätstheorie lässt sich aus dem Wirkungsprinzip ableiten.

In nichtrelativistischen Theorien wie der klassischen Mechanik, in denen es einen universelle Zeit t gibt, wird das Wirkungsfunktional in der Regel als zeitliches Integral

$$S[\mathcal{C}] = \int_{t_A}^{t_B} L(\mathcal{C}, t) dt \quad (1.2)$$

geschrieben, wobei ist $L(\mathcal{C}, t)$ die so genannte *Lagrangefunktion* entlang der Trajektorie \mathcal{C} ist. Die Lagrangefunktion kann als Wirkungsverbrauch pro Zeiteinheit interpretiert werden. Das Prinzip der kleinsten Wirkung $\delta S = 0$ führt dann auf die bekannten Euler-Lagrange'schen Differentialgleichungen, deren Lösung die gesuchte klassische Trajektorie ist.

Zur Erinnerung: In der klassischen Mechanik haben Sie gelernt, wie man die Bewegungsgleichungen von einem Wirkungsfunktional $S = \int dt L(\dot{q}, q)$ eines Teilchens in einer Dimension ableitet. Dazu wird eine gegebene Bahn $q(t)$ infinitesimal durch $q(t) \rightarrow q(t) + \delta q(t)$ variiert, wobei die Endpunkte $q(t_0)$ und $q(t_1)$ festgehalten werden. Die Wirkung ändert sich dabei zu niedrigster Ordnung gemäß

$$\delta S = \int dt \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q}(t) \right). \quad (1.3)$$

Da $\dot{q}(t)$ und $q(t)$ nicht unabhängig voneinander sind möchte man die Änderung allein in $\delta q(t)$ ausdrücken. Dies erreicht man durch partielle Integration des zweiten Terms, wobei die Randterme wegen der verschwindenden Variation an den Endpunkten wegfällt. Da der verbleibende Ausdruck

$$\delta S = \int dt \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) \quad (1.4)$$

nach dem Prinzip der kleinsten Wirkung verschwinden soll und die Variationen $\delta q(t)$ unabhängig sind, muss der Integrand verschwinden. Daraus folgen die Euler-Lagrange'schen Bewegungsgleichungen.

1.1.3 Form des Wirkungsfunktionalis

Durch das Prinzip der kleinsten Wirkung wird die Problemstellung auf eine höhere Ebene verlagert, denn statt die physikalisch korrekten Bewegungsgleichungen zu postulieren gilt es nun, die korrekte Form des Wirkungsfunktionalis anzugeben, aus dem diese Bewegungsgleichungen folgen. Dabei stellt sich heraus, dass die Natur möglichst einfache Wirkungsfunktionale bevorzugt. Dieses nicht näher begründbare Streben der Natur ist Inhalt des so genannten *heuristischen Prinzips der Einfachheit*, demzufolge das Wirkungsfunktional aus den einfachsten nichttrivialen Termen (also in der Regel aus Termen niedrigster Ordnung) besteht, die mit den vorgegebenen Symmetrien des physikalischen Systems kompatibel sind.

Die Lagrangefunktion eines freien nichtrelativistischen Teilchens ist beispielsweise $L(\dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2$, wobei der Faktor $1/2$ lediglich zum bequemerem Differenzieren dient. Mit den Symmetrien kompatibel wäre auch ein kompliziertes Polynom der Form $L = \sum_{j=1}^{\infty} a_j \dot{q}^{2j}$,

Symmetrie [Einheit]	Erhaltungsgröße [Einheit]
Räumliche Translationsinvarianz [m]	Impuls [kg m/s]
Zeitliche Translationsinvarianz [s]	Energie [kg m ² /s ²]
Rotation [dimensionslos]	Drehimpuls [kg m ² /s]

Tabelle 1.1: Die wichtigsten Symmetrien und ihre zugeordneten Erhaltungsgrößen.

aber die Natur ist so eingerichtet, dass nur der niedrigste Term quadratischer Ordnung im Wirkungsfunktional auftritt.

Wegen des heuristischen Prinzips der Einfachheit besitzen Wirkungsfunktionale häufig eine sehr kompakte Form. So ist z.B. ist die Wirkung eines elektromagnetischen Feldes in der kovarianten Formulierung durch

$$S = \int d^4x F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (1.5)$$

gegeben, wobei $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ der Feldstärketensor ist, in dessen Komponenten die Felder $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und $\vec{B}(\vec{r}, t)$ stehen. Ebenso ist das Wirkungsfunktional der allgemeinen Relativitätstheorie nichts weiter als ein vierdimensionales raumzeitliches Integral über den Ricci-Krümmungsskalar $S \propto \int d^4x \sqrt{-g} R^2$. In allen Fällen legt die Form des Wirkungsfunktionals die realisierte Bahn vollständig fest.

Die Wirkung ist eine dimensionsbehaftete Größe mit der SI-Einheit [kg m²/s].

1.1.4 Quantentheorie: Eine Erklärung des Prinzips der kleinsten Wirkung

Wie bewerkstelligt es die Natur, die Wirkung zu minimieren? Die Quantentheorie beantwortet diese Frage damit, dass dies durch Interferenzphänomene geschieht. Dazu werden folgende Annahmen postuliert:

- In der Natur sind alle denkbaren Bewegungsabläufe simultan realisiert.
- Jeder Bewegungsablauf \mathcal{C} wird mit einer *komplexen Amplitude* $e^{iS(\mathcal{C})/\hbar}$ gewichtet, wobei $S(\mathcal{C})$ die dem Bewegungsablauf zugeordnete Wirkung ist. Dabei ist

$$\hbar = 1.0545716(\pm 2) \cdot 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}$$

eine neue fundamentale Konstante, die als *Planck'sches Wirkungsquantum* bezeichnet wird.

- Die komplexen Amplituden verschiedener Bewegungsabläufe überlagern sich additiv (Superpositionsprinzip).
- Bei einer Messung ist die Wahrscheinlichkeit eines Messergebnisses proportional zum Betragsquadrat der Summe der Amplituden aller Bewegungsabläufe, die mit dem Messergebnis kompatibel sind. Die Amplituden aller anderen Bewegungsabläufe werden auf Null gesetzt.

²Selbst das Wirkungsfunktional des Standard-Modells der Elementarteilchenphysik mit seiner Vielzahl von Teilchensorten und Symmetrien lässt sich noch bequem auf einer Seite abdrucken.

Anschaulich lässt sich dieser Mechanismus am Beispiel einer Teilchenbewegung von A nach B folgendermaßen vorstellen. Das im Punkt A startende Teilchen verliert seine objektive Realität, die darin besteht, zu einer gegebenen Zeit an irgendeinem konkreten Ort zu sein, vielmehr bewegt es sich in einer schwer zu begreifenden vielfachen Koexistenz gleichzeitig auf allen Bahnen. Es ist dabei wesentlich, dass diese Koexistenz eine physikalische Gegebenheit ist und nicht etwa wie in der statistischen Physik auf ein unvollständiges Wissen des Beobachters zurückzuführen ist. Die Annahme, dass das Teilchen vielleicht doch auf einer bestimmten Bahn entlanglaufe, die sich lediglich unserer Kenntnis entzöge, führt auf Widersprüche in der Quantentheorie und kann auch experimentell widerlegt werden. Die Koexistenz aller Möglichkeiten – auch Quantenparallelismus genannt – ist vielmehr ein Faktum und kann sogar technologisch ausgenutzt werden. Beispielsweise benutzen Quantencomputer den Quantenparallelismus zu einer hochgradig parallelisierten Informationsverarbeitung.

Gemäß dem Postulat (b) ist wird die beschriebene Koexistenz aller denkbaren Bewegungsabläufe durch einen Wellenmechanismus eingeschränkt. Dazu wird jedem Bewegungsablauf eine quantenmechanische Amplitude in Form einer komplexen Phase $e^{iS(\mathcal{C})/\hbar}$ zugeordnet, wobei $S(\mathcal{C})$ nichts anderes ist als die klassische Wirkung der Bahn. Um das Argument der Exponentialfunktion dimensionslos zu machen, wird eine neue fundamentale Naturkonstante mit der Dimension einer Wirkung, das so genannte Planck'sche Wirkungsquantum \hbar benötigt. Jedem der parallel existierenden Teilchen wird also ein komplexer Zeiger auf dem Einheitskreis zugeordnet, dessen Stellung dem Wirkungsverbrauch modulo $2\pi\hbar$ entlang der jeweiligen Bahn entspricht.

Gemäß (c) sind diese komplexen Amplituden additiv und wie bei gewöhnlichen Wellen linear superponierbar. Treffen sich beispielsweise zwei der parallel existierenden Trajektorien mit entgegengesetzter Zeigerstellung am gleichen Ort, so kommt es zu einer gegenseitigen Auslöschung. Eine Kernaussage der Quantentheorie besteht darin, dass sich fast alle der parallel existierenden Teilchenbahnen gegenseitig durch negative Interferenz auslöschen. Übrig bleiben lediglich Bahnen nahe der klassischen Bahnen mit einer Standardabweichung von $S(\mathcal{C})$ in der Größenordnung von \hbar . Durch die Interferenz der Amplituden wird also der Quantenparallelismus erheblich eingeschränkt, jedoch nicht aufgehoben.

Da \hbar extrem klein ist, sind Quanteneffekte vor allem bei Vorgängen mit kleiner Wirkung signifikant, also für sehr kleine Systemen typischerweise unterhalb der Nanometerskala. In der makroskopischen Alltagswelt scheint dagegen die klassische Physik zu gelten, die auf diesen Skalen als eine sehr gute Näherung zu betrachten ist. Dieser Effekt ist vergleichbar mit dem Übergang von der Wellenoptik zur geometrischen Optik.

1.1.5 Der Messprozess

Postulat (d) beschreibt den Vorgang eines Messprozesses und stellt damit einen Bezug zwischen der Quantenwelt und einem beobachtenden makroskopischen Subjekt her. Ausgangspunkt ist die empirische Tatsache, dass ein makroskopisches Messgerät real existierende Messwerte anzeigt. Ein Geigerzähler klickt oder er klickt nicht, jedoch beobachtet man nie eine Koexistenz beider Möglichkeiten. Ebenso zeigt der Zeiger eines Messgeräts auf eine bestimmte Zahl und nicht auf mehrere Zahlenwerte gleichzeitig. Noch niemand

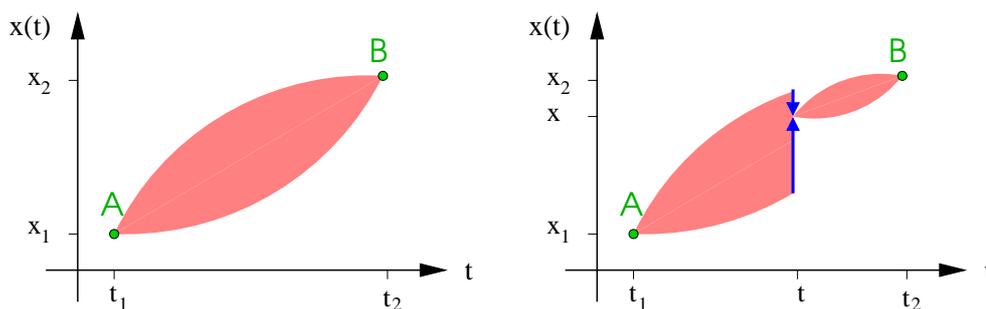


Abbildung 1.1: **Links:** Von allen denkbaren Bahnen löschen sich die meisten durch destruktive Interferenz aus, übrig bleiben die Bahnen nahe der klassischen Bahnen in dem rot schraffierten Bereich. Dieser Bereich hat eine Unschärfe in der zugeordneten Wirkung von der Größenordnung \hbar , ist aber anders als in der Zeichnung dargestellt nicht scharf begrenzt. **Rechts:** Bei einer Messung zum Zeitpunkt t kollabiert der Quantenparallelismus koexistierender Bahnen auf einen Punkt x , der dem Messergebnis entspricht.

hat den Zeiger eines Messgerätes in mehreren simultan koexistierenden Stellungen gesehen. Messgeräte sind also makroskopische Objekte, die den Regeln der klassischen Physik gehorchen.

Das Postulat für den Messprozess (d) nimmt deshalb eine Trennung zwischen dem Quantensystem einerseits und dem klassischen Messapparat andererseits vor. Auf das Beispiel einer Teilchenbewegung bezogen beschreibt das Postulat, was passiert, wenn man tatsächlich durch Messung nachschaut, wo sich das Teilchen zum Zeitpunkt t befindet. Das Ergebnis ist zufällig und die Leistungsfähigkeit der Quantentheorie besteht darin, die Wahrscheinlichkeiten für die Ergebnisse vorherzusagen. Mit dem Messprozess erhält die Quantentheorie also eine probabilistische Komponente. Die Wahrscheinlichkeit eines Ergebnisses ist dabei proportional zum Betragsquadrat der aufsummierten Amplituden aller Bewegungsabläufe, die zu diesem Ergebnis führen würden.

In dem Moment, zu dem die Messung vorgenommen wird, werden die Amplituden aller Bewegungsabläufe, die nicht zu dem festgestellten Messergebnis geführt hätten, gleich Null gesetzt. Eine unmittelbare Wiederholung der Messung würde also wiederum zum gleichen Ergebnis führen. Durch eine Messung kollabiert also der Quantenparallelismus einer Vielzahl von möglichen Realisierungen in eine bestimmte, nämlich die gemessene Realisierung. Dieser so genannte Kollaps der Wellenfunktion vollzieht sich instantan (siehe Abb. 1.1).

Die Quantentheorie unterscheidet sich von der klassischen Physik insofern, als dass ein Messprozesse von Spezialfällen abgesehen immer das zu untersuchende System durch den Kollaps der Amplituden beeinflusst bzw. stört.

1.1.6 Kritik an der Theorie des Messprozesses

Vor allem die Rolle des Messprozesses wird bis heute kontrovers diskutiert und es ist anzunehmen, dass das Postulat (d) in der jetzigen Form keinen dauerhaften Bestand haben wird. Problematisch ist einerseits die Aufspaltung der Welt in Quantensysteme und klassische Messapparate und beobachtende Subjekte. Unklar bleibt, wo diese Grenze

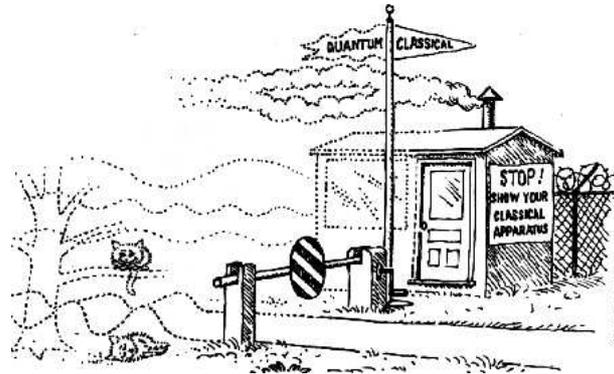


Abbildung 1.2: Schrödingers Katze [Quelle: TU Berlin]

genau anzusiedeln ist.

Johann von Neumann hat bereits frühzeitig gezeigt, dass eine solche Grenze, wenn sie denn existiert, verschiebbar ist. Doch auch die Verschiebbarkeit der Grenze löst die begrifflichen Schwierigkeiten nicht auf. Diese wurden in einem berühmten Gedankenexperiment von Erwin Schrödinger auf den Punkt gebracht: Man betrachte eine Katze, die zusammen mit einem Geigerzähler und einem radioaktiven Präparat in einer geschlossenen Kiste eingesperrt ist. Der Geigerzähler triggert eine Vorrichtung, welche die Katze tötet. Die Kiste symbolisiert hier die besagte Grenze zwischen Quantenwelt und Beobachter. Gemäß den obigen Postulaten kommt es in der geschlossenen Kiste zu einer Koexistenz der lebenden und der toten Katze, die Katze ist gewissermaßen gleichzeitig tot und lebendig. Erst wenn man den Deckel öffnet um nachzuschauen, wenn man also eine Messung vornimmt, kollabiert diese quantenmechanische Superposition entweder auf die tote oder auf die lebendige Katze mit Wahrscheinlichkeiten, die sich aus den Betragsquadraten der entsprechenden Amplituden ergeben.

Kritisiert wurde auch, dass sich dieser Kollaps instantan vollzieht, also mit Überlichtgeschwindigkeit. Allerdings kann man zeigen, dass man auf diese Weise keine Information übertragen kann, so dass die Postulate der Relativitätstheorie in ihrem Kern nicht verletzt werden.

1.1.7 Verträglichkeit mit anderen Theorien

Von ihrem Ansatz her ist die Quantentheorie universell anwendbar auf alle Systeme, die einen Konfigurationsraum (= Raum aller möglichen Bahnen) und ein darauf definiertes Wirkungsfunktional besitzen. Im Prinzip kann also die Quantentheorie auf alle klassischen physikalischen Theorien angewendet werden. Ob allerdings eine solche ‘Quantisierung’ gelingt, hängt davon ab, ob die dabei auftretende Summe über alle Konfigurationen konvergiert oder zumindest auf geeignete Weise renormiert werden kann. Im Fall der Elektrodynamik ist dies möglich, und hat zur Entwicklung der *Quantenelektrodynamik* geführt. Weitere Beispiele sind die Quantenchromodynamik und das daraus entstandene Standard-Modell der Elementarteilchenphysik. Dagegen ist eine Quantisierung der allgemeinen Relativitätstheorie bislang nicht gelungen. Im Gegensatz zu den vorherigen Beispielen, bei denen es zu einem Quantenparallelismus von Objekten (Teilchen, Fel-

der) in einer ungekrümmten Raumzeit kommt, führt die Quantisierung der Gravitation zu einem Parallelismus verschiedener Raumzeitkrümmungen, d.h. eine quantenmechanische Koexistenz verschiedener raumzeitlicher Realisierungen. Es stellt sich jedoch heraus, dass die Summe über solch eine fluktuierende Raumzeit zu unphysikalischen Divergenzen führt. Eine Theorie der Quantengravitation zu entwickeln gilt heute als eines der wichtigsten ungelösten Probleme der theoretischen Physik.

1.2 Wellenfunktionen

Da die Postulate (a)-(c) keine probabilistischen Elemente enthalten, ist es möglich, die quantenmechanischen Amplituden mit Hilfe des Wirkungsfunktionals exakt vorherzuberechnen, solange keine Messung stattfindet. Wie man diese Amplituden berechnen kann, soll nun am Beispiel eines Massepunktes in einer Dimension gezeigt werden.

Eine wichtige Größe ist die Summe der Amplituden aller Bahnen eines Teilchens von einem gegebenen Startpunkt (x_1, t_1) bis zu einem beliebigen raumzeitlichen Punkt (x, t) . Diese Größe wird als *Wellenfunktion* bezeichnet und üblicherweise mit dem griechischen Buchstaben ψ geschrieben. Die Wellenfunktion ist bis auf Normierung gegeben durch

$$\psi(x, t) \propto \sum_{\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x, t)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x, t)}]\right), \quad (1.6)$$

wobei über alle möglichen Bahnen $\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x, t)}$ von (x_1, t_1) nach (x, t) summiert wird. In dieser etwas vereinfachten Schreibweise bleibt es allerdings offen, wie diese Summe über unendlich viele denkbare Bahnen konkret auszuführen ist und wie die einzelnen Bahnen dabei zu gewichten sind. In einer präziseren Formulierung, die über den Rahmen dieser Vorlesung hinausginge, handelt es sich bei dieser Summe um ein so genanntes *Pfadintegral*, das mit Methoden der Funktionalanalysis zu behandeln ist. Doch auch mit den im 4. Semester zur Verfügung stehenden Methoden ist es möglich, die Zeitentwicklung der Wellenfunktion abzuleiten, wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird.

1.2.1 Zeitentwicklung der Amplituden

Um die Zeitentwicklung der Wellenfunktion zu berechnen, betrachten wir ein infinitesimales Zeitintervall $[t, t + \tau]$ im Limes $\tau \rightarrow 0$ und stellen die Frage, welcher Veränderung die Wellenfunktion während dieser Zeitdauer unterworfen ist, wie sich also $\psi(x, t + \tau)$ von $\psi(x, t)$ unterscheidet. Dabei lässt sich ausnutzen, dass die Wirkung einer Bahn gleich der Summe der Wirkungen ihrer Teilstücke ist, dass also $S[\mathcal{C}_{A \rightarrow C}] = S[\mathcal{C}_{A \rightarrow B}] + S[\mathcal{C}_{B \rightarrow C}]$ ist. Im vorliegenden Fall lässt sich also die Wirkung in zwei Anteile aufspalten:

$$S[\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x, t + \tau)}] = S[\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)}] + S[\mathcal{C}_{(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)}]. \quad (1.7)$$

Da Amplituden exponentiell von der Wirkung abhängen, multiplizieren sich demzufolge die entsprechenden Amplituden der Teilstücke, d.h. die Amplitude einer gegebenen Bahn ist gleich

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}_{(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)}]\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}_{(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)}]\right).$$

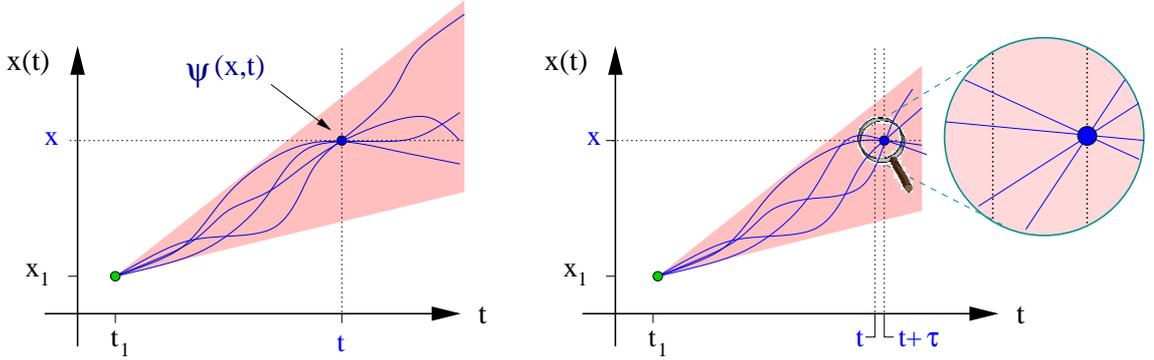


Abbildung 1.3: **Links:** Die Summe der quantenmechanischen Amplituden aller Bahnen, die vom Startpunkt bis zum Punkt (x, t) laufen, definiert eine Funktion $\psi(x, t)$, die als Wellenfunktion bezeichnet wird. **Rechts:** Die Ableitung einer Differentialgleichung für die Wellenfunktion beruht auf der Annahme, dass die Bahnen auf einem infinitesimalen Zeitintervall der Breite τ annähernd geradlinig gleichförmige Bewegungen repräsentieren.

Ebenso lässt sich die Summe über alle Bahnen in Gl. (1.6) in zwei Einzelsummen zerlegen:

$$\psi(x, t + \tau) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \sum_{\mathcal{C}(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)} \sum_{\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)]\right) \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)]\right). \quad (1.8)$$

Dabei ist x' die Position zur Zeit t , an der die beiden Teilstücke der jeweils betrachteten Bahn verbunden sind. Da über alle denkbaren Bahnen summiert werden soll, muss auch über die Anschlussstelle x' integriert werden.

Durch ‘Ausklammern’ faktorisiert der Integrand und man erhält

$$\psi(x, t + \tau) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \underbrace{\left[\sum_{\mathcal{C}(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}(x_1, t_1) \rightarrow (x', t)]\right) \right]}_{\propto \psi(x', t)} \times \left[\sum_{\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)]\right) \right], \quad (1.9)$$

wobei der Ausdruck in der ersten eckigen Klammer proportional zur Wellenfunktion zur Zeit t ist, also bleibt nur die Integration über x' sowie die Summe über alle Bahnen innerhalb der infinitesimalen Zeitspanne τ übrig:

$$\psi(x, t + \tau) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x', t) \sum_{\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)]\right). \quad (1.10)$$

Dabei lässt sich die Wirkung

$$S[\mathcal{C}(x', t) \rightarrow (x, t + \tau)] = \int_t^{t + \tau} dt' L(\dot{x}(t'), x(t')) \quad (1.11)$$

als zeitliches Integral über die Lagrangefunktion $L(\dot{x}, x)$ schreiben, von der wir der Einfachheit halber annehmen, dass sie nicht explizit von der Zeit abhängt.

Die wesentliche Annahme, mit der wir nun eine Differentialgleichung ableiten werden, besteht darin, dass die Bahnen stetig differenzierbar sind. Dies hat zur Folge, dass die Bewegung innerhalb des infinitesimalen Zeitintervalls $[t, t + \tau]$ als geradlinig gleichförmig angesehen werden kann (siehe Abb. 1.3), dass sich also die Lagrangefunktion während dieser kurzen Zeitspanne nicht wesentlich ändert. Wir können also in dem obigen Integral die Geschwindigkeit $\dot{x}(t')$ und die Position $x(t')$ im Limes $\tau \rightarrow 0$ durch ihre Mittelwerte ersetzen:

$$\dot{x}(t') \approx \frac{x - x'}{\tau}, \quad x(t') \approx \frac{x + x'}{2} \quad (t' \in [t, t + \tau]). \quad (1.12)$$

Weil die Summanden in der Summe $\sum_{\mathcal{C}_{(x',t) \rightarrow (x,t+\tau)}}$ dann nicht mehr von der jeweiligen Bahn abhängen, liefert die Summenbildung lediglich einen konstanten Faktor, der in der Normierung von ψ absorbiert werden kann. Damit vereinfacht sich das Integral zu

$$\psi(x, t + \tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau L \left(\frac{x - x'}{\tau}, \frac{x + x'}{2} \right) \right] \psi(x', t), \quad (1.13)$$

wobei \mathcal{N} eine geeignete Normierungskonstante ist, die noch zu berechnen ist. Wie man sehen kann, haben wir auf diese Weise alle auftretenden ‘Summen über Bahnen’ eliminieren können und erhalten eine Integralgleichung für die Zeitentwicklung der Wellenfunktion mit einem oszillierenden Integrkern.

1.2.2 Punktförmiges Teilchen im Potential

Die Gleichung (1.13) lässt sich im Limes $\tau \rightarrow 0$ in eine partielle Differentialgleichung überführen. Weil diese Rechnung in voller Allgemeinheit für beliebige Lagrange-Funktionen sehr aufwendig ist, wollen wir uns hier auf den Spezialfall eines Massepunktes in einem eindimensionalen Potential $V(x)$ beschränken. In diesem Fall hat die Lagrangefunktion die Form

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (1.14)$$

und die Integralgleichung lautet

$$\psi(x, t + \tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau \left(\frac{m}{2} \frac{(x - x')^2}{\tau^2} - V \left(\frac{x + x'}{2} \right) \right) \right] \psi(x', t). \quad (1.15)$$

Mit der Substitution $x' = x + a$ kann diese Gleichung etwas kompakter geschrieben werden als

$$\psi(x, t + \tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} da \exp \left[\frac{ima^2}{2\hbar\tau} \right] \exp \left[-\frac{i\tau}{\hbar} V(x + a/2) \right] \psi(x + a, t). \quad (1.16)$$

Im Argument der ersten Exponentialfunktion sehen wir, dass τ wie a^2 skaliert. Wir entwickeln deshalb die linke Seite und die im Integranden auftretenden Terme bis zur ersten Ordnung in τ und bis zur zweiten Ordnung in a :

$$\psi(x, t + \tau) = \psi(x, t) + \tau \partial_t \psi(x, t) + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (1.17)$$

$$\exp \left[-\frac{i\tau}{\hbar} V(x + a/2) \right] = 1 - \frac{i\tau}{\hbar} V(x) + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (1.18)$$

$$\psi(x + a, t) = \psi + a \partial_x \psi(x, t) + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 \psi(x, t) + \mathcal{O}(a^3). \quad (1.19)$$

Mit diesen Näherungen erhalten wir:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \tau \partial_t \psi(x, t) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} da \exp\left[\frac{ima^2}{2\hbar\tau}\right] \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} V(x)\right) \\ &\times \left(\psi(x, t) + a \partial_x \psi(x, t) + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 \psi(x, t)\right) + \mathcal{O}(\tau^2, a^3). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Die hierin zu lösenden Integrale sind von der Form

$$\int da e^{i\gamma a^2}, \quad \int da a e^{i\gamma a^2}, \quad \int da a^2 e^{i\gamma a^2}, \quad (1.21)$$

wobei $\gamma = m/2\hbar\tau$ ist.

Bemerkung: Die Berechnung solcher schnell oszillierenden Integrale ist nichttrivial, da sie nicht konvergieren. Ein ähnliches Problem kennen Sie bereits im Zusammenhang mit kontinuierlichen Fourier-Transformationen. Beispielsweise ist das oszillierende Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}$$

nicht konvergent, dennoch benutzt man, dass es gleich $2\pi\delta(x)$ ist. Um zu diesem Ergebnis zu gelangen, müssen oszillierende Integrale geeignet regularisiert werden. Dies kann beispielsweise durch eine schwache exponentielle Dämpfung geschehen, deren Koeffizienten man anschließend gegen Null gehen lässt. Im vorliegenden Fall bietet sich vor allem die analytische Fortsetzung an. Dazu setzen wir $\gamma = ik$ mit $k > 0$, berechnen das nunmehr Gauß'sche Integral und machen schließlich die Substitution rückgängig. Man erhält:

$$\int_{-\infty}^{\infty} da e^{i\gamma a^2} = \sqrt{i\pi/\gamma}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} da a e^{i\gamma a^2} = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} da a^2 e^{i\gamma a^2} = \frac{1}{2} \sqrt{-i\pi/\gamma^3}. \quad (1.22)$$

Zunächst vergleicht man die Terme nullter Ordnung in Gleichung (1.20), indem man $a = \tau = 0$ setzt. Da man auf der rechten Seite von

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} da \exp\left[\frac{ima^2}{2\hbar\tau}\right] \psi(x, t) \quad (1.23)$$

die Wellenfunktion vor das Integral ziehen kann, erhält man einen Ausdruck für die Normierungskonstante:

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \tau}{m}}. \quad (1.24)$$

Setzt man dieses Ergebnis in Gl. (1.20) und führt mit Hilfe von Gl. (1.22) die auftretenden Integrale aus, so erhält man:

$$\psi(x, t) + \tau \partial_t \psi(x, t) = \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} V(x)\right) \left(\psi(x, t) + \frac{i\hbar\tau}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t)\right) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (1.25)$$

Ein Vergleich der Terme erster Ordnung führt auf die partielle Differentialgleichung

$$\boxed{i\hbar \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t).} \quad (1.26)$$

Dies ist die *Schrödingergleichung*, die wir hier allein aus den Postulaten der Quantentheorie abgeleitet haben. Die Schrödingergleichung ist eine partielle Differentialgleichung, welche die Zeitentwicklung der Wellenfunktion eines Teilchens in einem Potential beschreibt. Sie wird auch häufig als *zeitabhängige Schrödingergleichung* bezeichnet.

1.3 Die Schrödingergleichung

1.3.1 Allgemeine Form der Schrödingergleichung

Die im vorherigen Abschnitt abgeleitete Schrödingergleichung gilt für den Spezialfall eines Massepunkts in einer Dimension, der sich in einem Potential $V(x)$ bewegt. Auf ähnliche Weise ließe sich auch für kompliziertere Systeme in höheren Dimensionen eine geeignete Schrödingergleichung für die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ ableiten. Bei einer solchen Rechnung, auf die im Rahmen dieser Vorlesung verzichtet werden soll, stellt sich heraus, dass die rechte Seite der Schrödingergleichung stets eine ähnliche Struktur besitzt wie die Hamiltonfunktion $H(\vec{p}, \vec{x})$ des betrachteten Systems.

Zur Erinnerung: Die Hamiltonfunktion $H(\vec{p}, \vec{x})$ geht aus der Lagrangefunktion $L(\dot{\vec{x}}, \vec{x})$ durch eine Legendretransformation hervor, wobei \vec{p} der durch $p_i = \partial L / \partial x_i$ gegebene generalisierte Impuls ist. Im Regelfall ist $H = T + V$ gleich der Gesamtenergie des Systems.

Dies bedeutet konkret, dass sich die Schrödingergleichung stets in der Form

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = H(-i\hbar\nabla, \vec{x})\psi(\vec{x}, t) \quad (1.27)$$

schreiben lässt, d.h. auf der rechten Seite steht die Hamiltonfunktion in welcher der Impuls \vec{p} formal durch den Gradienten $-i\hbar\nabla$ ersetzt worden ist. Diese Hamiltonfunktion, die nunmehr Differentialoperatoren enthält, wird dann auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ angewandt. Offenbar wird dadurch der in Gl. (1.26) behandelte Spezialfall korrekt reproduziert.

Dieses formale ‘Kochrezept’ ist bereits frühzeitig von Niels Bohr formuliert worden und ist heute als *Bohrsches Korrespondenzprinzip* bekannt. Diesem Rezept zufolge erhält man die korrekte Wellengleichung, indem man in der klassischen Energie-Impuls-Beziehung (hier $H = E$) die formale Substitutionen

$$E \rightarrow i\hbar\partial_t, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla \quad (1.28)$$

vornimmt und beide Seiten auf eine Wellenfunktion anwendet. Ein klassisches Problem kann also quantisiert werden, indem man die Erhaltungsgrößen formal durch geeignete Ableitungsoperatoren ersetzt.

1.3.2 Wahrscheinlichkeitsdichte, Kontinuitätsgleichung und Normierung der Wellenfunktion

Gemäß Postulat (d) ist die Wahrscheinlichkeit pro Volumen, bei einer Messung das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} zu finden, proportional zum Betragsquadrat der aufsummierten Amplituden der Bahnen, die zur Zeit t den Punkt \vec{x} erreichen. Da jene Summe aber nichts anderes ist als die Wellenfunktion, ist die *Wahrscheinlichkeitsdichte*, die wir mit $\rho(\vec{x}, t)$ bezeichnen wollen, durch

$$\boxed{\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)}, \quad (1.29)$$

gegeben, wobei ‘*’ wie üblich für die komplexe Konjugation steht.

Weil das Teilchen zu einem gegebenen Zeitpunkt irgendwo im System zu finden sein muss, ist das räumliche Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte immer gleich 1, woraus sich unmittelbar eine Normierungsbedingung für die Wellenfunktion ergibt:

$$\int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) = 1. \quad (1.30)$$

Man benutzt für diese Norm auch die Notation $\|\psi\| = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) = 1$.

Offenbar ist die Interpretation von $\rho(\vec{x}, t)$ als Wahrscheinlichkeitsdichte nur dann sinnvoll, wenn sich die Normierung bei fortschreitender Zeit nicht ändert, wenn also

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int d^3x \partial_t \rho(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.31)$$

ist. Die Schrödingergleichung sollte also so beschaffen sein, dass sie die Normierung der Wellenfunktion erhält.

Um dies zu überprüfen, leiten wir zunächst eine Differentialgleichung für die *lokale* Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte ab. Dazu betrachtet man die zeitliche Ableitung

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) = \partial_t [\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)] = [\partial_t \psi(\vec{x}, t)]^* \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) [\partial_t \psi(\vec{x}, t)] \quad (1.32)$$

oder kurz $\dot{\rho} = \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}$. Setzt man hier die Schrödingergleichung (1.27) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(\vec{x}, t) &= \left[\frac{1}{i\hbar} H(-i\hbar\nabla, \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right]^* \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{i\hbar} H(-i\hbar\nabla, \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(- \left[H(-i\hbar\nabla, \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right]^* \psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t) \left[H(-i\hbar\nabla, \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right] \right). \end{aligned}$$

In vielen Fällen setzt sich die Hamiltonfunktion aus kinetischer und potentieller Energie zusammen, d.h.

$$H(-i\hbar\nabla, \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t). \quad (1.33)$$

Da beim Einsetzen die Terme mit der potentiellen Energie herausfallen, gelangt man zu

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\left[\nabla^2 \psi(\vec{x}, t) \right]^* \psi(\vec{x}, t) - \psi^*(\vec{x}, t) \left[\nabla^2 \psi(\vec{x}, t) \right] \right) \quad (1.34)$$

oder kurz

$$\dot{\rho} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi). \quad (1.35)$$

Wegen

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [(\nabla \psi^*)\psi - \psi^* \nabla \psi] &= (\nabla^2 \psi^*)\psi + \nabla \psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \nabla \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi) \\ &= \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi \end{aligned} \quad (1.36)$$

kann man Gl. (1.35) schreiben als³

$$\dot{\rho} = \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot [(\nabla \psi^*)\psi - \psi^* \nabla \psi], \quad (1.37)$$

³Im Folgenden wollen wir die Konvention verwenden, dass ein Differentialoperator stets auf alle Funktionen nach rechts wirkt. $\nabla f(\vec{x})g(\vec{x})$ wirkt beispielsweise sowohl auf f als auch auf g , so dass die Produktregel anzuwenden ist. Davon abweichend deuten runde Klammern an, dass der Operator nur auf die Anteile innerhalb der Klammer wirkt, so wirkt beispielsweise der Differentialoperator in $(\nabla f(\vec{x}))g(\vec{x})$ nur auf die Funktion f .

also als Gradient einer Funktion. Mit der Definition der *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \quad (1.38)$$

gelangt man zur *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.39)$$

die sich auch kurz als $\dot{\rho} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ schreiben lässt. Die Kontinuitätsgleichung drückt die Erhaltung der Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte in differentieller Form aus.

Bemerkung: Aus der Elektrodynamik wissen Sie, dass man Erhaltungssätze sowohl lokal durch Kontinuitätsgleichungen als auch global mit Hilfe von Integralen formulieren kann. Um die integrale Form zu gewinnen, integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte über ein vorgegebenes Volumen V und wendet den Gaußschen Integralsatz an

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int_V d^3x \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = - \oint_{\partial V} \vec{j}(\vec{x}, t) d\vec{S}. \quad (1.40)$$

wobei ∂V die Oberfläche und $d\vec{S}$ ein Flächenelement bezeichnet. Die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Volumen V ist also gleich dem Wahrscheinlichkeitsfluß durch die Oberfläche ∂V . Erstreckt sich V über den ganzen zur Verfügung stehenden Raum, verschwindet die rechte Seite und man erhält die Bedingung (1.31). Damit ist nachgewiesen, dass die Schrödingergleichung die Normierung erhält.

1.3.3 Erwartungswerte

Erwartungswert bei Ortsmessung

Gemäß dem Postulat (d) ist das konkrete Ergebnis einer Messung im Allgemeinen unvorhersagbar, jedoch kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Messergebnisse berechnet werden. Bei der Messung des Aufenthaltsortes \vec{x} ist diese Verteilung gerade durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t)$ gegeben.

Von besonderem Interesse ist in vielen Fällen das zu erwartende arithmetische Mittel der Messwerte, der so genannte *Erwartungswert* einer Messung. Offenbar wird man bei einer Messung des Aufenthaltsortes im Mittel das Ergebnis

$$\overline{\vec{x}}(t) = \frac{\int d^3x \vec{x} \rho(\vec{x}, t)}{\int d^3x \rho(\vec{x}, t)} = \frac{\int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \vec{x} \psi(\vec{x}, t)}{\int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)} \quad (1.41)$$

erhalten, wobei die Nenner gleich 1 sind sofern die Wellenfunktion bzw. die Wahrscheinlichkeitsdichte bereits korrekt normiert ist, was wir in den folgenden Abschnitten voraussetzen wollen.

Erwartungswert bei Impulsmessung

Auf ähnliche Weise können wir den Erwartungswert der Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}}$ bzw. des Impulses \vec{p} eines Teilchens ermitteln. Offenbar ist

$$\overline{\vec{p}}(t) = m \overline{\dot{\vec{x}}}(t) = m \int d^3x \vec{x} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = -m \int d^3x \vec{x} \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t), \quad (1.42)$$

wobei im letzten Schritt die Kontinuitätsgleichung eingesetzt wurde. Durch komponentenweise partielle Integration geht dieser Ausdruck in

$$\overline{\vec{p}}(t) = +m \int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2i} \int d^3x (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.43)$$

über, also in ein Raumintegral über die Wahrscheinlichkeitsströme. Dabei wurde vorausgesetzt, dass die Wellenfunktionen im Unendlichen (oder an den Rändern des betrachteten Systems) gleich Null sind, so dass die Randterme bei der partiellen Integration wegfallen. Eine weitere partielle Integration des zweiten Summanden in runden Klammern führt schließlich auf

$$\overline{\vec{p}}(t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) [-i\hbar \nabla] \psi(\vec{x}, t). \quad (1.44)$$

Erwartungswert der Energie

Analog lässt sich für ein Teilchen in einem Potential der Erwartungswert für eine Energiemessung ausrechnen. Dazu muss man zunächst den Erwartungswert des quadrierten Impulses ausrechnen⁴. Wegen Gl. (1.44) ist es plausibel, dass

$$\overline{\vec{p}^2}(t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \underbrace{[-i\hbar \nabla] \cdot [-i\hbar \nabla]}_{-\hbar^2 \nabla^2} \psi(\vec{x}, t) \quad (1.45)$$

ist, was wir hier ohne Beweis akzeptieren wollen. Da $E = p^2/2m + V$ ist, wird man auf den Ausdruck

$$\overline{E}(t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t) \quad (1.46)$$

geführt. Da in den eckigen Klammern die rechte Seite der Schrödingergleichung erscheint, können wir diese einsetzen und erhalten

$$\overline{E}(t) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) [i\hbar \partial_t] \psi(\vec{x}, t). \quad (1.47)$$

Allgemeine Struktur von Erwartungswerten

An dieser Stelle erkennt man auf sehr schöne Weise das Bohrsche Korrespondenzprinzip. Führt man nämlich für einen beliebigen *Operator* A (z.B. ein Differentialoperator) formal die Notation

$$\langle A \rangle_t := \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) A \psi(\vec{x}, t) \quad (1.48)$$

ein, so erhält man für die Erwartungswerte von Ort und Impuls

$$\boxed{\overline{\vec{x}}(t) = \langle \vec{x} \rangle_t, \quad \overline{\vec{p}}(t) = \langle -i\hbar \nabla \rangle_t, \quad \overline{E}(t) = \langle i\hbar \partial_t \rangle_t.} \quad (1.49)$$

Dieser Operatorformalismus wird später noch eingehender behandelt.

⁴Man beachte, dass der Erwartungswert des Quadrats einer Größe und das Quadrat des Erwartungswerts derselben Größe im Allgemeinen verschieden sind.

Bemerkung: Sie können an dieser Stelle schon erkennen, dass der Impuls, also die Geschwindigkeit des Teilchens, um so größer ist, je schneller sich $\psi(\vec{x}, t)$ als Funktion vom Ort ändert, denn nur dann kann der Ableitungsoperator einen Beitrag liefern. Ebenso ist die Energie um so größer, je schneller sich die Wellenfunktion zeitlich ändert. Wie wir später noch genauer sehen werden, wird der Impuls in der Tat durch räumliche Oszillationen, die Energie hingegen durch zeitliche Oszillationen in der Wellenfunktion codiert.

1.3.4 Ehrenfestsches Theorem

Das Theorem von Ehrenfest besagt, dass sich Erwartungswerte ähnlich verhalten wie die entsprechenden klassischen Größen. Dieser Sachverhalt soll hier am Beispiel eines Teilchens in einem Potential demonstriert werden. Dazu leiten wir den Erwartungswert des Impulses nach der Zeit ab:

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{p}}(t) = \frac{d}{dt}\langle -i\hbar\nabla \rangle_t = -i\hbar \int d^3x \left((\partial_t \psi^*) \nabla \psi + \psi^* \nabla (\partial_t \psi) \right) \quad (1.50)$$

Nach Einsetzen der Schrödingergleichung (1.26) erhält man

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{p}}(t) = -i\hbar \int d^3x \left(\left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} V \psi \right]^* \nabla \psi + \psi^* \nabla \left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} V \psi \right] \right). \quad (1.51)$$

Wegen der Komplexkonjugation heben die kinetischen Terme mit den Laplaceoperatoren nach zweifacher partieller Integration gegenseitig heraus, so dass nur die Potentialterme übrig bleiben:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\overline{\vec{p}}(t) &= -i\hbar \int d^3x \left(-\frac{1}{i\hbar} V \psi^* \nabla \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* \nabla V \psi \right) \\ &= \int d^3x \left(V \psi^* \nabla \psi - \psi^* (\nabla V) \psi - \psi^* V \nabla \psi \right) \\ &= \int d^3x \psi^* (\nabla V) \psi = -\overline{\nabla V}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Für die Mittelwerte erhält man also eine Relation, die der dazugehörigen klassischen Relation, in diesem Fall der Newtonschen Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt}\vec{p} = -\nabla V$, formal entspricht.

1.4 Einfache Quantensysteme

1.4.1 Das freie Teilchen

Ebene Wellen

Wir kommen nun zu konkreten physikalischen Beispielen einfacher Quantensysteme. Schon das kräftefreie Punktteilchen, das sich in der klassischen Physik geradlinig gleichförmig bewegt, hat in der Quantenmechanik nichttriviale Eigenschaften.

Die Schrödingergleichung eines freien Teilchens lautet

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x},t). \quad (1.53)$$

Eine offensichtliche Lösung dieser Differentialgleichung ist die ebene Welle

$$\psi(\vec{x},t) \propto \exp(i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t). \quad (1.54)$$

Dabei ist \vec{k} der Wellenvektor und ω die Kreisfrequenz der Welle. Einsetzen in die obige Gleichung liefert die *Dispersionsrelation*

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.55)$$

Eine ebene Welle hat jedoch die Eigenschaft, dass das Betragsquadrat von $\psi(\vec{x},t)$ konstant ist so dass diese Lösung nicht normiert werden kann. Physikalisch entspräche eine solche Lösung dem Grenzfall eines Teilchens, das an jedem Punkt des Raums koexistiert.

Wellenpakete

Obwohl eine ebene Welle nicht normierbar ist, können *Linearkombinationen* verschiedener Wellen sehr wohl normierbar sein weil die Norm nicht linear, sondern quadratisch in den Amplituden ist. Die allgemeinste Form einer solchen Linearkombination ist

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k f(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega(\vec{k})t} \quad (1.56)$$

wobei die (im allgemeinen komplexwertige) Funktion $f(\vec{k})$ die Rolle von ‘Koeffizienten’ spielt. Außerdem ist $\omega(\vec{k}) = \hbar k^2/2m$ womit sichergestellt wird, dass eine solche Linearkombination tatsächlich eine Lösung der freien Schrödingergleichung (1.53) ist.

Bemerkung: Die Norm dieser Linearkombination kann leicht ausgerechnet werden:

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi^* \psi &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \int d^3k' \int d^3k f^*(\vec{k}') f(\vec{k}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x} - i[\omega(\vec{k})-\omega(\vec{k}')]t} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \int d^3k (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k}-\vec{k}') f^*(\vec{k}') f(\vec{k}) = \int d^3k f^*(\vec{k}) f(\vec{k}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Wenn also die Funktion $f(\vec{k})$, dass das Integral auf der rechten Seite endlich ist, ist auch die entsprechende Wellenfunktion normierbar.

Da die Funktion $f(\vec{k})$ die Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ vollständig festlegt, besitzt sie auch die vollständige Information über eine mögliche Anfangsbedingung z.B. bei $t=0$. Denn wegen

$$\psi(\vec{x},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k f(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (1.58)$$

ist $f(\vec{k})$ die Fourier-Transformierte von $\psi(\vec{x},0)$, d.h.

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{x},0) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}. \quad (1.59)$$

Damit wird es möglich, bei gegebener Anfangsbedingung $\psi(\vec{x},0)$ eine formale Lösung der Schrödingergleichung anzugeben:

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3x' \psi(\vec{x}',0) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}') - i\omega(\vec{k})t}. \quad (1.60)$$

Ruhendes Gaußsches Wellenpaket in einer Dimension

Angenommen die Wellenfunktion hätte anfangs die Form einer Gauß-Glocke, wie sähe dann die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion aus?

Um diese Frage zu beantworten, setzt man die korrekt normierte Gaußverteilung mit Standardabweichung σ_0

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sigma_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_0^2}\right) \quad (1.61)$$

in die formale Lösung (1.60) ein und berechnet die Integrale.

Merke: Die Fouriertransformierte einer Gaußverteilung in einer Dimension

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} e^{-x^2/4\sigma_0^2} = \sqrt{2} \sigma_0 e^{-k^2 \sigma_0^2} \quad (1.62)$$

ist wiederum eine Gaußverteilung, deren Breite proportional zum Kehrwert der ursprünglichen Breite ist.

Das Resultat lautet:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega(\vec{k})t} \int d^3x' e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sigma_0^{3/2}} e^{-\frac{x'^2}{4\sigma_0^2}} \quad (1.63) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega(\vec{k})t} (8\pi\sigma_0^2)^{3/4} e^{-\sigma_0^2 k^2} \\ &= \frac{(8\pi\sigma_0^2)^{3/4}}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{-(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})k^2} \\ &= \frac{\sigma_0^{3/2}}{(2\pi)^{3/4} (\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}\right) \end{aligned}$$

Um zu berechnen, wie wahrscheinlich es ist, das Teilchen in diesem zeitabhängigen Wellenpaket bei einer Ortsmessung am Ort \vec{x} zu finden, bestimmen wir die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}, t) &= \psi(\vec{x}, t)^* \psi(\vec{x}, t) \quad (1.64) \\ &= \frac{\sigma_0^3}{(2\pi)^{3/2} (\sigma_0^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2})^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})} - \frac{x^2}{4(\sigma_0^2 - \frac{i\hbar t}{2m})}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2} (\sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^2})^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^2})}\right). \end{aligned}$$

An diesem Ergebnis liest man ab, dass die Verteilung gaußförmig bleibt, jedoch als Funktion der Zeit breiter wird. Die effektive Breite $\sigma(t)$ wächst dabei quadratisch in der Zeit:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^4}}. \quad (1.65)$$

Dieser Effekt wird als das *Zerfließen des Wellenpakets* bezeichnet.

Beispiel: Auf makroskopischer Skala ist dieser Effekt so gut wie nicht sichtbar, während er auf der Nanometerskala und darunter eine signifikante Rolle spielt. Nimmt man an, dass die anfängliche Unschärfe σ_0 dem Radius R des Teilchens entspricht, verdoppelt sich beispielsweise die Breite σ des Wellenpakets im Zeitraum $T = \sqrt{12}m\sigma_0^2/\hbar$ gemäß der folgenden Tabelle:

Objekt	Radius	Masse	T
Wasserstoffmolekül	10^{-10} m	10^{-26} kg	3×10^{-12} s
typ. Nanoteilchen	10^{-8} m	10^{-20} kg	3×10^{-3} s
Sandkorn	10^{-6} m	10^{-15} kg	ca. 1 Jahr

Bewegtes Gaußsches Wellenpaket

Das zuvor betrachtete Wellenpaket verbreitert sich zwar, bleibt aber am Ursprung $\vec{x} = 0$ zentriert und repräsentiert daher ein ruhendes Teilchen. Wie aber muss man die Wellenfunktion wählen, damit sich das Teilchen bewegt?

Nach dem Bohrschen Korrespondenzprinzip wird der Impuls \vec{p} eines Teilchens durch den Gradienten $-i\hbar\nabla$ repräsentiert, der Impuls wird also durch eine räumliche Änderung der Wellenfunktion codiert. Dies legt den Ansatz nahe, dem Wellenpaket eine zusätzliche räumliche Welligkeit aufzuprägen, es also mit einem räumlich oszillierenden Faktor zu multiplizieren:

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sigma_0^{3/2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_0^2}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \quad (1.66)$$

wobei \vec{q} ein konstanter Vektor ist. Eine analoge Rechnung führt dann auf das Resultat

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{x}} \int d^3x' e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sigma_0^{3/2}} e^{-\frac{x'^2}{4\sigma_0^2} - i\vec{q}\cdot\vec{x}'} \\ &= \frac{\sigma_0^{3/2}}{(2\pi)^{3/4} (\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2 + 4i\sigma_0^2\vec{q}\cdot\vec{x} + 2i\hbar t\sigma_0^2q^2/m}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}\right) \end{aligned} \quad (1.67)$$

Wiederum berechnen wir das Betragsquadrat und erhalten die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}, t) &= \psi(\vec{x}, t)^* \psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2} (\sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma_0^2})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \hbar t\vec{q}/m)^2}{2(\sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma_0^2})}\right) \end{aligned} \quad (1.68)$$

Das Wellenpaket zerfließt also genau so wie im vorherigen Beispiel, jedoch bewegt es sich dabei mit der konstanten Geschwindigkeit $\vec{v} = \hbar\vec{q}/m$.

Warum zerfließen Wellenpakete?

Wenn man ein Wellenpaket spektral nach ebenen Wellen zerlegt, also eine Fouriertransformation durchführt, so findet man, dass es sich aus unendlich vielen Wellen unterschiedlicher Wellenzahl additiv zusammensetzt. Beispielsweise ist die Fouriertransformierte einer Wellenfunktion in Form einer Gaußglocke wiederum eine Gaußglocke mit einer gewissen Breite. Die Situation ist ähnlich wie bei einem Paukenschlag, dessen Spektrum unendliche viele Frequenzen aufweist, die umso breiter verteilt sind, je kürzer der Schlag ist.

Auf der anderen Seite haben wir gesehen, dass der Impuls \vec{p} nach der Bohrschen Korrespondenzregel durch den räumlichen Gradienten $-i\hbar\nabla$ repräsentiert wird, welcher angewandt auf ebene Wellen den Faktor $-i\hbar k^2$ nach vorne bringt. Die räumliche Wellenzahl \vec{k} codiert also den Impuls und damit die Geschwindigkeit des Teilchens. In diesem Sinne ist ein Wellenpaket eine Superposition ein und desselben Teilchens, das in verschiedenen Geschwindigkeitsrealisierungen koexistiert. Die Wellenfunktion besteht also aus langsameren und schnelleren Komponenten, die sich voneinander entfernen.

Offenbar ist solch ein Effekt nur möglich, wenn die Geschwindigkeit des Teilchens von seinem Impuls abhängig ist. Dies ist bei massiven nichtrelativistischen Teilchen der Fall und findet seine Entsprechung in einer nichtlinearen Dispersion. Masselose Teilchen wie z.B. Photonen bewegen sich dagegen mit konstanter Geschwindigkeit (nämlich c), so dass es nicht zum Zerfließen eines Wellenpakets kommt. In der Tat bleibt ein Lichtblitz auch nach langer Laufzeit im Vakuum lokalisiert in Raum und Zeit.

Merke: Das Zerfließen von Wellenpaketen massiver Teilchen beruht anschaulich darauf, dass das Wellenpaket eine Superposition von Anteilen ist, die sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit bewegen.

1.4.2 Der unendliche hohe Potentialtopf

Formulierung durch Randbedingungen

Die diskutierten Wellenpakete sind sogenannte *ungebundene Zustände*, die sich frei im Raum bewegen können. Im Gegensatz dazu werden *gebundene Zustände* durch ein Potential in ihrer Bewegungsfreiheit auf einen endlichen räumlichen Bereich eingeschränkt.

Das einfachste System mit gebundenen Wellenfunktionen ist der unendlich hohe Potentialtopf in einer räumlichen Dimension mit der Breite a , dessen Potential durch

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{falls } |x| \geq a/2 \\ 0 & \text{falls } |x| < a/2 \end{cases} \quad (1.69)$$

gegeben ist. An der Struktur der zeitabhängigen Schrödingergleichung (1.26) liest man sofort ab, dass in Regionen mit unendlich großem Potential die Wellenfunktion verschwinden muss und damit dort auch die Wahrscheinlichkeitsdichte gleich Null ist. Die unendlich hohe Potentialstufe stellt also für das Teilchen eine undurchdringliche Barriere dar.

Da das Potential auf dem Intervall $-a/2 < x < a/2$ gleich Null ist, kann man statt der Schrödingergleichung (1.26) ebensogut die freie Schrödingergleichung (1.53) mit einer Dirichlet-Randbedingung⁵ $\psi(-\frac{a}{2}, t) = \psi(+\frac{a}{2}, t) = 0$ lösen. Dieses Problem, das wir im folgenden analytisch lösen wollen, wurde von W. Kinzel und G. Reents in der Vorlesung ‘Computational Physics’ numerisch behandelt und überrascht durch seine Komplexität. Dazu wurde als Anfangsbedingung ein sich bewegendes hinreichend lokalisiertes Wellenpaket in die Mitte des Potentialtopfes gewählt. Sobald dieses Wellenpaket die Potentialstufe erreicht, wird es durch komplexe Interferenzphänomene reflektiert, nimmt dann jedoch wieder die Form eines Wellenpakets an. Bei fortschreitender Zeit führt aber das

⁵Zur Erinnerung: Bei Dirichlet-Randbedingungen ist die untersuchte Funktion am Rand gleich Null, während bei von-Neumann-Randbedingungen ihre Normalableitung gleich Null ist.

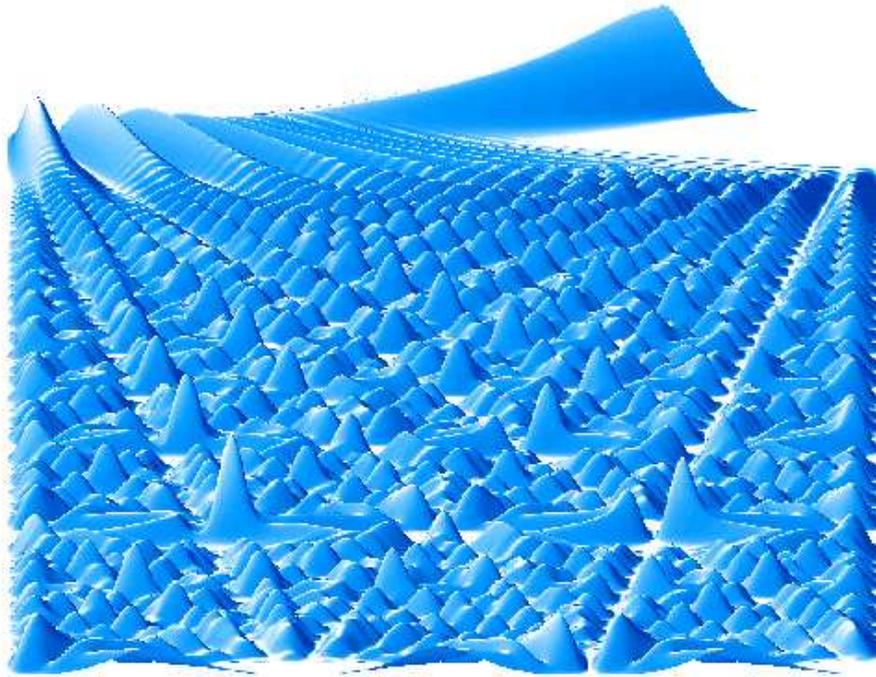


Abbildung 1.4: Zeitentwicklung des Absolutbetrags einer Wellenfunktion in einem Kasten [W. Kinzel und G. Reents]. Die Zeitachse läuft von hinten nach vorne, die räumliche Koordinate in horizontaler Richtung.

zunehmende Zerfließen des Wellenpakets zu komplizierten raumzeitlichen Interferenzphänomenen (siehe Abb. 1.4).

Stationäre Wellenfunktionen

In gebundenen Systemen sind vor allem die *stationären Wellenfunktionen* von Interesse. Eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ heißt stationär, wenn alle Erwartungswerte zeitunabhängig sind, wenn also für alle linearen Operatoren A die Ableitung

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt} \int_V d^3x \psi^*(\vec{x}, t) A \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.70)$$

ist. Dies bedeutet insbesondere, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$, ein Teilchen am Ort \vec{x} zu finden, zeitunabhängig ist.

Bemerkung: Ein Beispiel für stationäre Wellenfunktionen sind die aus der Chemie bekannten *Orbitale* der Hüllenelektronen wie z.B. das radialsymmetrische *s*-Orbital des Wasserstoffatoms. Solche Orbitale verdeutlichen auf eindrucksvolle Weise die Andersartigkeit einer quantenmechanischen Superposition im Vergleich zu einer gewöhnlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung. Wäre nämlich das Elektron ‘in Wirklichkeit’ lokalisiert, müsste es sich entlang einer Bahn um den Kern bewegen. Da es aber elektrisch geladen ist, würde es dabei elektromagnetische Wellen abstrahlen, was aber nicht geschieht. Vielmehr koexistiert das Elektron simultan an vielen verschiedenen Orten in seinem Orbital; es ist delokalisiert ohne sich zu bewegen, strahlt deshalb auch keine elektromagnetischen Wellen ab.

Stationäre Wellenfunktionen lassen sich faktorisieren in einen ortsabhängigen Betrag und eine zeitabhängige Phase

$$\psi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}) e^{-i\chi(t)}, \quad (1.71)$$

wobei das Minuszeichen im Exponential eine Konvention ist. Setzt man diesen Ansatz beispielsweise in die zeitabhängige Schrödingergleichung für das freie Teilchen in einem Potential

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) \quad (1.72)$$

ein, so erhält man nach Division durch $e^{-i\chi(t)}$ die Differentialgleichung

$$\hbar\dot{\chi}(t)\phi(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}). \quad (1.73)$$

Offenbar hat diese Differentialgleichung nur dann eine Lösung, wenn $\dot{\chi}(t)$ konstant ist, wenn also $\chi(t) = \chi(0) + \omega t$ ist. Weil man $\chi(0)$ als konstante Phase in $\phi(\vec{x})$ absorbieren kann, kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\chi(0) = 0$ annehmen. Eine stationäre Wellenfunktion besitzt also einen konstanten Betrag und eine gleichförmig rotierende komplexe Phase, d.h.

$$\psi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}) e^{-i\omega t}. \quad (1.74)$$

wobei $\phi(\vec{x})$ Lösung der Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}) = \hbar\omega\phi(\vec{x}) \quad (1.75)$$

ist. Da der Energieerwartungswert einer solchen Wellenfunktion nach Gl. (1.47) gleich $\hbar\omega$ ist, ersetzt man $\hbar\omega$ durch E und erhält so die *stationäre Schrödingergleichung*

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right]\phi = E\phi}. \quad (1.76)$$

Die stationäre Schrödingergleichung geht also aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung durch einen Produktansatz hervor, mit dem die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ als ein Produkt einer räumlichen Funktion $\phi(\vec{x})$ und einem Phasenfaktor $e^{-iEt/\hbar}$ dargestellt wird. Solche Wellenfunktionen haben die Eigenschaft, dass Erwartungswerte bei Messungen stationär, d.h. zeitunabhängig sind. Der räumliche Anteil ist dabei analog zur ursprünglichen Funktion durch

$$\|\phi\| = \int_V d^3x \phi^*(\vec{x})\phi(\vec{x}) = 1 \quad (1.77)$$

zu normieren.

Die stationäre Schrödingergleichung ist eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung in Form einer Eigenwertgleichung, wobei die Energie E der zu bestimmende Eigenwert ist. Diese Energieeigenwerte nehmen in gebundenen Systemen in der Regel diskrete Werte an, sind also ‘quantisiert’.

Lösung der stationären Schrödingergleichung

Wir bestimmen nun die stationären Lösungen im unendlich hohen Potentialtopf. Dazu lösen wir die stationäre Schrödingergleichung (1.76) für $V = 0$ mit der Randbedingung $\phi(-a/2) = \phi(a/2) = 0$. Die Lösungen sind eindimensionale Wellen, die an den Rändern Knotenpunkte besitzen, also die Wellenlängen $\lambda = 2a/n$, wobei $n \in \mathbb{N}$ ist:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(n\pi x/a) & \text{falls } n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) & \text{falls } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (1.78)$$

Man erhält also Wellen unterschiedlicher *Parität*, die entweder symmetrisch oder antisymmetrisch in Bezug auf Spiegelungen am Ursprung sind. Die Existenz von antisymmetrischen Eigenfunktionen bei einem symmetrischen Potential mag zunächst widersprüchlich wirken, ist aber physikalisch konsistent, da die Wahrscheinlichkeitsdichte als messbare Größe quadratisch in $\phi(x)$ und damit immer symmetrisch ist.

Die zu den Eigenfunktionen gehörenden Energien nehmen diskrete Werte

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad (1.79)$$

an, sind also ‘quantisiert’, womit sich der Name ‘Quantentheorie’ erklärt. Diese Quantelung wird um so ausgeprägter, je leichter das Teilchen und je kleiner der Potentialtopf ist.

Die Wellenfunktion mit der kleinsten Energie $\phi_1(\vec{x})$ wird als Grundzustandswellenfunktion oder kurz *Grundzustand* bezeichnet. Dieser Grundzustand ist von besonderer Bedeutung, weil Systeme mit Temperatur Null ihre Energie minimieren und daher bestrebt sind, den Grundzustand anzunehmen. Es ist bemerkenswert, dass bereits der Grundzustand eine positive Energie $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} > 0$ besitzt. Diese ist um so größer, je kleiner der Potentialtopf ist. Ein Teilchen einzusperren kostet also – anders als in der klassischen Physik – Energie. Dieses Phänomen lässt sich bei allen gebundenen Quantensystemen beobachten.

Bemerkung: Ein großes ungelöstes Rätsel der heutigen Physik besteht darin, dass das gesamte Universum in all seinen Freiheitsgraden eine extrem hohe Grundzustandsenergie-dichte haben sollte, die man jedoch nicht beobachtet.

Zeitabhängige Lösung

Die Wellenfunktionen des unendlich hohen Potentialtopfs bilden ein vollständiges System von Fourier-Moden, nach denen jede beliebige Anfangsbedingung $\psi(x, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ entwickelt werden kann. Es existieren also Koeffizienten $c_n \in \mathbb{C}$ derart dass

$$\psi_n(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \quad (1.80)$$

ist. Diese Entwicklung kann benutzt werden, um eine formale zeitabhängige Lösung anzugeben:

$$\psi_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (1.81)$$

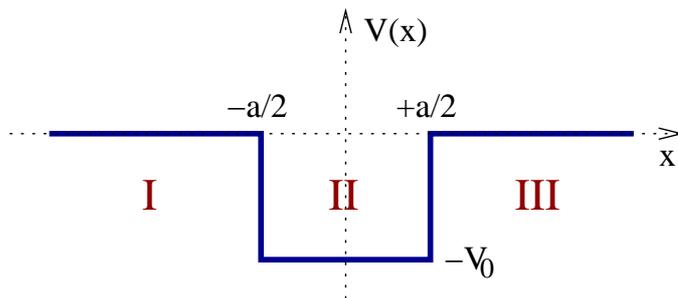


Abbildung 1.5: Potentialtopf mit Breite a und Tiefe V_0 (siehe Text).

Auf diese Weise kann zum Beispiel das Bild in Abb. (1.4) erzeugt werden.

Endlich tiefer Potentialtopf

Wir betrachten nun das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |x| \geq a/2 \\ -V_0 & \text{falls } |x| < a/2 \end{cases} \quad (1.82)$$

In der klassischen Physik würde ein Teilchen mit der Energie $-V_0 < E < 0$ zwischen den Wänden des Potentialtopfs hin und her reflektiert werden. Dagegen ist ein quantenmechanisches Teilchen in der Lage, in die Wand des Topfes einzudringen, da die Potentialbarriere eine endliche Höhe besitzt.

Wie im vorherigen Beispiel besitzen die Eigenfunktionen eine gerade oder ungerade Parität. Für die Wellenfunktion können wir deshalb in den drei Bereichen getrennte Ansätze machen, und zwar für Lösungen mit gerader Parität die symmetrischen Ansätze

$$\phi^I(x) = A e^{\alpha x}, \quad \phi^{II}(x) = \cos(\beta x), \quad \phi^{III}(x) = A e^{-\alpha x}, \quad (1.83)$$

bzw. für Lösungen mit ungerader Parität die antisymmetrische Ansätze

$$\phi^I(x) = -A e^{\alpha x}, \quad \phi^{II}(x) = \sin(\beta x), \quad \phi^{III}(x) = A e^{-\alpha x}, \quad (1.84)$$

Dabei sind A und B zu bestimmende komplexe Amplituden. Die Koeffizienten α und β können durch Einsetzen in die Schrödingergleichung bestimmt werden:

$$\alpha = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}. \quad (1.85)$$

Diese stückweisen Ansätze müssen durch geeignete *Anschlussbedingungen* miteinander verknüpft werden. Für Wellenfunktionen an endlichen Potentialstufen gilt, dass die Funktion $\phi(x)$ als auch die erste Ableitung $\partial_x \phi(x)$ von links und rechts übereinstimmen muss.

Bemerkung: Diese Anschlussbedingungen lassen sich wie folgt plausibel machen. Interpretiert man nach der Bohrschen Korrespondenzregel $\psi^*(\vec{x}, t)[-i\hbar\nabla]\psi(\vec{x}, t)$ als Impulsdichte und $\psi^*(\vec{x}, t)[i\hbar\partial_t]\psi(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)[- \hbar^2 \nabla^2 / 2m + V(x)]\psi(\vec{x}, t)$ als Energiedichte der Wellenfunktion und fordert, dass beide an der Stoßstelle endlich bleiben, ergibt sich direkt, dass die Wellenfunktion stetig sein muss und dass die zweite Ableitung zwar einen Sprung

machen darf, aber nicht divergent werden kann. Nur bei einer unendlichen Potentialstufe darf die zweite Ableitung divergieren, so dass die Wellenfunktion dort einen Knick aufweist.

Mit diesen Anschlussbedingungen bei $x = \pm a/2$ erhält man eine transzendente Gleichung

$$\tan \frac{\beta a}{2} = +\frac{\alpha}{\beta} \quad \text{für Lösungen gerader Parität und} \quad (1.86)$$

$$\cot \frac{\beta a}{2} = -\frac{\alpha}{\beta} \quad \text{für Lösungen ungerader Parität.} \quad (1.87)$$

Mit den Abkürzungen $\xi := \beta a/2$ und $\eta := \alpha a/2$ haben diese Gleichungen die kompakte Gestalt

$$\xi \tan \xi = \eta \quad \text{bzw.} \quad \xi \cot \xi = -\eta. \quad (1.88)$$

Aus Gl. (1.85) folgt außerdem die Beziehung

$$\xi^2 + \eta^2 = R^2 \quad (1.89)$$

wobei $R^2 = ma^2 V_0 / (2\hbar^2)$ eine Konstante ist, die von der Tiefe des Potentialtopf abhängt. Die Gleichungen (1.88) und (1.89) sind zwar nicht geschlossen lösbar, können jedoch auf anschauliche Weise grafisch bestimmt werden. Dabei zeigt sich, dass es für $V_0 > 0$ immer eine gebundene Lösung gerader Parität gibt. Die Existenz weiterer Lösungen hängt dagegen von der Tiefe des Potentialtopfes ab. Insbesondere existiert eine antisymmetrische Lösung erst ab einer gewissen Mindesttiefe des Potentialtopfes. Dieses Phänomen lässt sich übrigens generell bei allen Potentialtöpfen endlicher Tiefe und Breite (also nicht nur bei rechteckigen) beobachten.

Der Dirac-Delta-Potentialtopf

Als nächstes betrachten wir einen Potentialtopf in Form eines Dirac-Delta-Potentials

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} V_0 \delta(x), \quad (1.90)$$

wobei $V_0 > 0$ ist. Dieser Potentialtopf ist zwar unendlich tief aber auch unendlich schmal und könnte aus dem zuvor behandelten Problem des endlichen Potentialtopfes durch einen Grenzprozess abgeleitet werden. Leichter ist jedoch eine direkte Lösung.

Da $V(x)$ am Ursprung divergent ist, ist die erste Ableitung $\phi'(x)$ am Ursprung unstetig und springt um einen endlichen Wert. Dies bedeutet, dass die Wellenfunktion $\phi(x)$ an dieser Stelle einen Knick aufweist. Um die Sprungweite $\phi'(0^+) - \phi'(0^-)$ zu berechnen, integrieren wir die stationäre Schrödingergleichung

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + V_0 \delta(x) + k^2 \right) \phi(x) = 0 \quad (1.91)$$

mit $k^2 = 2mE/\hbar^2$ über ein infinitesimales Intervall von $-\epsilon$ nach $+\epsilon$:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \phi''(x) + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx V_0 \delta(x) \phi(x) + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx k^2 \phi(x) = 0. \quad (1.92)$$

Weil $\phi(x)$ am Ursprung stetig ist, ergibt sich für $\epsilon \rightarrow 0$ die Beziehung

$$\phi'(0^+) - \phi'(0^-) + V_0 \phi(0) = 0. \quad (1.93)$$

Außerhalb des Ursprungs erhält man als Lösungen Exponentialfunktionen, die im Unendlichen gegen Null gehen müssen, damit der Zustand normierbar, d.h. quadratintegrierbar ist. Man erhält also

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{+kx} & \text{falls } x < 0 \\ A e^{-kx} & \text{falls } x \geq 0 \end{cases} \quad (1.94)$$

mit der Normierung $|A|^2 = k$. Setzt man diese Lösung in Gl. (1.93) ein, ergibt sich $k = V_0/2$. Es existiert also immer genau ein gebundener Zustand mit der Energie

$$E = -\frac{\hbar^2 V_0^2}{8m}. \quad (1.95)$$

Der harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator ist eines der wichtigsten exakt lösbaren Quantensysteme. Das Potential $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ ist in diesem Fall quadratisch. In einer Dimension lautet die zu lösende stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \phi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi(x) = E \phi(x). \quad (1.96)$$

Symbolische Programmiersprachen wie *Mathematica*, *Maple* oder *Mathlab* können diese Differentialgleichung direkt lösen.

Mit *Mathematica*[®] (verfügbar im CIP-Pool) sieht das beispielsweise so aus:

```
DSolve[-h^2/(2m) phi''[x] + 1/2 m w^2 x^2 phi[x] == en phi[x], phi[x], x]
```

$$\left\{ \left\{ \phi(x) \rightarrow e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} C_1 H_{\frac{2en - \hbar\omega}{2\hbar\omega}} \left(\frac{\sqrt{m}\sqrt{\omega}x}{\sqrt{\hbar}} \right) + e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} C_2 {}_1F_1 \left(-\frac{2en - \hbar\omega}{4\hbar\omega}; \frac{1}{2}; \frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) \right\} \right\}$$

Die Lösung lautet also

$$\phi(x) = e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \left[C_1 H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) + C_2 {}_1F_1 \left(-\frac{n}{2}; \frac{1}{2}; \frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) \right], \quad (1.97)$$

wobei H_n Hermite-Polynome und ${}_1F_1$ hypergeometrische Reihen sind. Dabei ist

$$n = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (1.98)$$

während C_1 und C_2 zu bestimmende Integrationskonstanten sind, die durch die Normierungsbedingung festgelegt werden. Wie man nämlich durch Ausprobieren leicht feststellen kann, liefern die hypergeometrischen Reihen Anteile, die kombiniert mit der Exponentialfunktion im Unendlichen nicht gegen Null gehen, also nicht normierbar sind, folglich ist $C_2 = 0$. Der erste Anteil mit Hermiteschen Polynomen ist darüber hinaus nur dann normierbar, wenn n eine natürliche Zahl ist. Diese Bedingung $n \in \mathbb{N}$ führt zur Quantisierung der Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.99)$$

mit den dazugehörigen normierten Eigenfunktionen

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right). \quad (1.100)$$

Wir werden später noch einmal auf den harmonischen Oszillator zurückkommen und das Problem mit algebraischen Methoden ein zweites Mal lösen.

1.5 Übungsaufgaben

Aufgabe 1.1 (Hermitesche und unitäre lineare Abbildungen)

Gegeben sei eine hermitesche Matrix $H = H^\dagger$.

- Zeigen Sie, dass die Eigenwerte von H reell sind und dass die entsprechenden Eigenvektoren ein vollständiges orthogonales Basissystem bilden.
- Zeigen Sie, dass $U = \exp(-iH)$ unitär ist und dass das Skalarprodukt zweier Vektoren unter der Transformation U invariant ist.

Aufgabe 1.2 (Differentialgleichungssystem)

Gegeben sei das System von Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dt}\vec{a}(t) = -iH\vec{a}(t)$$

mit

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 1 & 1 \\ -i & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von H und zerlegen Sie $\vec{a}(0)$ nach den Eigenvektoren.
- Bestimmen Sie die Lösung $\vec{a}(t)$ und skizzieren sie den Real- und Imaginärteil der ersten Komponente von $\vec{a}(t)$ als Funktion von t . Wie ändert sich $|\vec{a}(t)|^2$ als Funktion der Zeit?

Aufgabe 1.3 (Eigenschaften von Wellenfunktionen)

Die beiden Wellenfunktionen

$$\psi_1(\vec{x}, t) = \phi_1(\vec{x}) e^{iE_1 t/\hbar}, \quad \psi_2(\vec{x}, t) = \phi_2(\vec{x}) e^{iE_2 t/\hbar}$$

seien Lösungen der zeitabhängigen freien Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}, t).$$

- Ist die Summe bzw. das Produkt der beiden Funktionen wiederum eine Lösung der Schrödingergleichung?
- Wie entwickelt sich der Betrag von $\psi_1(\vec{x}, t)$, von $\psi_2(\vec{x}, t)$, sowie von $\psi_1(\vec{x}, t) + \psi_2(\vec{x}, t)$ als Funktionen der Zeit?

Aufgabe 1.4 (Galilei-Invarianz der Schrödingergleichung)

Gegeben seien zwei Bezugssystem $S : \vec{x}, t$ und $S' : \vec{x}', t'$ mit

$$\vec{x}' = \vec{x} - \vec{v}t, \quad t' = t.$$

Sei ferner $\psi(\vec{x}, t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}, t). \quad (1.101)$$

Zeigen Sie, dass $\psi'(\vec{x}', t') = e^{i\chi(\vec{x}, t)}\psi(\vec{x}, t)$ mit einer zu bestimmenden reellen Funktion $\chi(\vec{x}, t)$ Lösung einer Schrödingergleichung der selben Form im gestrichenen System ist. Diesen Sachverhalt bezeichnet man als Forminvarianz der Schrödingergleichung unter Galilei-Transformationen.

Hinweis: Sie müssen sich dazu überlegen, wie sich die gestrichenen Differentialoperatoren $\frac{\partial}{\partial t'}$ und ∇' in den ungestrichenen Differentialoperatoren $\frac{\partial}{\partial t}$ und ∇ darstellen lassen. Der bei der Transformation auftretende Phasenfaktor $e^{i\chi(\vec{x}, t)}$ fällt bei Erwartungswerten heraus, hat also auf Messungen keinen Einfluss.

Aufgabe 1.5 (Klassische Wellengleichung)

Gegeben sei die partielle Differentialgleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x, t) = 0.$$

- Lösen Sie diese Differentialgleichung durch einen Ansatz mit ebenen Wellen. Durch welche Dispersionsrelation sind Wellenzahl und Kreisfrequenz miteinander verknüpft?
- Entwickeln Sie eine gegebene Anfangsbedingung zum Zeitpunkt $t = 0$ nach ebenen Wellen und benutzen Sie diese Entwicklung, um eine allgemeine Lösung anzugeben. Achtung: Die Wellengleichung ist zweiter Ordnung in der Zeit.
- Betrachten Sie nun als Anfangsbedingung ein Wellenpaket

$$\psi(x, 0) = \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, 0) = 0$$

und lösen Sie die Wellengleichung unter dieser Anfangsbedingung.

- Wie bewegt sich der Schwerpunkt des Wellenpakets und wie ändert sich seine Form als Funktion der Zeit?

Aufgabe 1.6 (Tunneleffekt)

Lösen Sie die Schrödingergleichung

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

an einer Potentialbarriere von der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |x| > a/2 \\ V_0 & \text{falls } |x| \leq a/2, \end{cases}$$

wobei V_0 die Höhe und a die Breite der Barriere ist. Gesucht sind stationäre Lösungen von der Form $\psi(x, t) = e^{iEt/\hbar}\psi(x)$ mit der Energie E im Bereich $0 < E < V_0$. Im Gegensatz zu klassischen Teilchen ist ein quantenmechanisches Teilchen in der Lage, diese Barriere zu überwinden.

- (a) Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der stationären Schrödingergleichung innerhalb und ausserhalb der Barriere.
- (b) Nehmen Sie an, dass die Lösung im rechten Bereich $x > a/2$ nur aus einer auslaufenden Welle besteht und definieren Sie den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten R, T .
- (c) Lösen Sie die Anschlußbedingungen und rechnen Sie R und T aus.
- (d) Diskutieren Sie die Eigenschaften von R und T in Abhängigkeit von den Parametern der Barriere.

Aufgabe 1.7 (Umgang mit linearen Operatoren)

Gegeben seien die auf L^2 wirkenden linearen Operatoren

$$(A\psi)(x) = x^2\psi(x)$$

$$(B\psi)(x) = x \frac{d}{dx} \psi(x)$$

$$(C\psi)(x) = \int_{-\infty}^x dx' \psi(x')$$

- (a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[A, B]$ und $[B, C]$.
- (b) Lösen Sie das Eigenwertproblem $C\psi = \lambda\psi$.

2 Formalismus

2.1 Zustände und Operatoren im Hilbertraum

2.1.1 Quantenmechanische Zustände als Vektoren im Hilbertraum

Gemäß den im vorherigen Kapitel diskutierten Postulaten der Quantentheorie sind Amplituden $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ linear superponierbar. Wie wir gesehen haben, wird dadurch die Definition einer Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ ermöglicht, die nichts anderes ist als die lineare Überlagerung der Amplituden aller Bahnen, die den Ort \vec{x} zur Zeit t erreichen. Solche Wellenfunktionen können wiederum linear superponiert werden, darauf beruht beispielsweise die Spektralzerlegung nach ebenen Wellen. Das Superpositionsprinzip ermöglicht es, Methoden der linearen Algebra anzuwenden. Allerdings müssen dazu Funktionen wie $\psi(\vec{x}, t)$ als Elemente eines Vektorraums interpretiert werden.



David Hilbert (1862-1943).

Um dies zu verstehen, ist es hilfreich, sich die Wellenfunktion $\psi(x)$ (hier der Einfachheit halber in einer Dimension und zeitunabhängig) als räumlich diskretisiert vorzustellen, d.h. die Funktion sei nur an äquidistanten Stützstellen $x_j = j \Delta x$ bekannt, wobei $j \in \mathbb{Z}$ der Index der Stützstelle und $\Delta x \in \mathbb{R}$ die Schrittweite ist. Die Schrittweite Δx soll so klein gewählt werden, dass die Kenntnis der Funktionswerte $\psi(x_j)$ an den Stützstellen eine hinreichend genaue Rekonstruktion der Wellenfunktion ermöglicht. Die volle Information der Wellenfunktion erhält man im Limes $\Delta x \rightarrow 0$. Die Idee ist nun, die $\psi(x_j)$ aufzulisten und als Spaltenvektor zu betrachten.:

$$\psi(x) \longrightarrow \begin{pmatrix} \dots \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \psi(x_3) \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Ein solcher Vektor ist Element des Vektorraums \mathbb{C}^N , wobei N die Anzahl der Stützstellen ist. Da man aber für $\Delta x \rightarrow 0$ unendlich viele Stützstellen hat, kann man die Funktion $\psi(x)$ in diesem Limes als Vektor in einem unendlichdimensionalen Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen auffassen. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Vektoren wie dem Ortsvektor \vec{r} , die wir weiterhin durch einen Pfeil kennzeichnen wollen, werden wir einen solchen Funktions-Vektor gemäß der Dirac-Notation als sogenannten *ket*-Vektor¹ $|\psi\rangle$ bezeichnen.

¹Ket-Vektoren $|\psi\rangle$ und die im folgenden Abschnitt einzuführenden *bra*-Vektoren $\langle\phi|$ sehen zusammen wie ein Klammerpaar $\langle\phi|\psi\rangle$ (engl. *bra-ket*) aus, was die Namensgebung erklärt.

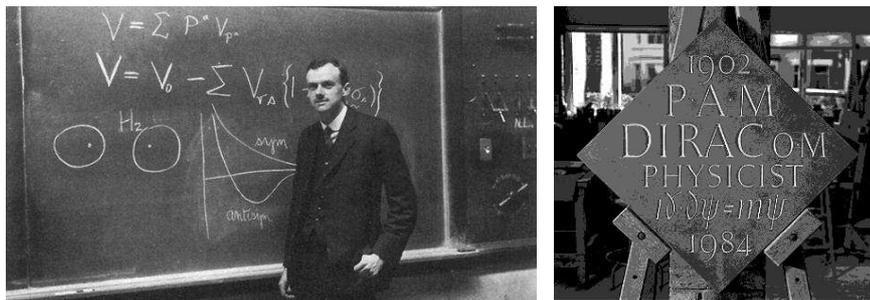


Abbildung 2.1: Paul A. M. Dirac (1902-1984), Grabstein mit Dirac-Gleichung

Der hochdimensionale Vektorraum, in dem diese Vektoren leben, entzieht sich einer anschaulichen Deutung. Trotzdem sollte man sich vergegenwärtigen, dass jeder mögliche Aufenthaltsort des Teilchen, also jeder klassische Zustand, in diesem Vektorraum einer eigenen Dimension entspricht, gewissermaßen hat also der Raum so viele Koordinatenachsen wie klassische Zustände. Da aber der physikalische Ortsraum unendlich viele Punkte besitzt, an denen sich ein Teilchen befinden kann, hat der entsprechende Vektorraum für die Vektoren $|\psi\rangle$ unendlich viele Dimensionen. Unendlichdimensionale Vektorräume können überraschende mathematische Eigenschaften haben, die vor allem von dem Mathematiker David Hilbert systematisch untersucht worden sind. Sie werden deshalb als *Hilberträume* bezeichnet und in der Regel mit dem Buchstaben \mathcal{H} gekennzeichnet.

Jedes Quantensystem besitzt also einen Hilbertraum \mathcal{H} , in dem seine quantenmechanischen Amplituden als Vektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ über dem Körper der komplexen Zahlen dargestellt sind. Diese Vektoren können zeitabhängig sein, in diesem Fall schreiben wir $|\psi(t)\rangle$. Die Dimension des Hilbertraums ist gleich der Anzahl der klassischen Zustände, in der Regel also unendlich. Doch es gibt auch endlichdimensionale Hilberträume, so wird z.B. ein Elektronenspin oder die Polarisationsrichtung eines Photons durch einen zweidimensionalen Hilbertraum beschrieben. Wie bereits erwähnt können unendlichdimensionale Vektorräume gegenüber endlichdimensionalen erweiterte Eigenschaften besitzen, für Anfänger ist es aber ausreichend, Hilberträume zunächst wie endlichdimensionale komplexe Vektorräume zu handhaben.

Genau wie Ort und Impuls den Zustand eines klassischen Teilchens vollständig charakterisieren, beschreiben die Wellenfunktionen bzw. Hilbertraumvektoren vollständig den Zustand eines quantenmechanischen Teilchens. Die Vektoren $|\psi\rangle$ werden deshalb auch als *Zustandsvektoren* und der Hilbertraum \mathcal{H} als *Zustandsraum* bezeichnet.

Bemerkung: Für Anfänger ist es manchmal schwierig, physikalische Vektorräume wie den Orts- und Impulsraum von dem quantenmechanischen Zustandsraum \mathcal{H} zu unterscheiden. Physikalische Vektorräume sind niedrigdimensional und sind anschaulich vorstellbar. Der Hilbertraum \mathcal{H} hingegen ist ein Vektorraum zur Darstellung linear superponierbarer komplexer Funktionen, der unendlichdimensional sein kann.

Die Rechenregeln für Linearkombinationen von Wellenfunktionen übersetzen sich 1:1 in entsprechende Rechenregeln für Zustandsvektoren. Seien $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ und $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$, dann gilt:

Funktionsdarstellung: $(\alpha + \beta)\psi(x) = \alpha\psi(x) + \beta\psi(x)$ $\alpha(\psi(x) + \phi(x)) = \alpha\psi(x) + \alpha\phi(x)$ $\alpha(\beta\psi(x)) = (\alpha\beta)\psi(x)$	vektorielle Darstellung: $(\alpha + \beta) \psi\rangle = \alpha \psi\rangle + \beta \psi\rangle$ $\alpha(\psi\rangle + \phi\rangle) = \alpha \psi\rangle + \alpha \phi\rangle$ $\alpha(\beta \psi\rangle) = (\alpha\beta) \psi\rangle$
---	---

Wie alle linearen Vektorräume enthalten auch quantenmechanische Hilberträume den *Nullvektor* als spezielles Element. Er entspricht anschaulich einem Spaltenvektor, dessen Einträge gleich Null sind. Wir werden den Nullvektor im folgenden wie eine skalare Null, also mit dem Symbol '0' kennzeichnen, z.B. folgt aus $|\psi\rangle - |\phi\rangle = 0$, dass $|\psi\rangle = |\phi\rangle$ ist.

Bemerkung: Man sollte nie für den Nullvektor die Notation $|0\rangle$ verwenden, da die meisten Physiker damit den Grundzustandsvektor bezeichnen, also die Wellenfunktion niedrigster Energie.

Skalarprodukt

Der Hilbertraum \mathcal{H} eines quantenmechanischen Systems ist ausgestattet mit einem inneren Produkt $\mathcal{I} : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, das die üblichen Definitionseigenschaften eines *Skalarprodukts* erfüllt:

1. Komplexkonjugation bei Vertauschung der Argumente:

$$\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = [\mathcal{I}(|\psi_2\rangle, |\psi_1\rangle)]^* \quad (2.2)$$

2. Linearität im rechten Argument:

$$\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, \alpha|\psi_2\rangle + \beta|\psi_3\rangle) = \alpha\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) + \beta\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, |\psi_3\rangle) \quad (2.3)$$

3. Antilinearität im linken Argument²:

$$\mathcal{I}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle) = \alpha^*\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, |\psi_3\rangle) + \beta^*\mathcal{I}(|\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle) \quad (2.4)$$

4. Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst ist positiv definit und induziert eine Norm durch

$$\|\psi\|^2 := \mathcal{I}(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0. \quad (2.5)$$

Diese Norm ist genau dann gleich Null, wenn $|\psi\rangle$ der Nullvektor von \mathcal{H} ist.

Für Quantensysteme, deren Zustandvektoren $|\psi\rangle$ als Wellenfunktionen $\psi(\vec{x})$ dargestellt werden können, erfüllt das Skalarprodukt

$$\mathcal{I}(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = \int d^3x \psi_1^*(\vec{x})\psi_2(\vec{x}) \quad (2.6)$$

die geforderten Eigenschaften und induziert die zuvor in Gl. (1.30) benutzte Norm für die Wellenfunktionen

$$\|\psi\| = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t). \quad (2.7)$$

²Streng genommen folgt die Antilinearität bereits aus 1. und 2.

Mit Hilfe des Skalarprodukts lässt sich ein Vektor normieren:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} \right) |\psi\rangle \quad (2.8)$$

Häufig setzt man voraus, dass die Zustandsvektoren bereits normiert sind und lässt die Schlange weg.

Lineare Funktionale

Funktionale sind Abbildungen, die Funktionen auf Skalare abbilden. In der Quantentheorie sind vor allem Funktionale wichtig, die Wellenfunktionen $\psi(x)$ bzw. Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ auf eine komplexe Zahl abbilden. Von besonderer Bedeutung sind *lineare Funktionale*³, die, wie wir sehen werden, ihrerseits einen Vektorraum bilden.

Ein Funktional $\mathcal{L} : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ heißt *linear* wenn gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) &= \alpha\mathcal{L}(|\psi_1\rangle) + \beta\mathcal{L}(|\psi_2\rangle) \\ (\alpha\mathcal{L}_1 + \beta\mathcal{L}_2)|\psi\rangle &= \alpha\mathcal{L}_1(|\psi\rangle) + \beta\mathcal{L}_2(|\psi\rangle). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Lineare Funktionale können auf elegante Weise als Vektoren dargestellt werden. Dazu wählt man einen Vektor $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ und definiert mit Hilfe des Skalarprodukts $\mathcal{I} : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ das lineare Funktional $\mathcal{L}_{|\phi\rangle}$ durch

$$\mathcal{L}_{|\phi\rangle}(|\psi\rangle) := \mathcal{I}(|\phi\rangle, |\psi\rangle), \quad (2.10)$$

d.h. man belegt das linke Argument des Skalarprodukts mit einem fest gewählten Vektor $|\phi\rangle$ und fasst dann $\mathcal{I}(|\phi\rangle, \dots)$ als ein lineares Funktional im rechten Argument auf. Auf diese Weise wird jedem Vektor $|\phi\rangle$ aus dem Hilbertraum \mathcal{H} ein lineares Funktional zugeordnet.

In der Dirac-Notation werden diese Funktionale als *bra-Vektor*

$$\langle\phi| := \mathcal{L}_{|\phi\rangle} \quad (2.11)$$

geschrieben. Will man solch ein Funktional auf einen *ket*-Vektor anwenden, ‘klebt’ man es gewissermaßen mit der flachen Seite an den *bra*-Vektor. Das Skalarprodukt lässt sich dann auf einfache Weise als ‘sandwich’ $\langle| \rangle$ eines *bra*’s und eines *ket*’s ausdrücken:

$$\mathcal{I}(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \mathcal{L}_{|\phi\rangle}(|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle. \quad (2.12)$$

Dualraum \mathcal{H}^\dagger

Die linearen Funktionale $\langle\phi|$ bezeichnet man als *bra-Vektoren*, da sie mit den gleichen Rechenregeln wie *ket*-Vektoren linear kombiniert werden können. Sie bilden einen zu

³Nicht alle Funktionale sind linear. Ein nichtlineares Funktional ist beispielsweise die Norm $\|\psi\| = \int d^3x \psi^* \psi$, die ψ nach \mathbb{R} abbildet, dabei aber quadratisch in den Amplituden ist.

\mathcal{H} isomorphen Hilbertraum, den sogenannten Dualraum \mathcal{H}^\dagger . Anschaulich kann man sich *bra*-Vektoren als Zeilenvektoren vorstellen, deren Komponenten man durch Komplexkonjugation der entsprechenden Komponenten des *ket*-Vektors erhält.

Für den Isomorphismus zwischen dem Hilbertraum \mathcal{H} und seinem Dualraum \mathcal{H}^\dagger hat sich die kompakte Notation als Dolchabbildung \dagger (engl. *dagger map*)

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|, \quad \langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle \quad (2.13)$$

bewährt. Die Dolchabbildung ist eine Involution, d.h. $|\psi\rangle^{\dagger\dagger} = |\psi\rangle$. Eine wichtige Eigenschaft der Dolchabbildung, die bei Rechnungen bisweilen übersehen wird und dann zu Fehlern führt, ist ihre Antilinearität:

$$\left(\alpha|\phi_1\rangle + \beta|\phi_2\rangle\right)^\dagger|\psi\rangle = \left(\alpha^*\langle\phi_1| + \beta^*\langle\phi_2|\right)|\psi\rangle = \alpha^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \beta^*\langle\phi_2|\psi\rangle. \quad (2.14)$$

In einer Matrixdarstellung entspricht die Dolchabbildung einer Transposition kombiniert mit der Komplexkonjugation aller Komponenten.

Basisvektoren

Eine Menge linear unabhängiger Vektoren $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots\}$, die den gesamten Hilbertraum aufspannen, so dass sich jeder Vektor aus \mathcal{H} als Linearkombination dieser Vektoren darstellen lässt, heisst *Basis* von \mathcal{H} . Mit Hilfe der Dolchabbildung gibt es zu jeder solchen Basis eine entsprechende *adjungierte Basis* $\{\langle e_1|, \langle e_2|, \langle e_3|, \dots\}$ mit isomorphen Eigenschaften.

Sind die Basisvektoren normiert, d.h. $\langle e_i|e_i\rangle = 1$, spricht man von einer *normierten Basis*. Stehen darüber hinaus die Basisvektoren senkrecht aufeinander, ist also

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2.15)$$

handelt es sich um eine *orthonormierte Basis*.

Ein Vektor $|\psi\rangle$ und der dazugehörige Vektor des Dualraums $\langle\psi|$ lassen sich in einer gegebenen Basis eindeutig darstellen als

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |e_i\rangle, \quad \langle\psi| = \sum_i \psi_i^* \langle e_i|. \quad (2.16)$$

Die Komponenten von $|\psi\rangle$ listet man in der Regel als Spaltenvektor auf, während man die Komponenten von $\langle\psi|$ als Zeilenvektor interpretiert. Ein Zeilenvektor geht also aus dem Spaltenvektor durch Transposition und komplexe Konjugation hervor⁴. Das Skalarprodukt ist dann nach der bekannten Regel *Zeile* \times *Spalte* zu bilden:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{ij} \phi_i^* \psi_j \langle e_i|e_j\rangle = \sum_i \phi_i^* \psi_i = \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & \phi_3^* & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Selbstverständlich ist solch eine Komponentendarstellung stets von der Wahl der Basis abhängig.

⁴Ein häufiger Rechenfehler besteht darin, die Komplexkonjugation, also die ‘Sternchen’, zu vergessen.

2.1.2 Operatoren

Lineare Abbildungen

In der Quantentheorie versteht man unter *Operatoren* lineare Abbildungen des Hilbertraums auf sich selbst. Ein Operator \mathbf{A} ist also eine Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit der Eigenschaft

$$\mathbf{A}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha\mathbf{A}(|\psi_1\rangle) + \beta\mathbf{A}(|\psi_2\rangle). \quad (2.18)$$

Weil man die Skalare $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ immer vor die Abbildung ziehen kann, ist es in der Dirac-Notation üblich, die Klammern für das Argument wegzulassen und durch die Konvention zu ersetzen, dass der Operator \mathbf{A} auf alles wirkt, was rechts von ihm steht. Wir schreiben also $\mathbf{A}|\psi\rangle$ statt $\mathbf{A}(|\psi\rangle)$.

Eine ähnliche Konvention gilt für lineare Funktionale, also *bra*-Vektoren $\langle\phi| = |\phi\rangle^\dagger$, die auf $\mathbf{A}|\psi\rangle$ angewandt werden. Auch hier kann man die Klammern weglassen und erhält so ein ‘sandwich’ mit einem in der Mitte eingeklemmten Operator:

$$\left(|\phi\rangle\right)^\dagger\left(\mathbf{A}|\psi\rangle\right) = \langle\phi|\left(\mathbf{A}|\psi\rangle\right) = \langle\phi|\mathbf{A}|\psi\rangle \in \mathbb{C}. \quad (2.19)$$

Operatoren lassen sich anschaulich als Matrizen mit komplexwertigen Elementen deuten. In einem unendlichdimensionalen Hilbertraum sind solche Matrizen natürlich ebenfalls unendlichdimensional. Die in einem ‘sandwich’ $\langle\phi|\mathbf{A}|\psi\rangle$ auftretenden Bestandteile, der Zeilenvektor $\langle\phi|$, die Matrix \mathbf{A} und der Spaltenvektor $|\psi\rangle$, lassen sich in einer Komponentendarstellung dann nach den üblichen Regeln *Zeile* \times *Spalte* berechnen. Die Stärke der Dirac-Notation wird klar, wenn man $\langle\phi|\mathbf{A}$ als Element des Dualraums auffasst. Man kann nämlich hier ohne weiteres \mathbf{A} nach links wirken lassen ohne dass die Notation inkonsistent wird.

Mehrere Operatoren lassen sich hintereinander ausführen, wobei wiederum die Klammern weggelassen werden können:

$$\mathbf{A}\left(\mathbf{B}\left(\mathbf{C}\left(|\psi\rangle\right)\right)\right) = \mathbf{ABC}|\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (2.20)$$

Dabei ist \mathbf{C} der zuerst auf $|\psi\rangle$ angewandte Operator, man arbeitet also die Verkettung von rechts nach links ab. Das Produkt \mathbf{ABC} ist wiederum ein Operator auf \mathcal{H} der anschaulich durch Matrixmultiplikation entsteht. Da diese Verknüpfung assoziativ ist, ist keine Klammerung erforderlich⁵. Lineare Operatoren sind ihrerseits linear kombinierbar, wobei das gewöhnliche Distributivgesetz anzuwenden ist, das uns als ‘Ausmultiplizieren’ vertraut ist:

$$\mathbf{A}\left(\alpha\mathbf{B} + \beta\mathbf{C}\right) = \alpha\mathbf{AB} + \beta\mathbf{AC}, \quad \left(\alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{B}\right)\mathbf{C} = \alpha\mathbf{AC} + \beta\mathbf{BC}. \quad (2.21)$$

Die Hintereinanderausführung von Operatoren ist von Spezialfällen abgesehen im Gegensatz zur Multiplikation von Skalaren im Allgemeinen nicht kommutativ, d.h. $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$; es kommt also auf die Reihenfolge von Operatoren an. Wie wir sehen werden, ist die Nichtkommutativität bestimmter Operatoren in fundamentaler Weise verantwortlich für

⁵Assoziativität, also die Irrelevanz der Klammerung, ist eine nichttriviale Eigenschaft, z.B. ist das Kreuzprodukt von Vektoren nicht assoziativ.

Quanteneffekte. Es kann jedoch auch vorkommen, dass zwei Operatoren kommutieren, also $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ ist. Man sagt dann, dass die Operatoren miteinander vertauschen. In diesem Fall ist der sogenannte *Kommutator*

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad (2.22)$$

gleich Null. Kommutatoren erfüllen die folgenden Rechenregeln:

$$\text{Asymmetrie:} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}] \quad (2.23)$$

$$\text{Linearität:} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B} + \mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (2.24)$$

$$\text{Distributivität:} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (2.25)$$

$$\text{Jacobi-Identität:} \quad [\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0 \quad (2.26)$$

Als ähnliche Notation benutzt man in der Quantentheorie auch den *Antikommutator*⁶

$$\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\} := \mathbf{AB} + \mathbf{BA}. \quad (2.27)$$

Wie wir noch sehen werden, treten Antikommutatoren bei Teilchen auf, die dem Pauli-Prinzip unterliegen.

Lineare Abbildungen sind invertierbar, wenn die ihre Determinante ungleich Null ist. Die Inversion von Matrizen und das Bilden von Determinanten wird hier als bekannt vorausgesetzt.

Diagonalisierung

Durch eine lineare Abbildung \mathbf{A} wird jeder Vektor des Hilbertraums auf einen neuen Vektor abgebildet. Ein Vektor $|\phi\rangle$, der unter dieser Abbildung seine Richtung beibehält, heisst *Eigenvektor* von \mathbf{A} und der entsprechende Faktor λ , um den sich seine Länge ändert, heisst *Eigenwert*. Beide bestimmt man aus der *Eigenwertgleichung*

$$\mathbf{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle. \quad (2.28)$$

Diese hat nur dann eine Lösung, wenn das charakteristische Polynom

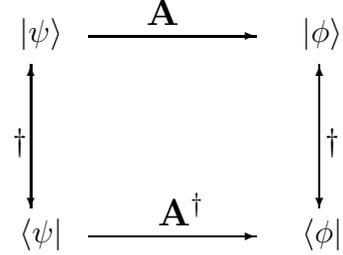
$$\det[\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1}] = 0 \quad (2.29)$$

ist. Dieses Polynom hat in endlichdimensionalen Vektorräumen über dem Körper der komplexen Zahlen nach dem Fundamentalsatz der Algebra d Lösungen λ_i , wobei d die Dimension des Vektorraums ist. Fallen mehrere Eigenwerte zusammen, so spricht man von *entarteten* Eigenwerten.

⁶Viele Autoren benutzen auch die Notation $[\cdot, \cdot]_-$ für den Kommutator und $[\cdot, \cdot]_+$ für den Antikommutator.

Hermitesche Konjugation

Ein Operator \mathbf{A} bildet den Hilbertraum \mathcal{H} auf sich selbst ab, bildet also einen *ket*-Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ nach $|\phi\rangle := \mathbf{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ab. Wir suchen nun einen entsprechenden Operator \mathbf{A}^\dagger im Dualraum. Dieser soll mit dem Isomorphismus der Dolchabbildung \dagger verträglich sein (siehe nebenstehendes Diagramm), d.h. es soll gelten $\langle\phi| = \langle\psi|\mathbf{A}^\dagger \in \mathcal{H}^\dagger$. Man bezeichnet \mathbf{A}^\dagger als den *hermitesch konjugierten Operator* von \mathbf{A} .



Um \mathbf{A}^\dagger zu bestimmen, versehen wir die erste Gleichung von links mit einem *bra*-Vektor $\langle\omega|$ und die zweite Gleichung von rechts mit einem *ket*-Vektor $|\omega\rangle$

$$\langle\omega|\phi\rangle = \langle\omega|\mathbf{A}|\psi\rangle, \quad \langle\phi|\omega\rangle = \langle\psi|\mathbf{A}^\dagger|\omega\rangle, \quad (2.30)$$

und gelangen wegen $\langle\omega|\phi\rangle = \langle\phi|\omega\rangle^*$ zu der Beziehung

$$\langle\psi|\mathbf{A}^\dagger|\omega\rangle = \langle\omega|\mathbf{A}|\psi\rangle^*. \quad (2.31)$$

Stellt man sich \mathbf{A} als komplexe Matrix und die Vektoren $\langle\psi|$ bzw. $|\omega\rangle$ als kanonische Basisvektoren vor, dann geht \mathbf{A}^\dagger aus \mathbf{A} durch Transposition und Komplexkonjugation hervor, d.h.

$$\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T)^* = (\mathbf{A}^*)^T. \quad (2.32)$$

Die Dolchabbildung ist damit nicht nur auf Vektoren sondern auch auf Operatoren anwendbar. Nach wie vor ist sie antilinear, d.h. auch bei der Konjugation von Operatoren müssen vorgezogene Skalare komplex konjugiert werden:

$$(\alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{B})^\dagger = \alpha^*\mathbf{A}^\dagger + \beta^*\mathbf{B}^\dagger. \quad (2.33)$$

Bei Hintereinanderausführung dreht sich außerdem die Reihenfolge der Operatoren um:

$$(\mathbf{ABC}\dots)^\dagger = \dots\mathbf{C}^\dagger\mathbf{B}^\dagger\mathbf{A}^\dagger. \quad (2.34)$$

Fasst man diese Regeln zusammen, so kann in der Dirac-Notation zu jeder Gleichung eine *adjungierte Gleichung* durch folgendes rezeptartiges Vorgehen:

- Jeder Term wird horizontal gespiegelt, d.h. die Reihenfolge der Ausdrücke wird umgedreht. Dabei werden *bra*'s zu *ket*'s und umgekehrt.
- Operatoren werden hermitesch konjugiert, werden also mit einem \dagger versehen.
- Skalare werden komplex konjugiert, werden also mit einem $*$ versehen.

Beispiel: Die adjungierte Gleichung zu

$$\alpha|\chi\rangle\langle\psi|\mathbf{ABC}|\phi\rangle - \mathbf{P}|\phi\rangle = 0 \quad (2.35)$$

lautet beispielsweise

$$\alpha^*\langle\phi|\mathbf{C}^\dagger\mathbf{B}^\dagger\mathbf{A}^\dagger|\psi\rangle\langle\chi| - \langle\phi|\mathbf{P}^\dagger = 0 \quad (2.36)$$

Der Informationsinhalt beider Gleichungen ist identisch.

Hermitesche Operatoren

Ein Operator, für den $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ gilt, heißt *selbstadjungiert* bzw. *hermitesch*. Hermitesche Operatoren spielen in der Quantentheorie im Zusammenhang mit Messprozessen eine grundlegende Rolle.

Hermitesche Operatoren haben stets reelle Eigenwerte. Um das zu sehen, bildet man die adjungierte Eigenwertgleichung:

$$\mathbf{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \xrightarrow{\dagger} \langle\phi|\mathbf{A}^\dagger = \lambda^*\langle\phi| \quad (2.37)$$

Multipliziert man beide Gleichungen von links mit $\langle\phi|$ bzw. von rechts mit $|\phi\rangle$ und macht Gebrauch von $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ erhält man $\lambda\langle\phi|\phi\rangle = \lambda^*\langle\phi|\phi\rangle$, also muss λ reell sein.

Die Eigenvektoren hermitescher Operatoren stehen außerdem immer paarweise senkrecht aufeinander, sofern die entsprechenden Eigenwerte verschieden sind. Sind nämlich $|\phi_1\rangle$ und $|\phi_2\rangle$ zwei Eigenvektoren mit den Eigenwerten λ_1 und λ_2 , dann ist

$$\mathbf{A}|\phi_1\rangle = \lambda_1|\phi_1\rangle \rightarrow \langle\phi_2|\mathbf{A}|\phi_1\rangle = \lambda_1\langle\phi_2|\phi_1\rangle \quad (2.38)$$

$$\langle\phi_2|\mathbf{A}^\dagger = \lambda_2^*\langle\phi_2| \rightarrow \langle\phi_2|\mathbf{A}|\phi_1\rangle = \lambda_2\langle\phi_2|\phi_1\rangle \quad (2.39)$$

woraus entweder $\lambda_1 = \lambda_2$ oder $\langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0$ folgt.

Wir wollen hier ohne Beweis zur Kenntnis nehmen, dass hermitesche Matrizen immer diagonalisierbar sind. Hat das Spektrum (also die Eigenwerte) keine Entartungen, bilden die Eigenvektoren automatisch eine orthogonale Basis, die auch als *Eigenbasis* bezeichnet wird. Bei Entartungen ist jeder Vektor in den entarteten Teilräumen ein Eigenvektor und damit ist die orthogonale Basis nicht eindeutig bestimmt.

Die Summe zweier hermitescher Operatoren $\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$ ist wiederum ein hermitescher Operator, dagegen ist das Produkt zweier hermitescher Operatoren im Allgemeinen nicht hermitesch.

Ein Operator mit der Eigenschaft $\mathbf{B} = -\mathbf{B}^\dagger$ heißt *antihermitesch*. Solche Operatoren lassen sich durch Multiplikation mit i immer auf hermitesche Operatoren zurückführen. Sie besitzen deshalb ebenfalls ein orthonormales Basissystem von Eigenvektoren, das Spektrum ist jedoch rein imaginär.

Vektor- und Tensoroperatoren

Die klassische Mechanik eines Punktteilchens im \mathbb{R}^3 wird mit Hilfe von Skalaren, Vektoren und Tensoren formuliert. Diese Begriffe reflektieren die Rotationsinvarianz der Systeme im physikalischen Ortsraum.

Zur Erinnerung: Ein Skalar ist eine einkomponentige Größe, die unter gewöhnlichen räumlichen Drehungen im \mathbb{R}^3 invariant ist. Ein Vektor \vec{a} ist dagegen eine Größe, deren drei Komponenten $(a_1, a_2, a_3)^T$ sich unter Drehungen $R \in SO(3)$ gemäß

$$a_i \rightarrow a'_i = \sum_{j=1}^3 R_{i,j} a_j \quad (2.40)$$

transformieren, wobei $R_{i,j}$ eine 3×3 -Drehmatrix ist, also beispielsweise eine Rotation um die z -Achse

$$R_{i,j} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Anders ausgedrückt ist also ein Vektor eine Größe, dessen drei Komponenten sich unter Drehungen genau so verändern wie die eines Ortsvektor. Ein Tensor zweiter Stufe ist eine Größe mit zwei Indices T_{i_1,i_2} , also gewissermaßen eine 3×3 -Matrix, deren 9 Komponenten sich unter Drehungen gemäß

$$T_{i_1,i_2} \rightarrow T'_{i_1,i_2} = \sum_{j_1=1}^3 \sum_{j_2=1}^3 R_{i_1,j_1} R_{i_2,j_2} T_{j_1,j_2} \quad (2.42)$$

Man sagt auch, dass ein Tensor eine Größe ist, die sich in jedem Index wie ein Vektor transformiert. Dementsprechend ist ein Tensor k -ter Stufe eine Größe T_{i_1,i_2,\dots,i_k} mit 3^k Komponenten, die sich unter Drehungen gemäß

$$T_{i_1,i_2,\dots,i_k} \rightarrow T'_{i_1,i_2,\dots,i_k} = \sum_{j_1} \sum_{j_2} \cdots \sum_{j_k} R_{i_1,j_1} R_{i_2,j_2} \cdots R_{i_k,j_k} T_{j_1,j_2,\dots,j_k} \quad (2.43)$$

transformiert.

Dieses Konzept wird nun auf Operatoren im Hilbertraum übertragen. Dabei muss man genau zwischen dem physikalischen Ortsraum \mathbb{R}^3 , in dem Drehungen R stattfinden, und dem quantenmechanischen Hilbertraum \mathcal{H} , also dem linearen Vektorraum der quadratintegrablen Wellenfunktionen auf diesem Ortsraum unterscheiden. Die Räume sind nicht unabhängig, denn eine Drehung im Ortsraum führt auch zu einer Veränderung der Wellenfunktion und damit zu einer Änderung des Zustandsvektors im Hilbertraum.

Ein *skalärer Operator* ist eine lineare Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, die unter räumlichen Drehungen im \mathbb{R}^3 invariant ist, deren Matrixelemente sich also unter Rotationen nicht ändern. Ein *Vektoroperator* $\vec{\mathbf{A}}$ ist eine lineare Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}^3 \otimes \mathcal{H}$, die man sich in der kartesischen Basis des \mathbb{R}^3 als einen 3-komponentigen Spaltenvektor vorstellen kann, dessen Einträge drei unendlichdimensionale Matrizen $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3$ sind:

$$\vec{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \\ \mathbf{A}_3 \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Diese drei ‘Komponenten’ müssen sich bei Drehungen so transformieren wie ein gewöhnlicher Ortsvektor, d.h.

$$\mathbf{A}_i \rightarrow \mathbf{A}'_i = \sum_{j=1}^3 R_{i,j} \mathbf{A}_j \quad (2.45)$$

Eine räumliche Drehung mischt also die drei Operatoren auf genau die gleiche Weise, wie sie die Komponenten eines Ortsvektors miteinander mischt. Entsprechend ist ein *Tensoroperator* k -ter Stufe eine lineare Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}^{3k} \otimes \mathcal{H}$, die sich in jedem Index wie ein Vektor transformiert:

$$\mathbf{T}_{i_1,i_2,\dots,i_k} \rightarrow \mathbf{T}'_{i_1,i_2,\dots,i_k} = \sum_{j_1} \sum_{j_2} \cdots \sum_{j_k} R_{i_1,j_1} R_{i_2,j_2} \cdots R_{i_k,j_k} \mathbf{T}_{j_1,j_2,\dots,j_k} \quad (2.46)$$

In der Praxis spielen vor allem Tensoroperatoren zweiter und manchmal auch dritter Stufe eine Rolle.

Beispiele von Operatoren

Es gibt zahlreiche lineare Operatoren auf dem Hilbertraum der quadratintegriblen Wellenfunktionen. Im Folgenden wollen wir einige wichtige Beispiele diskutieren:

a) Einheitsoperator: Der einfachste Operator ist der *Einheitsoperator* $\mathbf{1}$, also die identische Abbildung $\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$, die in Matrixdarstellung einer Einheitsmatrix entspricht. Manche Autoren benutzen auch die Notation \mathbf{I} oder \mathbf{E} für den Einheitsoperator. Der Einheitsoperator hat die besondere Eigenschaft, dass er mit jedem anderen Operator kommutiert.

b) Diagonaler Operator: Als weiteres Beispiel betrachten wir einen Operator \mathbf{F} , dessen Wirkungsweise darin besteht, eine Wellenfunktion $\phi(\vec{x})$ mit einer anderen Funktion $f(x)$ zu multiplizieren:

$$\mathbf{F} : |\phi\rangle \rightarrow \mathbf{F}|\phi\rangle : \quad \phi(\vec{x}) \rightarrow f(\vec{x})\phi(\vec{x}). \quad (2.47)$$

Man beachte, dass dieser Operator \mathbf{F} immer linear ist, selbst dann, wenn $f(\vec{x})$ eine nicht-lineare Funktion von \vec{x} sein sollte. Außerdem handelt sich um einen in der Ortsraumdarstellung *diagonalen Operator*, da nur Funktionswerte am gleichen Ort \vec{x} miteinander multipliziert werden. Stellt man sich für in einer Dimension diskretisierte Koordinaten x_j den Operator \mathbf{F} als Matrix vor, so hätte dieser tatsächlich eine diagonale Gestalt:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \dots & & & & & & \\ & f(x_{-1}) & & & & & \\ & & f(x_0) & & & & \\ & & & f(x_1) & & & \\ & & & & f(x_2) & & \\ & & & & & \dots & \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

Beachten Sie, dass der Begriff ‘diagonal’ von der gewählten Basis abhängt. In einer gegebenen Basis kommutieren alle diagonalen Operatoren miteinander, während sie mit nichtdiagonalen Operatoren im Allgemeinen nicht kommutieren. Diagonale Operatoren sind genau dann hermitesch, wenn die Funktion $f(x)$, also die Matrixelemente entlang der Diagonalen, reell sind. Für $f(\vec{x}) \equiv 1$ erhält man als Spezialfall die identische Abbildung, also den Einheitsoperator $\mathbf{1}$.

c) Ortsoperator: Der in der Quantentheorie von Wellenfunktionen häufig verwendete *Ortsoperator* ist ein *Vektoroperator*

$$\vec{\mathbf{X}} : |\phi\rangle \rightarrow \vec{\mathbf{X}}|\phi\rangle : \quad \phi(\vec{x}) \rightarrow \vec{x} \phi(\vec{x}). \quad (2.49)$$

dessen drei Komponenten aus den Operatoren $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3$ bestehen, die in der Ortsraum-basis diagonal sind und deshalb miteinander kommutieren⁷, d.h. $[\mathbf{X}_j, \mathbf{X}_k] = 0$. Dass sich die drei Komponenten unter Drehungen wie ein klassischer Ortsvektor transformieren, ergibt sich unmittelbar aus der Definition. Da $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ reell ist, ist $\vec{\mathbf{X}}$ ein hermitescher Vektoroperator.

⁷Die nichtkommutative Geometrie, eine aktuelle theoretische Forschungsrichtung, gibt diese Annahme auf und geht davon aus, dass die drei Komponenten des Ortsoperators nicht miteinander vertauschen.

d) Gradient: Ein weiterer wichtiger linearer Operator in der Quantentheorie ist der Gradient

$$\nabla_x : |\phi\rangle \rightarrow \nabla_x |\phi\rangle : \phi(\vec{x}) \rightarrow \nabla_x \phi(\vec{x}). \quad (2.50)$$

Wie der Ortsvektor, so ist auch der Gradient $\nabla_x = (\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3})$ ein Vektoroperator, da sich seine Komponenten unter Drehungen wie ein Vektor transformieren.

In einer Dimension ist es hilfreich, sich den Ableitungsoperator $\frac{d}{dx}$ in einer diskretisierten Darstellung als Grenzfall des symmetrisierten Differenzenquotienten vorzustellen:

$$\frac{d}{dx} f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2 \Delta x} \quad (2.51)$$

und damit eine Matrixdarstellung des Ableitungsoperators

$$\frac{d}{dx} \simeq \frac{1}{2 \Delta x} \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & & & & \\ & -1 & 0 & 1 & & & \\ & & -1 & 0 & 1 & & \\ & & & -1 & 0 & 1 & \\ & & & & -1 & 0 & 1 \\ & & & & & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

vor Augen zu haben. Ein Ableitungsoperator entspricht also einer tridiagonalen Matrix. Diese Matrix ist reell und antisymmetrisch, der Gradient ist also ein *antihermitescher* Operator, d.h. es gilt $\nabla_x^\dagger = -\nabla_x$.

In der Quantentheorie begegnet uns der Gradient in Form des *Impulsoperators*

$$\mathbf{P} = -i\hbar \nabla_x. \quad (2.53)$$

Der Vorfaktor i bewirkt, dass \mathbf{P} ein hermitescher Vektoroperator ist.

e) Laplaceoperator: Bildet man das gewöhnliche \mathbb{R}^3 -Skalarprodukt des Gradienten mit sich selbst, so erhält man einen skalaren Operator, den sogenannten Laplace-Operator $\nabla_x^2 = \nabla_x \cdot \nabla_x$. Der Laplacian kann in einer Dimension als Grenzwert des Differenzenquotienten

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{2(\Delta x)^2} \quad (2.54)$$

dargestellt werden und entspricht damit anschaulich einer tridiagonalen Matrix der Form

$$\frac{d^2}{dx^2} \simeq \frac{1}{2(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Der Laplaceoperator ist ein hermitescher Operator und ist in der nichtrelativistischen Quantentheorie Bestandteil des *Hamiltonoperators* eines Massepunktes in einem Potential:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + V(x) \quad (2.56)$$

Dyaden

Eine besondere Klasse von Operatoren sind die *Dyaden*. In der Dirac-Notation sehen sie aus wie ein ‘Antisandwich’ aus *ket*- und *bra*-Vektor:

$$\mathbf{A} = |\psi\rangle\langle\phi|. \quad (2.57)$$

Offenbar ist das so definierte Objekt ein linearer Operator $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Wegen $\mathbf{A}^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$ ist er nur dann hermitesch, wenn $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ kollinear sind.

In einer orthonormierten Basis $\{|e_i\rangle\}$ kann die zu \mathbf{A} gehörende Matrix $A_{ij} = \langle e_i|\psi\rangle\langle\phi|e_j\rangle$ nach der Regel ‘jeder mit jedem’ komponentenweise gebildet werden:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & \phi_3^* & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1\phi_1^* & \psi_1\phi_2^* & \psi_1\phi_3^* & \dots \\ \psi_2\phi_1^* & \psi_2\phi_2^* & \psi_2\phi_3^* & \dots \\ \psi_3\phi_1^* & \psi_3\phi_2^* & \psi_3\phi_3^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

Man sieht bereits, dass Dyaden eine spezielle Teilmenge von Operatoren bilden, denn sie haben in einem d -dimensionalen Hilbertraum $2d$ Freiheitsgrade (nämlich die Komponenten der beiden Vektoren), während allgemeine Operatoren dargestellt als Matrizen d^2 Freiheitsgrade besitzen.

Bei Dyaden sind drei Fälle zu unterscheiden:

1. Wenn beide Vektoren gleich sind, dann ist $|\psi\rangle\langle\psi|$ ein Vielfaches eines Projektionsoperators (siehe folgender Abschnitt).
2. Wenn beide Vektoren orthogonal sind, also beispielsweise $\mathbf{A} = |e_1\rangle\langle e_2|$, so ist \mathbf{A} nicht diagonalisierbar.
3. In allen anderen Fällen ist eine Dyade $|\psi\rangle\langle\phi|$ diagonalisierbar. Nur einer ihrer Eigenvektoren hat einen Eigenwert verschieden von Null, nämlich $|\psi\rangle$ mit dem Eigenwert $\langle\phi|\psi\rangle$. Der Eigenwert Null ist dagegen $d - 1$ -fach entartet.

Projektoren und Teilräume

Ein Operator mit der Eigenschaft

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} \quad (2.59)$$

heißt *Projektionsoperator* oder auch *idempotenter* Operator. Man kann sich leicht überlegen, dass die Eigenwerte eines Projektionsoperators die Gleichung $\lambda^2 = \lambda$ erfüllen müssen, so dass das Spektrum nur aus Einsen und Nullen bestehen kann. Ein Projektionsoperator projiziert auf einen *Teilraum* des Hilbertraums, der von den Eigenvektoren mit Eigenwert 1 aufgespannt wird. Bei wiederholter Anwendung des Projektionsoperators wird dieser Untervektorraum wieder auf sich selbst abgebildet.

In der Quantentheorie spielen vor allem *hermitesche Projektionsoperatoren* eine wichtige Rolle, also solche, für die zusätzlich $\mathbf{P} = \mathbf{P}^\dagger$ gilt. Diese werden wegen ihrer orthogonalen Eigenvektoren auch als *orthogonale* Projektionsoperatoren oder kurz als *Projektoren* bezeichnet. Im Folgenden wird daher immer vorausgesetzt, dass Projektionsoperatoren hermitesch sind.

Beispiel: Im \mathbb{R}^2 sind die Operatoren

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

beide Projektionsoperatoren auf die x -Achse, jedoch ist P_1 nicht hermitesch.

Zwei Projektionsoperatoren \mathbf{P}_1 und \mathbf{P}_2 heißen *orthogonal aufeinander*, wenn $\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2 = 0$ ist. Die Summe orthogonaler Projektionsoperatoren ist wiederum ein Projektionsoperator, der auf den Aufspann der jeweiligen Teilräume projiziert. Eine Menge $\{\mathbf{P}_i\}$ von orthogonalen Projektionsoperatoren heißt *vollständig*, wenn

$$\sum_i \mathbf{P}_i = \mathbf{1} \quad (2.60)$$

Beispiel: In der Standardbasis des \mathbb{R}^3 bilden die drei Operatoren

$$\mathbf{P}_x = |e_1\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_y = |e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_z = |e_3\rangle\langle e_3| = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{pmatrix},$$

einen vollständigen Satz orthogonaler Projektionsoperatoren, die auf die Achsen des Koordinatensystems projizieren. Die $\mathbf{P}_{xy} = \mathbf{P}_x + \mathbf{P}_y$ ist wiederum ein Projektionsoperator, der in die xy -Ebene projiziert (und nicht etwa nur auf die beiden Achsen).

Eine *Dyade* aus zwei gleichen normierten Vektoren $|\psi\rangle\langle\psi|$ ist ein Projektor, der auf einen eindimensionalen Teilraum projiziert, nämlich auf den Vektor $|\psi\rangle$. Man kann jeden Projektor als Summe solcher Dyaden aus orthonormierten Basisvektoren seines Teilraums darstellen.

Spektralzerlegung hermitescher Operatoren

Wir haben bereits gesehen, dass man für einen hermiteschen Operator \mathbf{A} mit Spektrum $\{\lambda_i\}$ immer ein vollständiges orthonormiertes System von Eigenvektoren $\{|\phi_i\rangle\}$ konstruieren kann. Jeder Vektor $|\psi\rangle$, auf den ein solcher Operator \mathbf{A} angewandt wird, kann also nach diesen Eigenvektoren zerlegt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle. \quad (2.61)$$

Indem man von links einen *bra*-Eigenvektor $\langle\phi_j|$ anwendet, erhält man die Entwicklungskoeffizienten $c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle$. Daraus folgt

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_i \langle\phi_i|\psi\rangle \mathbf{A}|\phi_i\rangle = \sum_i \langle\phi_i|\psi\rangle \lambda_i |\phi_i\rangle = \underbrace{\sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|}_{=\mathbf{A}} |\psi\rangle \quad (2.62)$$

so dass man zur sogenannten *Spektralzerlegung*

$$\mathbf{A} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (2.63)$$

gelangt. Ein hermitescher Operator lässt sich also immer darstellen als eine mit den Eigenwerten gewichtete Summe von Projektionsoperatoren auf die Eigenwerte. Diese Projektionsoperatoren haben die Form symmetrischer Dyaden, die aus dem normierten Eigenvektor gebildet werden.

Funktionen von Operatoren

Eine skalare Funktion $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} : x \rightarrow f(x)$ kann benutzt werden, um Operatoren abzubilden. Die in diesem Zusammenhang am häufigsten verwendete Funktion ist die Exponentialfunktion, die dann als *Matrixexponentialfunktion* bezeichnet wird.

Für die Anwendung von Funktionen auf Operatoren gibt es unterschiedliche Herangehensweisen. Handelt es sich bei der Funktion beispielsweise um ein Polynom $f(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k$, dann kann man die Variable x durch den Operator \mathbf{A} ersetzen und erhält den wohldefinierten Ausdruck

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^n c_k \mathbf{A}^k, \quad (2.64)$$

denn die Potenzen von \mathbf{A} können durch Matrixmultiplikation bestimmt werden. Ein ähnliches Vorgehen bietet sich bei Funktionen an, die in eine Taylorreihe $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$ entwickelt werden können. Dabei müssen jedoch beliebig hohe Potenzen von \mathbf{A} gebildet werden, so dass die Konvergenz einer solchen Reihe sorgfältig untersucht werden muss.

Bemerkung: Taylorreihen sind besonders dann nützlich, wenn algebraische Relationen bekannt sind, die das Berechnen hoher Potenzen darstellungsfrei ermöglichen. Als Beispiel berechnen wir die Exponentialfunktion $\exp(\mathbf{P})$ eines Projektionsoperators \mathbf{P} . Die algebraische Relation $P^2 = P$ reduziert alle Potenzen mit Ausnahme der nullten Ordnung auf \mathbf{P} , d.h.

$$\exp(\mathbf{P}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbf{P}^k}{k!} = \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\mathbf{P}}{k!} = \mathbf{1} + (e-1)\mathbf{P}.$$

Die alternative und anschaulichere Herangehensweise besteht darin, das Problem in der Basis der Eigenvektoren von \mathbf{A} darzustellen. In dieser Basis entspricht der Operator \mathbf{A} einer diagonalen Matrix, so dass f nur auf jeden der Diagonaleinträge separat angewendet werden muss. Da auf der Diagonalen die Eigenwerte stehen, bedeutet dies, dass die Anwendung einer Funktion auf einen Operator dessen Eigenwerte durch $\lambda_i \rightarrow f(\lambda_i)$ verändert, dass jedoch die Eigenvektoren unverändert bleiben. Für die zuvor diskutierte Spektralzerlegung bedeutet dies, dass

$$\mathbf{A} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{A}) = \sum_i f(\lambda_i) |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (2.65)$$

Man kann also $f(\mathbf{A})$ bilden, indem man von der gegebenen Basis zunächst in die Eigenbasis des Operators \mathbf{A} transformiert, dort die Eigenwerte λ_i durch $f(\lambda_i)$ ersetzt und schließlich von der Eigenbasis in die ursprüngliche Basis zurücktransformiert.

Beispiel: Was ist $f(-i\frac{d}{dx})$? Gar nicht so leicht zu beantworten, weil unendlich hohe Potenzen des Ableitungsoperators in der Taylorreihe von f vorkommen können. Doch die 'Eigenvektoren' des Ableitungsoperators sind Wellen e^{ikx} mit Eigenwerten k . Deshalb ist

$$f\left(-i\frac{d}{dx}\right)e^{ikx} = f(k)e^{ikx}. \quad (2.66)$$

Ist $\tilde{\psi}(k)$ die Fourier-Transformierte einer Funktion $\psi(x)$, läuft also die Berechnung von

$f(-i\frac{d}{dx})\psi(x)$ auf folgendes Integral hinaus:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \\ \Rightarrow f\left(-i\frac{d}{dx}\right)\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} f(k) \tilde{\psi}(k) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(k) e^{-ikx'} \psi(x').\end{aligned}\quad (2.67)$$

Unitäre Transformationen

Eine lineare Abbildung \mathbf{U} , unter der das Skalarprodukt invariant ist, heisst *unitär*. Anschaulich sind solche Abbildungen im Hilbertraum winkeltreu, also vergleichbar mit den Drehungen im \mathbb{R}^3 . Trotzdem sind sie nicht mit echten räumlichen Drehungen zu verwechseln.

Aus der Invarianz des Skalarprodukts folgt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \mathcal{I}(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \mathcal{I}(\mathbf{U}|\phi\rangle, \mathbf{U}|\psi\rangle) = \langle \phi | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} | \psi \rangle. \quad (2.68)$$

Da dies für alle $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ erfüllt ist, muss gelten:

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1}, \quad (2.69)$$

d.h. \mathbf{U}^\dagger ist das Inverse von \mathbf{U} . Unitäre Operatoren sind also immer invertierbar und es ist besonders einfach, die inverse Abbildung zu bestimmen. Wendet man auf Gl. (2.69) von links den Operator \mathbf{U} und von rechts den Operator \mathbf{U}^{-1} an, folgt daraus

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}. \quad (2.70)$$

Man beachte, dass diese Beziehung nicht durch einfache Konjugation aus Gl (2.69) hervorgeht.

Da $\det(\mathbf{U}) \det(\mathbf{U}^\dagger) = |\det(\mathbf{U})|^2 = 1$ ist, folgert man sofort, dass

$$\det \mathbf{U} = e^{i\phi} \quad (2.71)$$

ist. Eine unitäre Abbildung ist also volumenerhaltend, es kann aber zu einer Drehung der komplexen Phase kommen, doch solche Phasendrehungen sind grundsätzlich nicht messbar.

Da das Skalarprodukt invariant ist, erhält eine unitäre Transformation auch die Norm eines Vektors. Die Vektoren $|\psi\rangle$ und $\mathbf{U}|\psi\rangle$ haben also die gleiche Länge. Daraus ergibt sich sofort, dass für Eigenwerte λ der Eigenwertgleichung $\mathbf{U}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ die Beziehung $\lambda\lambda^* = 1$ gilt, dass also die Eigenwerte einer unitären Abbildung komplexe Zahlen auf dem Einheitskreis sind.

Ein Produkt zweier unitärer Operatoren $\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2$ ist wiederum ein unitärer Operator, da $(\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2)^\dagger \mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2 = \mathbf{U}_2^\dagger \mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2 = \mathbf{1}$ ist. Dagegen ist die Summe zweier unitärer Operatoren im Allgemeinen nicht unitär.

Exponentialfunktion und Generatoren

Unitäre Operatoren werden von hermiteschen Operatoren mit Hilfe der Exponentialfunktion erzeugt. Sei dazu $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ ein hermitescher Operator und

$$\mathbf{U}_\alpha := e^{i\alpha\mathbf{A}} \quad (2.72)$$

ein Operator mit einem reellen Parameter $\alpha \in \mathbb{R}$, den man sich als Drehwinkel vorstellen kann. Dabei ist die Exponentialfunktion als Abbildung von der Menge aller Operatoren auf sich selbst zu verstehen, die entweder durch die Taylorreihe

$$e^{i\alpha\mathbf{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha\mathbf{A})^n}{n!} \quad (2.73)$$

oder durch den Grenzprozess

$$e^{i\alpha\mathbf{A}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} + \frac{i\alpha\mathbf{A}}{m} \right)^m \quad (2.74)$$

definiert ist. Dabei wird die Konvention $\mathbf{A}^0 = \mathbf{1}$ verwendet. Alternativ kann man, wie bereits zuvor diskutiert, den Operator in der Basis seiner Eigenvektoren darstellen und die diagonalen Matrixelemente einzeln mit der Exponentialfunktion abbilden.

Da $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ ist, gilt

$$\mathbf{U}_\alpha^\dagger = \left(e^{i\alpha\mathbf{A}} \right)^\dagger = \left(e^{-i\alpha\mathbf{A}^\dagger} \right) = \left(e^{-i\alpha\mathbf{A}} \right) = \mathbf{U}_\alpha^{-1}, \quad (2.75)$$

d.h. \mathbf{U}_α ist unitär.

Im Limes kleiner ‘Winkel’ $\alpha \rightarrow 0$ kann die Taylorreihe der Exponentialfunktion in erster Ordnung durch

$$\mathbf{U}_\alpha \approx \mathbf{1} + i\alpha\mathbf{A} + \mathcal{O}(\alpha^2) \quad (2.76)$$

genähert werden. Der hermitesche Operator \mathbf{A} erweist sich dabei als infinitesimaler *Generator* einer unitären Transformation.⁸

Unitäre Transformationen, die von einem hermiteschen Generator mit Hilfe der Exponentialfunktion erzeugt werden, erfüllen die Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\alpha} \mathbf{U}_\alpha = i\mathbf{A}\mathbf{U}_\alpha. \quad (2.77)$$

Ein Zustand $|\psi_\alpha\rangle := \mathbf{U}_\alpha|\psi_0\rangle$, der aus $|\psi_0\rangle$ durch eine solche unitäre Transformation hervorgeht, erfüllt seinerseits die Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\alpha} |\psi_\alpha\rangle = i\mathbf{A}|\psi_\alpha\rangle. \quad (2.78)$$

Die Schrödingergleichung hat (bis auf ein Vorzeichen) genau diese Struktur. Wie wir sehen werden, ist die Zeitentwicklung in der Quantentheorie eine unitäre Transformation, die vom Energieoperator, dem Hamiltonoperator \mathbf{H} , erzeugt wird.

⁸Es sollte darauf hingewiesen werden, dass das Weglassen höherer Ordnungen bei kleinem jedoch endlichem α die Unitarität verletzt, da $(\mathbf{1} + i\alpha\mathbf{A})(\mathbf{1} - i\alpha\mathbf{A}^\dagger) \neq \mathbf{1}$ ist. Dieses Problem kann z.B. in numerischen Iterationsverfahren zu Instabilitäten führen.

Basistransformationen

Spur

Die *Spur* eines Operators ist bekanntlich die Summe über die Diagonalelemente der Matrix, d.h. in einer orthonormierten Basis $\{|e_i\rangle\}$ gilt

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = \sum_i \langle e_i | \mathbf{A} | e_i \rangle = \sum_i A_{ii} \quad (2.79)$$

Die Spur ist eine lineare Abbildung vom Raum der Operatoren $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ nach \mathbb{C} :

$$\mathrm{Tr}(\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B}) = \alpha \mathrm{Tr}(\mathbf{A}) + \beta \mathrm{Tr}(\mathbf{B}) \quad (2.80)$$

Angewandt auf ein Produkt von Matrizen besteht die Wirkungsweise der Spur anschaulich darin, das Matrixprodukt zyklisch zu schließen, also ein 'kreisförmiges' Produkt zu bilden.

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{ABCDE}) = \sum_{ijklm} A_{ij} B_{jk} C_{kl} D_{lm} E_{mi}, \quad (2.81)$$

weshalb die Spur invariant unter zyklischen Permutationen der Faktoren ist:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{ABCD}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{DABC}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{CDAB}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{BCDA}). \quad (2.82)$$

Insbesondere wird auch eine Dyade durch die Spur zyklisch zusammengeklebt und wird damit zu einem Skalarprodukt:

$$\mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\psi\rangle. \quad (2.83)$$

Aus der zyklischen Vertauschbarkeit eines Produktes im Argument der Spur folgt sofort, dass die Spur invariant unter Ähnlichkeitstransformationen ist:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{SAS}^{-1}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{SA}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}) \quad (2.84)$$

Die Spur bildet also einen Operator auf ein Skalar ab, ist also unabhängig von der Wahl der Basis. Insbesondere ist die Spur einer hermiteschen Matrix stets die Summe der Eigenwerte

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = \sum_i \lambda_i \quad (2.85)$$

Bildet man das Adjungierte der Spur, so wird sie wie alle anderen Skalare auch komplex konjugiert:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}^\dagger) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A})^* \quad (2.86)$$

Interessant ist das Zusammenspiel von Spur und Exponentialabbildung. Für hermitesche Operatoren gilt nämlich

$$\det(e^{\mathbf{A}}) = e^{\mathrm{Tr}\mathbf{A}} \quad (2.87)$$

denn in der Eigenbasis des Operators ist die linke Seite das Produkt von e^{λ_i} .

Die Gruppen $U(n)$ und $SU(n)$

Da das Produkt unitärer Operatoren wiederum unitär ist, bilden die unitären Transformationen eine *Gruppe* bezüglich der Hintereinanderausführung. Diese Gruppe wird mit der Schreibweise $U(n)$ bezeichnet, wobei n die Dimension des betrachteten Vektorraums \mathbb{C}^n ist, auf dem diese Transformationen wirken. Die Gruppe $U(n)$ umfasst alle unitären Transformationen in n Dimensionen, während die *spezielle unitäre Gruppe* $SU(n)$ sich auf die unitären Transformationen mit Determinante $+1$ beschränkt, also eine Untergruppe von $U(n)$ ist. Man kann zeigen (hier ohne Beweis), dass sich jedes $\mathbf{U} \in U(n)$ als Exponentialfunktion $\mathbf{U} = \exp(i\mathbf{A})$ eines hermiteschen Operators \mathbf{A} darstellen lässt.

- **U(1):** Für $n = 1$ ist der Hilbertraum eindimensional, also darstellbar als eine komplexe Ebene. Die Transformationsmatrix \mathbf{U} ist hier ein Skalar U mit $UU^* = 1$, also ist $U = e^{-i\alpha}$ eine Zahl auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene. Die Gruppe $U(1)$ beschreibt damit Phasendrehungen in der komplexen Ebene und wird erzeugt durch einen einzigen Generator, nämlich 1 .
- **U(2):** Diese Gruppe umfasst alle unitären Transformationen auf \mathbb{C}^2 . Die Transformationsmatrix \mathbf{U} ist hier eine 2×2 -Matrix, welche die Bedingung $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}$ erfüllt. Da die Matrix stets als $\mathbf{U} = \exp(i\mathbf{A})$ darstellbar ist, wobei \mathbf{A} hermitesch ist, hat diese Gruppe vier Generatoren $\mathbf{1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. Diese Generatoren erfüllen die algebraischen Beziehungen

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbf{1} + i \epsilon_{jkl} \sigma_l, \quad (2.88)$$

deren bekannteste Darstellung die *Pauli*- sind:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.89)$$

Mit den Pauli-Matrizen lässt sich ein Gruppenelement der $U(2)$ schreiben als

$$\mathbf{U} = \exp\left(i\gamma \mathbf{1} + i\alpha_1 \sigma_1 + i\alpha_2 \sigma_2 + i\alpha_3 \sigma_3\right) \quad (2.90)$$

mit reellen Parametern $\gamma, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$. Eine andere etwas einfachere Parametrisierung der Gruppenelemente von $U(2)$ in Matrixform ist

$$\mathbf{U} = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

wobei $\gamma \in \mathbb{R}$ ist während a und b zwei komplexe Parameter sind, die durch die Bedingung $|a|^2 + |b|^2 = 1$ eingeschränkt sind. Diese Parameter werden als *Caley-Klein-Parameter* bezeichnet. Eine weitere Möglichkeit, auf die hier nicht eingegangen werden soll, ist die Parametrisierung durch Eulersche Winkel.

Ähnlich wie bei Drehungen im \mathbb{R}^3 sind die Gruppenelemente nicht kommutativ, d.h. die $U(2)$ ist im Gegensatz zur $U(1)$ eine nichtabelsche Gruppe.

- **SU(2):** Die $SU(2)$, die *spezielle unitäre Gruppe* in zwei komplexen Dimensionen, ist eine Untergruppe der $U(2)$, die alle unitären Abbildungen mit $\det(\mathbf{U}) = 1$ umfasst. Die Spur der Generatoren muss deshalb gleich Null sein, also besitzt die $SU(2)$ nur die drei spurlosen Generatoren $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, jedoch nicht den Phasendrehungsgenerator $\mathbf{1}$. Die $SU(2)$ wird uns im Zusammenhang mit dem Spin von Fermionen wieder begegnen.

- **SU(3):** Die Gruppe SU(3) kann analog konstruiert werden. Sie besitzt 8 spurlose Generatoren Λ_j , deren Standarddarstellung als Gell-Mann-Matrizen bekannt ist.

Bemerkung: Diese drei Gruppen spielen auch eine fundamentale Rolle in der Elementarteilchenphysik. Die $U(1)$ ist die Symmetriegruppe der Elektrodynamik, ihr Generator ist das Photon. Die $SU(2)$ ist die Symmetriegruppe des schwachen Isospin, ihre Generatoren – die drei Paulimatrizen – repräsentieren die Bosonen W^\pm und Z^0 . Die $SU(3)$ schließlich ist die Symmetriegruppe der Quantenchromodynamik und ihre acht Generatoren λ_i entsprechen den Gluonen, die die starke Wechselwirkung vermitteln.

Operatoralgebren

Physiker verstehen unter einer *Algebra* in etwa folgendes: Gegeben sei eine Menge von ‘Buchstaben’ $\{A, B, C, \dots\}$, also ein Alphabet, das endlich oder unendlich sein kann. Aus diesen Buchstaben lassen sich ‘Wörter’ bilden, z.B.

$$\mathbf{1}, A, B, AA, AB, BA, BB, AAA, AAB, ABA, ABB, \dots,$$

wobei die Identität $\mathbf{1}$ für ein leeres Wort steht. Ferner wird angenommen, dass die Wörter linear kombiniert werden können, also z.B. $\alpha AB + \beta BA$, wobei die Koeffizienten aus einem Skalkörper (meistens \mathbb{C}) kommen.

Neben der Vereinbarung eines Alphabets gehört zu einer Algebra ein Satz von Gleichungen, der den Raum der Wörter einschränkt.

Beispiel: Gegeben sei die Algebra mit zwei Buchstaben A, B und den Relationen $A^3 = A, B^2 = \mathbf{1}, AB = BA$. Wegen $AB = BA$ kann jedes Wort so umsortiert werden, dass es die Form $A^k B^\ell$ annimmt. Die Relation $A^3 = A$ führt auf $k \leq 2$ und $B^2 = \mathbf{1}$ auf $\ell \leq 1$. Der Wortraum dieser Algebra wird also aufgespannt von $\{\mathbf{1}, A, B, A^2, AB, A^2 B\}$.

In der Quantentheorie sind die Buchstaben Operatoren und die Wörter Produkte von Operatoren, während die einschränkenden Relationen in vielen Fällen die Vertauschungsregeln der Operatoren sind. Die verbleibenden Wörter können als Basiswörter eines linearen Raums aufgefasst werden. Wie wir anhand von Beispielen später sehen werden, wird es dadurch möglich, darstellungsfrei zu rechnen, also unabhängig vom gewählten Koordinatensystem.

2.2 Messungen, Observable und Unschärfe

2.2.1 Observable

Postulate der Quantentheorie

Mit dem nun zu Verfügung stehenden Formalismus können die Postulate der Quantentheorie folgendermassen formuliert werden:

- **Zustand:** Der Zustand eines maximal präparierten physikalischen Systems wird durch einen Vektor $|\psi\rangle$ eines Hilbertraums \mathcal{H} charakterisiert. Die Länge und die

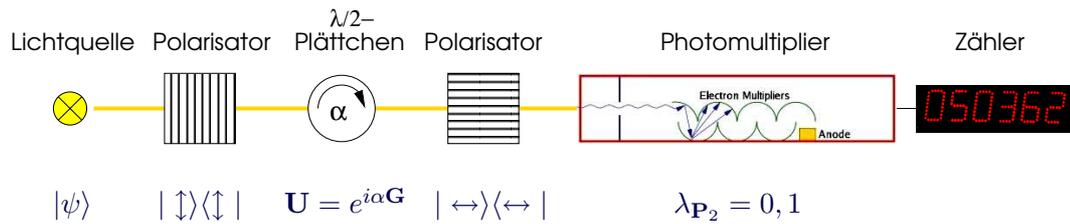


Abbildung 2.2: Schematische Realisierung und die entsprechende quantentheoretische Beschreibung eines Polarisationsexperimentes mit Photonen (siehe Text).

absolute Phase der Zustandsvektoren ist nicht festgelegt. Um eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation zu ermöglichen, werden sie jedoch so normiert, dass $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ ist.

- **Zeitentwicklung:** Sofern keine Messung stattfindet, entwickeln sich Zustandsvektoren zeitlich auf deterministische Weise durch eine vom Hamiltonoperator erzeugte unitäre Transformation, die in differentieller Form durch die (zeitabhängige) Schrödingergleichung gegeben sind.
- **Messgrößen:** Die messbaren Größen werden durch hermitesche Operatoren \mathbf{A} (sogenannte *Observablen*) beschrieben, wobei die möglichen Messergebnisse deren Eigenwerte λ_i sind.
- **Messprozess:** Bei einer Messung wird der Eigenwert λ_i mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle\phi_i|\psi\rangle|^2$ gemessen, wobei $|\phi_i\rangle$ der entsprechende normierte Eigenvektor von \mathbf{A} ist. Der statistische Mittelwert (Erwartungswert) ist durch $\langle\mathbf{A}\rangle = \langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle$ gegeben.
- **Zustandsreduktion:** Sofern sich das System nicht bereits in einem Eigenzustand von \mathbf{A} befand, wird es durch die Messung beeinflusst und befindet sich unmittelbar danach im Eigenzustand $|\phi_i\rangle$, der zu dem gemessenen Eigenwert gehört.

Experimentelle Umsetzung

Quantenmechanische Effekte lassen sich im Experiment besonders einfach an Photonen demonstrieren. Dabei ignoriert man alle Freiheitsgrade des Photons bis auf seine Polarisierungsrichtung und seine Phasenlage. Beide Größen werden durch einen zweidimensionalen komplexen Vektor senkrecht zur Ausbreitungsrichtung charakterisiert, der als Linearkombination zweier Basisvektoren, z.B. $|\uparrow\rangle$ für vertikale und $|\leftrightarrow\rangle$ für horizontale Polarisierung, dargestellt werden kann.

In Abb. 2.2 ist ein Beispiel eines solchen Experiments gezeigt. Eine Lichtquelle mit extrem geringer Intensität produziert einzelne Photonen unterschiedlicher Polarisierungsrichtung. Ein handelsüblicher Polaroidfilter lässt die Hälfte der Photonen durch; diese sind dann vertikal polarisiert. Damit befindet sich das Photon im Zustand $|\uparrow\rangle$, womit die Präparation des Zustands beendet ist.

Danach passiert das Photon ein einstellbares $\lambda/2$ -Plättchen, mit dem die Polarisations Ebene des Photons um einen beliebigen Winkel α gedreht werden kann. Diese Anordnung entspricht im quantentheoretischen Formalismus einer unitären Transformation \mathbf{U} erzeugt durch einen hermiteschen Operator \mathbf{G} , die in der Basis $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$ durch folgende

Matrix darstellt werden:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = e^{i\alpha\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (2.92)$$

Damit befindet sich das Photon im Zustand $U|\uparrow\rangle = \cos \alpha|\uparrow\rangle + \sin \alpha|\leftrightarrow\rangle$. Schließlich gelangt es zu einem zweiten Polaroidfilter, der horizontal ausgerichtet ist, und einem nachfolgenden Photomultiplier. In diesem Photomultiplier wird dann entweder eine elektronische Kaskade ausgelöst oder nicht, die makroskopisch sichtbare Antwort ist also 1 für ein detektiertes Photon und 0 für ein nicht detektiertes Photon. Der zweite Polaroidfilter und der Photomultiplier werden als Messgerät durch den Projektionsoperator $\mathbf{P} = |\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|$ repräsentiert.

Die Quantentheorie erlaubt es nun, die Wahrscheinlichkeit p_1 für eine Antwort ‘1’ zu berechnen:

$$p_1 = \langle\uparrow|\mathbf{U}^\dagger\mathbf{P}\mathbf{U}|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\mathbf{U}^\dagger|\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|\mathbf{U}|\uparrow\rangle = |\langle\leftrightarrow|\mathbf{U}|\uparrow\rangle|^2 = \sin^2 \alpha. \quad (2.93)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit den Resultaten der gewöhnlichen Wellenoptik überein.

Gleichzeitig messbare Observablen

In der klassischen Physik ist ein idealer Messprozess dadurch charakterisiert, dass er das physikalische System nicht beeinflusst. In der Quantenphysik dagegen sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- Wenn sich das System bereits in einem Eigenzustand des Messgeräts befindet, wird der entsprechende Eigenwert ausgegeben ohne das System zu beeinflussen. Ähnlich wie in der klassischen Physik liegt in diesem Fall das Messergebnis bereits vorher fest.
- Im allgemeinen Fall wird sich das System vor der Messung noch nicht in einem Eigenzustand befinden. In diesem Fall projiziert das Messgerät den Zustand $|\psi\rangle$ des Systems probabilistisch auf einen seiner Eigenzustände $|\phi_i\rangle$ und gibt den dazugehörigen Eigenwert λ_i als Messwert aus. Danach befindet sich das System in diesem Eigenzustand, so dass wiederholte Messung immer wieder das gleiche Ergebnis liefert.

Wir betrachten nun zwei verschiedene Messungen, repräsentiert durch zwei verschiedene Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} , und stellen die Frage, wann diese gleichzeitig messbar sind, sich also gegenseitig nicht stören. Dies bedeutet, dass nach Messung von \mathbf{A} und \mathbf{B} beide Messungen in beliebiger Reihenfolge wiederholt werden können und dabei immer wieder das jeweils gleiche Ergebnis angezeigt wird. Offenbar ist dies nur möglich, wenn bei Observablen gemeinsame Eigenzustände haben, also gemeinsam diagonalisierbar sind. Das ist genau dann der Fall, wenn beide Operatoren miteinander kommutieren:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} = 0. \quad (2.94)$$

Messungen vertauschbarer Observablen stören sich also gegenseitig nicht.

Beweis: Wir betrachten zunächst den Fall, dass das Spektrum von \mathbf{A} nicht entartet ist. Sei $|a\rangle$ ein Eigenvektor von \mathbf{A} mit $\mathbf{A}|a\rangle = \lambda_a \mathbf{A}|a\rangle$. Wegen der Vertauschbarkeit von \mathbf{A} und \mathbf{B} gilt:

$$\mathbf{A}\mathbf{B}|a\rangle = \mathbf{B}\mathbf{A}|a\rangle = \lambda_a \mathbf{B}|a\rangle, \quad (2.95)$$

also muss $\mathbf{B}|a\rangle$ ein Eigenvektor von \mathbf{A} zum Eigenwert λ_a sein. Dieser muss von $|a\rangle$ linear abhängig sein, also gilt $\mathbf{B}|a\rangle = \lambda_b |a\rangle$, wobei λ_b der Messwert der Observable \mathbf{B} ist.

Häufig hat man es mit Observablen zu tun, die redundant sind in dem Sinne, dass ihre Spektren entartet sind. Ist z.B. der Eigenwert λ_a n -fach entartet, so konstruiert man in dem von den Eigenvektoren aufgespannten n -dimensionalen Eigenraum eine orthogonale Basis aus Vektoren, die sowohl für \mathbf{A} als auch für \mathbf{B} Eigenvektoren sind.

Beispiel: Gegeben seien die beiden hermiteschen Matrizen

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}. \quad (2.96)$$

Man kann leicht überprüfen, dass diese Matrizen kommutieren, d.h. $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$. Das Spektrum von \mathbf{A} ist $\{2, 4, 4\}$. Der zweifach entartete Eigenwert entspricht einem zweidimensionalen Eigenraum, der von den Vektoren $(1, 1, 1)^T$ und $(0, 0, 1)^T$ aufgespannt wird. Das Spektrum von \mathbf{B} ist nicht entartet und besitzt zwei orthogonale Eigenvektoren $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)^T$ und $(0, 0, 1)^T$, die gleichzeitig Elemente des zweidimensionalen Eigenraums von \mathbf{A} sind. Man sagt, dass durch \mathbf{B} die Entartung von \mathbf{A} aufgehoben wird.

Entartungen einer Observable \mathbf{A} können also dadurch aufgehoben werden, dass man eine weitere Observable \mathbf{B} hinzunimmt, die mit \mathbf{A} kommutiert. Ist das gemeinsame Basissystem von \mathbf{A} und \mathbf{B} dann immer noch entartet, nimmt man eine weitere Observable \mathbf{C} hinzu, die sowohl mit \mathbf{A} als auch mit \mathbf{B} kommutiert. Diesen Vorgang setzt man so lange fort, bis alle Entartungen aufgehoben sind. Man erhält auf diese Weise einen *maximalen Satz kommutierender Observabler*, mit dem man die maximale Information über das System erhält. Die Eigenwerte werden dabei auch oft als sogenannte *Quantenzahlen* bezeichnet.

Eine gleichzeitige Messung solch eines maximalen Satzes kommutierender Observabler kann auch dazu benutzt werden, um ein System maximal zu *präparieren*. Nach der Messung befindet es sich nämlich in einem reinen Zustand mit bekannten Quantenzahlen, der durch einen wohldefinierten Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum repräsentiert wird.

Unschärfe

Wenn zwei Observable \mathbf{A} und \mathbf{B} nicht kommutieren, liefert bei unmittelbar aufeinanderfolgender Messung mindestens eines der beiden Messgeräte stochastisch verteilte Messwerte. Diese Unschärfe ΔA und ΔB der Messergebnisse hängt vom Zustand $|\psi\rangle$ ab.

Die *Unschärfe* einer Observable ist definiert als die Streuung der Messergebnisse um den Erwartungswert

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle}. \quad (2.97)$$

Mit der Schreibweise $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$ ist also

$$\Delta A^2 = \langle \tilde{\mathbf{A}}^2 \rangle. \quad (2.98)$$

Ausgangspunkt für eine Abschätzung des Produkts beider Unschärfen $\Delta A \Delta B$ ist die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung⁹

$$(\Delta A \Delta B)^2 = \langle \tilde{\mathbf{A}}^2 \rangle \langle \tilde{\mathbf{B}}^2 \rangle \geq |\langle \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}} \rangle|^2. \quad (2.99)$$

Das Produkt $\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}}$ wird zerlegt als

$$\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}} = \underbrace{\frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{A}})}_{\mathbf{C}_1} + \underbrace{\frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{B}} - \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{A}})}_{i\mathbf{C}_2} = \mathbf{C}_1 + i\mathbf{C}_2, \quad (2.100)$$

wobei \mathbf{C}_1 und \mathbf{C}_2 hermitesch sind. So gelangt man zu

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq |\langle \mathbf{C}_1 \rangle + i\langle \mathbf{C}_2 \rangle|^2 = |\langle \mathbf{C}_1 \rangle|^2 + |\langle \mathbf{C}_2 \rangle|^2 \geq |\langle \mathbf{C}_2 \rangle|^2 \quad (2.101)$$

und nach Wurzelziehen schließlich zur allgemeinen Unschärferelation¹⁰

$$\boxed{\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|.} \quad (2.102)$$

Zustände minimaler Unschärfe

Die Unschärferelation besagt, dass das Produkt $\Delta A \Delta B$ der Streuungen der Messergebnisse zweier nichtkommutierender Observable \mathbf{A} und \mathbf{B} einen Minimalwert nicht unterschreiten kann, dass also die von \mathbf{A} und \mathbf{B} gemessenen Eigenschaften nicht gleichzeitig bestimmt werden können. Dieser Minimalwert kann natürlich je nach Zustand auch überschritten werden.

Oft ist es von Interesse, einen Zustand zu finden, für den das Produkt der Unschärfen minimal wird. Dafür ist hinreichend, dass beide im vorherigen Abschnitt verwendeten Abschätzungen scharf, also mit einem Gleichheitszeichen erfüllt sind.

Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung $|\langle x|y \rangle|^2 \leq \|x\|^2 \|y\|^2$ ist immer dann scharf erfüllt, wenn die Vektoren $|x\rangle$ und $|y\rangle$ kollinear sind, weil dann der Cosinus des eingeschlossenen Winkels gleich 1 ist. Diese Bedingung führt auf die Gleichung

$$\tilde{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \mu \tilde{\mathbf{B}}|\psi\rangle \quad (2.103)$$

deren Lösungen $|\psi\rangle$ von dem Parameter $\mu \in \mathbb{C}$ abhängen. Für alle normierbaren Lösungen ist dann das Minimum von $|\langle \mathbf{C}_1 \rangle|^2 + |\langle \mathbf{C}_2 \rangle|^2$ in Gl. (2.101) zu bestimmen. Für die so bestimmten Zustandsvektoren ist dann das Produkt der Unschärfen $\Delta A \Delta B$ minimal. Im folgenden Abschnitt wird diese Vorgehensweise am Beispiel der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen demonstriert.

⁹Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung besagt, dass $|\langle x|y \rangle|^2 \leq \|x\|^2 \|y\|^2$ ist, dass also anschaulich der Cosinus des eingeschlossenen Winkels bei einem Skalarprodukt vom Betrage kleiner oder gleich 1 ist.

¹⁰Die zweite Abschätzung durch das Weglassen des Terms $|\langle \mathbf{C}_1 \rangle|^2$ führt zu einer eigentlich nicht notwendigen Abschwächung der Unschärferelation. In der Praxis wird allerdings die verschärfte Form $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \sqrt{|\langle \{\mathbf{A}, \mathbf{B}\} \rangle|^2 + |\langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|^2}$ selten verwendet, weil der erste Term unter der Wurzel in der Regel vom Zustand $|\psi\rangle$ abhängig ist, während der zweite Term häufig unabhängig vom betrachteten Zustand und damit von allgemeinerer Aussagekraft ist.

2.2.2 Heisenberg-Algebra

Definition der Heisenberg-Algebra

Die Heisenberg-Algebra in d Dimensionen besteht aus den hermiteschen Operatoren $\mathbf{1}, \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_d, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \dots, \mathbf{P}_d$ und einem Satz algebraischer Beziehungen, den sogenannten Heisenbergsche Vertauschungsrelationen:

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{X}_k] = [\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k] = 0, \quad j, k = 1 \dots d \quad (2.104)$$

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k] = i\hbar\delta_{jk} \mathbf{1}. \quad (2.105)$$

und reduziert sich im eindimensionalen Fall auf nur eine Relation

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \mathbf{1}. \quad (2.106)$$

Diese Algebra bestimmt vollständig die Quantenmechanik von Massepunkten. Physikalisch stehen die Vektoroperatoren $\vec{\mathbf{X}} = (\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_d)^T$ und $\vec{\mathbf{P}} = (\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_d)^T$ für Ort und Impuls des Teilchens. Der nichtverschwindende Kommutator von Ort und Impuls besagt, dass diese beiden Größen im Gegensatz zur klassischen Physik nicht gleichzeitig messbar ist.

Überraschend ist die perfekte Symmetrie von Ort und Impuls in der Heisenberg-Algebra. Wie wir noch sehen werden, sind Ort und Impuls in der Quantenmechanik in der Tat als gleichwertig anzusehen.

Die Heisenberg-Algebra für eindimensionale Systeme $d = 1$ kann interpretiert werden als ein linearer Raum über ‘Wörtern’ aus den ‘Buchstaben’ \mathbf{X} und \mathbf{P} eingeschränkt durch die Kommutatorrelation $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \mathbf{1}$. Diese Relation erlaubt es, die Buchstaben umzuordnen so dass der Raum durch Wörter der Form $\mathbf{X}^n \mathbf{P}^m$ aufgespannt wird. Da man aber immer noch unendlich viele Basiswörter hat, die Algebra also nicht schließt, wird man \mathbf{X} und \mathbf{P} nicht mit einfachen endlich-dimensionalen Matrizen darstellen können. Analoge Überlegungen gelten für den mehrdimensionalen Fall.

Mit Hilfe der allgemein gültigen Formel

$$[A, B^k] = \sum_{s=0}^{k-1} B^s [A, B] B^{k-s-1} \quad (2.107)$$

gelangt man durch Einsetzen des Kommutators (2.105) zur Gleichung

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k^m] = m i\hbar \mathbf{P}_k^{m-1} \delta_{jk} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_j} \mathbf{P}_k^m. \quad (2.108)$$

Die partielle Ableitung nach einem Operator bedeutet hier lediglich, dass der nachfolgende Ausdruck auf die gewohnte Weise formal nach dem Symbol \mathbf{P}_j partiell zu differenzieren ist. Die Anwendung des Ortsoperators auf eine Potenz des Impulsoperators in einem Kommutator wirkt also in gleicher Weise wie ein formales Differenzieren. Dies gilt insbesondere auch für Funktionen f des Impulsoperators, die sich als (konvergente) Potenzreihe darstellen lassen:

$$[\mathbf{X}_j, f(\vec{\mathbf{P}})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_j} f(\vec{\mathbf{P}}). \quad (2.109)$$

Entsprechendes gilt für Funktionen $f(\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}})$, die sich als gemischte Potenzreihen in den Komponenten von $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$ darstellen lassen, weil die Komponenten des Ortsoperators untereinander kommutieren:

$$[\mathbf{X}_j, f(\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_j} f(\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}}) \quad (2.110)$$

Wegen der $\vec{\mathbf{X}} \leftrightarrow \vec{\mathbf{P}}$ -Symmetrie der Heisenberg-Algebra gilt automatisch auch die Relation

$$[\mathbf{P}_j, f(\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}})] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_j} f(\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}}) \quad (2.111)$$

Heisenbergsche Unschärferelation

Durch Einsetzen der Kommutatorrelation (2.105) in die allgemeine Unschärferelation (2.102) erhält man direkt die berühmte von W. Heisenberg auf Helgoland gefundene Unschärferelation

$$\Delta X_j \Delta P_j \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.112)$$

Ort und Impuls sind also nicht gleichzeitig bestimmbar, sondern das Produkt der Unschärfen beider Messungen – von der Einheit her eine Wirkung – ist größer oder gleich $\hbar/2$. Insbesondere führt jeder Versuch, eine der beiden Größen exakt zu messen, zu einer unendlichen Unschärfe, d.h. aussagelosen Messung der jeweils anderen Größe. Die Unschärferelation impliziert dass Bahnkurven im Phasenraum – die Basiselemente der klassischen Mechanik – in der Quantenmechanik nicht existieren, sondern allenfalls als näherungsweise Konzept auf makroskopischer Skala brauchbar sind.

Darstellungsfreies Rechnen: Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Darstellungsfreie Rechenmethoden benutzen lediglich die vorgegebenen algebraischen Beziehungen, ohne Gebrauch von konkreten Darstellungen wie z.B. Wellenfunktionen oder Matrizen zu machen. Die Stärke solcher Rechenmethoden liegt darin, dass die Ergebnisse sofort auf alle Phänomene anwendbar sind, die auf der selben Algebra beruhen.

Ein wichtiges Beispiel ist dafür die Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren des eindimensionalen harmonischen Oszillators (vgl. Abschnitt 1.4.2). Die Aufgabe lautet, das Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (2.113)$$

für den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{X}^2 \quad (2.114)$$

zu lösen unter alleiniger Ausnutzung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar\mathbf{1}. \quad (2.115)$$

Zunächst machen wir das Problem dimensionslos, indem wir dimensionslose Operatoren definieren:

$$\hat{\mathbf{X}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \mathbf{X}, \quad \hat{\mathbf{P}} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \mathbf{P}, \quad (2.116)$$

die dann die Algebra

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i \quad (2.117)$$

erfüllen. Mit diesen Operatoren wird der Hamiltonoperator symmetrisch in $\hat{\mathbf{X}}$ und $\hat{\mathbf{P}}$:

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\mathbf{X}}^2 + \hat{\mathbf{P}}^2) \quad (2.118)$$

Bereits hier sehen wir, dass also $\hat{\mathbf{X}}$ und $\hat{\mathbf{P}}$ sowohl im Hamiltonian \mathbf{H} als auch in der Algebra (2.117) gleichberechtigt sind, dass also Symmetrien bezüglich der Vertauschung von Ort und Impuls zu erwarten sind.

Wir definieren nun die sogenannten *Leiteroperatoren*, nämlich den *Absteigeoperator* \mathbf{a} und den dazu hermitesch konjugierten *Aufsteigeoperator* \mathbf{a}^\dagger :

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathbf{X}} + i\hat{\mathbf{P}}), \quad \mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathbf{X}} - i\hat{\mathbf{P}}). \quad (2.119)$$

Die beiden Leiteroperatoren, die auch als Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren bezeichnet werden, sind nicht hermitesch. Ihre Algebra lautet:

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \frac{1}{2} \left(\underbrace{[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{X}}]}_{=0} - i \underbrace{[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}]}_{=i1} + i \underbrace{[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}]}_{=-i1} + \underbrace{[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}]}_{=0} \right) = \mathbf{1}. \quad (2.120)$$

Wegen

$$\hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger), \quad \hat{\mathbf{P}} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^\dagger) \quad (2.121)$$

ist

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \hbar\omega (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger) = \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.122)$$

Wir definieren nun den sogenannten *Anzahloperator*

$$\mathbf{N} := \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \quad (2.123)$$

so dass $\mathbf{H} = \hbar\omega(\mathbf{N} + \frac{1}{2})$ ist. Offenbar hat \mathbf{N} die gleichen Eigenvektoren wie \mathbf{H} , d.h.

$$\mathbf{N}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad (2.124)$$

wobei $E_n = \hbar\omega(\lambda_n + \frac{1}{2})$ ist. Der Anzahloperator \mathbf{N} ist hermitesch und erfüllt die algebraischen Relationen

$$[\mathbf{N}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}, \quad [\mathbf{N}, \mathbf{a}^\dagger] = +\mathbf{a}^\dagger. \quad (2.125)$$

Wendet man diese Vertauschungsrelationen auf einen *ket*-Eigenvektor an gelangt man zu

$$\mathbf{N}\mathbf{a}|\phi_n\rangle = (\lambda_n - 1)\mathbf{a}|\phi_n\rangle, \quad (2.126)$$

$$\mathbf{N}\mathbf{a}^\dagger|\phi_n\rangle = (\lambda_n + 1)\mathbf{a}^\dagger|\phi_n\rangle. \quad (2.127)$$

Ist also $|\phi_n\rangle$ ein Eigenvektor zum Eigenwert λ_n so sind auch $\mathbf{a}|\phi_n\rangle$ und $\mathbf{a}^\dagger|\phi_n\rangle$ Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_n \pm 1$. Durch Iteration erhält man eine *Leiter von Zuständen* mit äquidistanten Eigenwerten im Abstand 1. Die Operatoren \mathbf{a}^\dagger und \mathbf{a} steigen auf dieser Leiter herauf und herunter, was die Bezeichnung als Leiteroperatoren rechtfertigt.

Da die Eigenwerte λ_n bis auf Verschiebung den Energieeigenwerten entsprechen, die Energie eines harmonischen Oszillators aber positiv sein muss, kann ein solches Leiterkonzept

nur dann sinnvoll sein, wenn die Leiter eine erste Sprosse ohne Vorgänger besitzt.¹¹ Wenn man die erste Sprosse mit $|0\rangle$ bezeichnet, bedeutet dies, dass der Absteigeoperator angewandt auf diesen Zustand keinen Vorgängerzustand liefert, dass also

$$\mathbf{a}|0\rangle = 0 \quad (2.128)$$

ist. Solch ein Zustand, der von dem Absteiger \mathbf{a} auf Null abgebildet wird, wird als *Grundzustand*, Zustand *niedrigsten Gewichts* oder auch als *Vakuumzustand* bezeichnet. Wegen $\mathbf{N}|0\rangle = \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|0\rangle = 0$ ist sein Eigenwert $\lambda_0 = 0$. Die äquidistante Leiter der Eigenwerte fängt also bei Null an, folglich ist $\lambda_n = n$ und damit

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (2.129)$$

Auf diese Weise haben wir bereits ohne konkrete Kenntnis der Wellenfunktionen das Spektrum unter alleiniger Ausnutzung der Vertauschungsrelationen und mit Hilfe eines postulierten Grundzustands $|0\rangle$ bestimmen können.

Durch Anwendung des Aufsteigers \mathbf{a}^\dagger können alle Energieeigenzustände $|n\rangle$ des harmonischen Oszillators sukzessive durch $|n+1\rangle = c_n\mathbf{a}^\dagger|n\rangle$ konstruiert werden. Die Proportionalitätskonstante ist dabei durch die Normierungsbedingung $\langle n|n\rangle$ festgelegt. Man erhält

$$\mathbf{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (2.130)$$

$$\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (2.131)$$

Durch iterierte Anwendung von \mathbf{a}^\dagger auf $|0\rangle$ können die Eigenzustände sogar in geschlossener Form

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\mathbf{a}^\dagger\right)^n |0\rangle \quad (2.132)$$

angegeben werden, wobei die Normierung des Grundzustands $\langle 0|0\rangle = 1$ vorausgesetzt wird. Wir haben also die Struktur der Eigenvektoren darstellungsfrei bestimmt, ohne eine Differentialgleichung lösen zu müssen und sogar ohne hermitesche Polynome auszurechnen. Weil \mathbf{H} hermitesch ist, bildet dieses System von Eigenvektoren eine vollständige orthonormale Basis

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (2.133)$$

des Hilbertraums.

An dieser Stelle ist es interessant, die Schwankungsquadrate von $\hat{\mathbf{X}}$ und $\hat{\mathbf{P}}$ im n -ten Eigenzustand auszurechnen:

$$(\Delta\hat{X})^2 = \langle n|\hat{\mathbf{X}}^2|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger)^2|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|(\mathbf{a}\mathbf{a} + \mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}^\dagger)|n\rangle \quad (2.134)$$

Dabei liefern $\mathbf{a}\mathbf{a}$ und $\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}^\dagger$ wegen der Orthogonalität keinen Beitrag, während $\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger$ und $\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}$ die Erwartungswert $n+1$ und n beitragen. Insgesamt erhält man also $(\Delta\hat{X})^2 = n+1/2$. Aus Symmetriegründen gilt ebenso $(\Delta\hat{P})^2 = n+1/2$. Das Produkt beider Unschärfen ist

$$\Delta\hat{X}\Delta\hat{P} = n + \frac{1}{2} \quad \text{bzw.} \quad \Delta X\Delta P = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (2.135)$$

¹¹In den meisten Systemen wären nach unten unbegrenzte Energieleitern nicht sinnvoll, da sie thermodynamisch instabil sind, d.h. das System würde fortwährend wie ein *perpetuum mobile* bestrebt sein, seine Energie zu minimieren.

Wir stellen also fest, dass der Grundzustand des harmonischen Oszillators die Heisenbergsche Unschärferelation scharf erfüllt, da $\Delta X \Delta P = \hbar/2$ ist. Die Balance zwischen der räumlichen Lokalisierung und der Lokalisierung im Impulsraum wird dabei durch den Parameter ω des harmonischen Oszillators bestimmt.

Unitäre Transformationen, die von $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$ erzeugt werden.

Jeder hermitesche Operator erzeugt über die Exponentialabbildung eine unitäre Transformation, die als Transformation zwischen zwei orthonormierten Basen im Hilbertraum interpretiert werden kann. Wie wirken nun die von $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$ erzeugten Transformationen?

Wir betrachten zunächst den Generator \mathbf{P} und definieren die unitäre Transformation

$$\mathbf{U}_p(\vec{d}) := e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{d} \cdot \vec{\mathbf{P}}}, \quad (2.136)$$

in dessen Exponenten das gewöhnliche Skalarprodukt $\vec{d} \cdot \vec{\mathbf{P}} = \sum_{j=1}^3 d_j \mathbf{P}_j$ steht. Dabei ist $\vec{d} \in \mathbb{R}^3$ ein Parameter der unitären Abbildung. Offenbar kommutiert $\mathbf{U}_p(\vec{d})$ mit dem Impulsoperator $\vec{\mathbf{P}}$, die Transformation hat also keinen Einfluss auf den Impuls bzw. die Geschwindigkeit des Teilchens. Der Kommutator mit $\vec{\mathbf{X}}$ ist dagegen nichttrivial. Mit Gl. (2.110) erhält man

$$[\mathbf{X}_i, \mathbf{U}_p^\dagger] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i} \mathbf{U}_p^\dagger = -d_i \mathbf{U}_p^\dagger. \quad (2.137)$$

Wendet man auf diese Gleichung von links \mathbf{U}_p an, so erhält man

$$\mathbf{U}_p \vec{\mathbf{X}} \mathbf{U}_p^\dagger = \mathbf{X} - \vec{d} \mathbf{1}. \quad (2.138)$$

Auf der linken Seite steht nun der transformierte Ortsvektor und man erkennt, dass er sich von dem ursprünglichen Operator nur durch eine konstante Verschiebung um den Vektor \vec{d} unterscheidet.

Um die Wirkung von \mathbf{U}_p auf einen Ortseigenzustand zu bestimmen geht man aus von der Eigenwertgleichung

$$\vec{\mathbf{X}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle. \quad (2.139)$$

Durch das Einschleiben einer $\mathbf{1} = \mathbf{U}_p^\dagger \mathbf{U}_p$ und durch Anwendung von \mathbf{U}_p von links gelangt man zu

$$\mathbf{U}_p \vec{\mathbf{X}} \mathbf{U}_p^\dagger \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle = \vec{x} \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle \quad (2.140)$$

also $(\mathbf{X} - \vec{d} \mathbf{1}) \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle = \vec{x} \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle$. Bringt man schließlich den Verschiebungsanteil auf die rechte Seite, erhält man

$$\mathbf{X} \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle = (\vec{x} + \vec{d}) \mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle. \quad (2.141)$$

Folglich ist $\mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle$ ein Eigenvektor von \mathbf{X} zum Eigenwert $\vec{x} + \vec{d}$. Da \mathbf{U}_p unitär ist, ist $\mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle$ korrekt normiert und es gilt:

$$\boxed{\mathbf{U}_p |\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{d}\rangle}. \quad (2.142)$$

Der Operator $\mathbf{U}_p(\vec{d}) := e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{d} \cdot \vec{\mathbf{P}}}$ bewirkt also eine räumliche Verschiebung um den Verschiebungsvektor \vec{d} .

Auf analoge Weise kann man zeigen, dass die unitäre Transformation

$$\mathbf{U}_x(\vec{q}) := e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{\mathbf{X}}}, \quad (2.143)$$

eine Translation im Impulsraum

$$\boxed{\mathbf{U}_x|\vec{p}\rangle = |\vec{p} + \vec{q}\rangle}. \quad (2.144)$$

erzeugt.

Merke: Der Impulsoperator ist der Generator räumlicher Verschiebungen.

Der Ortsoperator ist der Generator von Verschiebungen im Impulsraum.

2.2.3 Darstellungen der Heisenberg-Algebra

Es gibt zahlreiche Möglichkeiten, die Heisenberg-Algebra (2.105) in konkreten Realisierungen darzustellen. Jeder hermitesche Operator stellt beispielsweise ein Basissystem von Eigenvektoren und damit einer Darstellung in dieser Basis bereit. So erhält man z.B. mit den Eigensystemen von $\vec{\mathbf{X}}$, $\vec{\mathbf{P}}$ und \mathbf{H} die Ortsraum-, Impulsraum-, und Energiedarstellung. Darüber hinaus gibt es zahlreiche andere unkonventionelle Darstellungen. Da die Heisenberg-Algebra nicht schließt, also Wörter mit beliebig hohen Potenzen zulässt, muss allerdings jede Darstellung der Heisenberg-Algebra unendlichdimensional sein.

Verschiedene Darstellungen mögen unterschiedlich schwierig zu handhaben sein. Der Heisenberg-Algebra und damit der ‘Physik an sich’ ist das aber egal, denn von dieser Perspektive aus sind alle Darstellungen gleichberechtigt – der physikalische Gehalt steckt einzig und allein in der Nichtkommutativität von $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$.

Ortsraumdarstellung

Die bekannteste Darstellung ist die *Ortsraumdarstellung* der Heisenberg-Algebra. Hier werden Zustände und Operatoren in den Eigenzuständen des Ortsoperators dargestellt.

Ein *Eigenzustand des Ortsoperators*

$$\vec{\mathbf{X}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle \quad (2.145)$$

beschreibt ein Teilchen, das am Ort \vec{x} lokalisiert ist. Da die Ortsunschärfe ΔX eines solchen Zustands gleich Null ist, folgt aus der Heisenbergschen Unschärferelation, dass der Impuls eines solchen Teilchens unbestimmt ist.

Weil $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ eine kontinuierliche Größe ist, kann ein Ortseigenzustand $|\vec{x}\rangle$ nicht durch $\langle \vec{x}|\vec{x}\rangle = 1$ normiert werden. Er liegt damit streng genommen nicht mehr im Hilbertraum der quadratintegrierbaren Wellenfunktionen. Wir können uns aber einen Ortseigenzustand als Limes eines immer stärker fokussierten Wellenpakets vorstellen. Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen ist solch ein Zustand ein *Häufungspunkt* am Rand des Hilbertraums, der aber nicht mehr zum Hilbertraum gehört, vergleichbar mit der Zahl 1, die nicht zum offenen Intervall $(0, 1)$ gehört. Die Hinzunahme von Vektoren wie den

Ortseigenfunktionen $|\vec{x}\rangle$ läuft mathematisch auf den *Abschluss* des Hilbertraums durch Hinzunahme der Randpunkte hinaus.¹²

Die im Grunde nicht normierbaren Eigenvektoren $|\vec{x}\rangle$ können trotzdem problemlos verwendet werden, wenn man die Orthonormalitätsbedingung

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.146)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \mathbf{1} \quad (2.147)$$

voraussetzt. Letztere sagt aus, dass die ‘Summe’ über alle dyadischen Operatoren $|\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|$ den gesamten Hilbertraum aufspannt.¹³ Mit diesen beiden Rechenregeln definiert man für einen gegebenen Vektor $|\psi\rangle$ die Wellenfunktion im Ortsraum

$$\psi(\vec{x}) := \langle \vec{x} | \psi \rangle. \quad (2.148)$$

Bei einer gegebenen Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ kann umgekehrt der Zustandsvektor durch

$$|\psi\rangle = \mathbf{1} |\psi\rangle = \left(\int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right) |\psi\rangle = \int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int d^3x \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \quad (2.149)$$

rekonstruiert werden. Für das Skalarprodukt erhält man

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \mathbf{1} | \psi_2 \rangle = \int d^3x \langle \psi_1 | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi_2 \rangle = \int d^3x \psi_1^*(\vec{x}) \psi_2(\vec{x}) \quad (2.150)$$

in Übereinstimmung mit der weiter oben benutzten Definition.

Die absolute Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Punkt \vec{x} zu finden, ist gleich Null, da ein Punkt keine Ausdehnung hat. Die Kontinuumsbeschreibung erfordert deshalb die Definition einer Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2 \quad (2.151)$$

In der Tat ist

$$\int d^3x \rho(\vec{x}) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = \int d^3x \langle \psi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{1} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (2.152)$$

Die Matrixelemente des Ortsoperators in der Ortsdarstellung sind

$$\langle \vec{x} | \vec{X} | \vec{x}' \rangle = \vec{x}' \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \vec{x}' \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.153)$$

d.h. der Ortsoperator ist in der Ortsraumdarstellung diagonal. Seine Wirkungsweise auf einen Zustand besteht darin, die Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ mit \vec{x} zu multiplizieren:

$$\langle \vec{x} | \vec{X} | \psi \rangle = \vec{x} \langle \vec{x} | \psi \rangle = \vec{x} \psi(\vec{x}). \quad (2.154)$$

¹²Die etwas unnatürliche Notwendigkeit, den Hilbertraum abschließen zu müssen, mag ein Hinweis darauf sein, dass Raum und Zeit in Wirklichkeit nicht kontinuierlich sind, sondern auf einer sehr kleinen Längenskala in einem noch nicht bekannten Sinne diskret werden. Man vermutet, dass dies bei der sogenannten Planck-Länge (ca. $10^{-35}m$) geschieht.

¹³Zu beachten ist, dass die Dyade $|\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|$ zwar auf den Ortseigenzustand projiziert, jedoch nicht wie ein gewöhnlicher Projektionsoperator die Relation $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ erfüllt.

Die Matrixelemente des Impulsoperators in der Ortsdarstellung lassen sich wie folgt berechnen. Einerseits ist

$$\langle \vec{x} | [\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k] | \vec{x}' \rangle = \langle \vec{x} | \mathbf{X}_j \mathbf{P}_k | \vec{x}' \rangle - \langle \vec{x} | \mathbf{P}_k \mathbf{X}_j | \vec{x}' \rangle = (x_j - x'_j) \langle \vec{x} | \mathbf{P}_k | \vec{x}' \rangle, \quad (2.155)$$

andererseits folgt aus der Heisenberg-Algebra

$$\langle \vec{x} | [\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k] | \vec{x}' \rangle = i\hbar \delta_{j,k} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (2.156)$$

Durch Gleichsetzen gelangt man zu

$$\langle \vec{x} | \mathbf{P}_k | \vec{x}' \rangle = \frac{i\hbar \delta_{j,k} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')}{(x_k - x'_k)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_k} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.157)$$

also

$$\langle \vec{x} | \vec{\mathbf{P}} | \vec{x}' \rangle = i\hbar \nabla_{x'} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (2.158)$$

Die Wirkungsweise auf eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ ist also

$$\langle \vec{x} | \vec{\mathbf{P}} | \psi \rangle = \int d^3x' \langle \vec{x} | \vec{\mathbf{P}} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \psi \rangle = i\hbar \int d^3x' \left(\nabla_{x'} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \right) \psi(\vec{x}'). \quad (2.159)$$

Dieses Integral wird partiell integriert, wobei man annimmt, dass die Randterme im Unendlichen verschwinden:

$$\langle \vec{x} | \vec{\mathbf{P}} | \psi \rangle = -i\hbar \int d^3x' \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \nabla_{x'} \psi(\vec{x}') = -i\hbar \nabla_x \psi(\vec{x}). \quad (2.160)$$

Wir gelangen also schliesslich zur Ortsraumdarstellung der Heisenberg-Algebra von $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$ auf dem Raum der quadratintegriblen Funktionen:

$$\boxed{\vec{\mathbf{X}}\psi(\vec{x}) = \vec{x}\psi(\vec{x}), \quad \vec{\mathbf{P}}\psi(\vec{x}) = -i\hbar \nabla_x \psi(\vec{x})}. \quad (2.161)$$

Man kann leicht überprüfen, dass die Operatoren in dieser Darstellung die Heisenberg-Algebra

$$[x_j, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}] \psi(\vec{x}) = i\hbar \delta_{j,k} \psi(\vec{x}) \quad (2.162)$$

tatsächlich erfüllen. Die Ortsraumdarstellung im Raum der Wellenfunktionen ist Grundlage für das zuvor diskutierte Bohrsche Korrespondenzprinzip. In der Tat ist die Bohrsche Ersetzungsregel $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla_x$ nichts anderes als ein formaler Trick, die Nichtkommutativität von Ort und Impuls in die klassischen Gleichungen hineinzubringen.

Die Schrödingergleichung $\mathbf{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ mit dem Hamiltonoperator eines Teilchens in einem Potential $\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{X}})$ wird in dieser Darstellung zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + V(\vec{x}) \right) \phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}). \quad (2.163)$$

Impulsraumdarstellung

Wegen der Symmetrie zwischen Orts- und Impulsoperator in der Heisenberg-Algebra existiert eine ebenso legitime *Impulsraumdarstellung*, die analog zur Ortsraumdarstellung hergeleitet werden kann. Ausgangspunkt sind hier die *Eigenzustände des Impulsoperators*

$$\vec{\mathbf{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle, \quad (2.164)$$

die ein delokalisiertes Teilchen mit scharfem Impuls beschreiben. Auch die Impulseigenzustände sind nicht auf gewöhnliche Weise normierbar, können aber problemlos verwendet werden, wenn man die Orthonormalitätsbedingung

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') \quad (2.165)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \mathbf{1} \quad (2.166)$$

anwendet. Auf diese Weise definiert man für jeden Zustand $|\psi\rangle$ die entsprechende Wellenfunktion im Impulsraum

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) := \langle \vec{p} | \psi \rangle \quad |\psi\rangle = \int d^3p \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \quad (2.167)$$

die wir hier durch eine Schlange zusätzlich kennzeichnen wollen. Das Skalarprodukt hat die Form

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int d^3p \tilde{\psi}_1^*(\vec{p}) \tilde{\psi}_2(\vec{p}). \quad (2.168)$$

In Analogie zur Ortsdarstellung kann man eine Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\tilde{\rho}(\vec{p}) = |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2 \quad (2.169)$$

für die Impulsmessung definieren.

Die Matrixelemente von Orts- und Impulsoperator sind

$$\langle \vec{p} | \vec{\mathbf{P}} | \vec{p}' \rangle = \vec{p} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}'). \quad (2.170)$$

$$\langle \vec{p} | \mathbf{X} | \vec{p}' \rangle = -i\hbar \nabla_p \delta^3(\vec{p} - \vec{p}'), \quad (2.171)$$

und wirken auf Wellenfunktionen $\tilde{\psi}(\vec{p})$ durch

$$\boxed{\mathbf{P}\tilde{\psi}(\vec{p}) = \vec{p}\tilde{\psi}(\vec{p}), \quad \mathbf{X}\tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar\nabla_p\tilde{\psi}(\vec{p})}. \quad (2.172)$$

wobei $\nabla_p = (\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \frac{\partial}{\partial p_3})$ ist. Man kann leicht überprüfen, dass die so definierten Operatoren ebenfalls die Heisenberg-Algebra erfüllen:

$$[i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}, p_k]\tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar\delta_{j,k}\tilde{\psi}(\vec{p}) \quad (2.173)$$

Die Schrödingergleichung $\mathbf{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ lässt sich nun schreiben als

$$\left(-\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(i\hbar\nabla_p)\right)\tilde{\phi}(\vec{p}) = E\tilde{\phi}(\vec{p}). \quad (2.174)$$

Vom mathematischen Standpunkt sind beide Darstellungen gleichberechtigt und lassen die Frage offen, warum wir uns in der Alltagswelt im Ortsraum und nicht im Impulsraum bewegen.

Transformation zwischen Orts- und Impulsraumdarstellung

Von der Orts- zur Impulsraumdarstellung und zurück gelangt man im Hilbertraum durch eine *Basistransformation*

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \mathbf{1} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \tilde{\psi}(\vec{p}), \quad (2.175)$$

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \langle \vec{p} | \mathbf{1} | \psi \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \psi(\vec{x}). \quad (2.176)$$

Um die ‘Matrixelemente’ $\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle^*$ dieser Transformation zu berechnen, betrachten wir den Ausdruck $\langle \vec{p} | \mathbf{X} | \vec{x} \rangle$. Lässt man einerseits den Operator nach rechts wirken, erhält man

$$\langle \vec{p} | \mathbf{X} | \vec{x} \rangle = \vec{x} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle. \quad (2.177)$$

Lässt man ihn andererseits nach links wirken, erhält man wegen (2.172) die Beziehung

$$\langle \vec{p} | \mathbf{X} | \vec{x} \rangle = i\hbar \nabla_p \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \quad (2.178)$$

und gelangt so zu

$$i\hbar \nabla_p \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = \vec{x} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle. \quad (2.179)$$

Fasst man nun $\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle$ als eine Funktion von \vec{p} für vorgegebenes \vec{x} auf, hat diese Gleichung die Form einer Differentialgleichung erster Ordnung mit der allgemeinen Lösung

$$\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = A e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}. \quad (2.180)$$

Die Integrationskonstante ergibt sich dabei aus der Normierung

$$1 = \int d^3x' \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \int d^3x' \langle \vec{x} | \mathbf{1} | \vec{x}' \rangle = \int d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \quad (2.181)$$

$$= |A|^2 \int d^3p e^{-i\hbar \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} = (2\pi)^3 |A|^2 \int d^3x' \delta^3(\hbar(\vec{x} - \vec{x}')) \quad (2.182)$$

$$= |A|^2 (2\pi\hbar)^3. \quad (2.183)$$

und ist bis auf eine Phase bestimmt. Mit $A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$ erhält man schließlich die Transformationsgesetze

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}), \quad (2.184)$$

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}). \quad (2.185)$$

Die Transformation zwischen Orts- und Impulsraum ist also eine gewöhnliche Fourier-Transformation.

Energiedarstellung

Eine weitere mögliche Darstellung ist die *Energiedarstellung*, in der nach Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators entwickelt wird. Dabei ist es unerheblich, ob das betrachtete System selbst ein harmonischer Oszillator ist, denn jede Wellenfunktion und jeder

Operator kann in der vollständigen Basis der Eigenfunktionen $|n\rangle$ dargestellt werden. Da diese Basis abzählbar ist, kann man $\vec{\mathbf{X}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$ als unendlichdimensionale Matrizen darstellen, wie man am Beispiel des eindimensionalen harmonischen Oszillators leicht demonstrieren kann. Wegen

$$\langle m|\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad \text{und} \quad \langle m|\mathbf{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (2.186)$$

und

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger) \quad \text{und} \quad \mathbf{P} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\mathbf{a} - \mathbf{a}^\dagger) \quad (2.187)$$

ist nämlich

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & & & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & & \\ & & & \dots & \dots & \dots & \\ & & & & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.188)$$

und

$$\mathbf{P} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & & & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & & & \\ & & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & & \\ & & & \dots & \dots & \dots & \\ & & & & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.189)$$

Da bei beiden Operatoren die Diagonalelemente verschwinden, müssen die Erwartungswerte gleich Null sein:

$$\langle \mathbf{X} \rangle = \langle \mathbf{P} \rangle = 0. \quad (2.190)$$

Dieses Resultat ist überraschend, denn es widerspricht der Translationsinvarianz von Ort und Impuls, weil $\vec{x} = 0$ und \vec{p} ausgezeichnet werden. Offenbar können mit der Energiedarstellung nicht alle Zustände geeignet repräsentiert werden.

Weyl-Darstellung und Moyal-Sternprodukte ***

(Zusätzlicher Abschnitt für Interessierte, Entwurfsversion)

Eine weitere Darstellung, die über den Rahmen dieser Vorlesung hinausgeht, ist die sogenannte Weyl-Darstellung mit Hilfe von *Moyal-Sternprodukten*. Die Weyl-Abbildung ordnet jedem Operator $\mathbf{F} \in \mathcal{H}$ eine gewöhnliche Funktion $f(\vec{x}, \vec{p})$ auf dem klassischen Phasenraum zu:

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{2}{\hbar} \int d^3x' e^{\frac{2i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}'} \langle \vec{x} - \vec{x}' | \mathbf{F} | \vec{x} + \vec{x}' \rangle \quad (2.191)$$

Die Umkehrung dieser Abbildung lautet:

$$\mathbf{F} = \int d^3x \int d^3p f(\vec{x}, \vec{p}) e^{i(x\mathbf{X}+p\mathbf{P})} \quad (2.192)$$

Insbesondere wird der Einheitsoperator $\mathbf{1}$ auf die Zahl 1 abgebildet, während der Ortsoperator $\vec{\mathbf{X}}$ und der Impulsoperator $\vec{\mathbf{P}}$ auf die Funktionen \vec{x} und \vec{p} abgebildet werden.

Nun zeigt es sich, dass ein Produkt zweier Operatoren **FG** durch diese Abbildung nicht, wie man naiv vermuten würde, in ein gewöhnliches Produkt $f(\vec{x}, \vec{p})g(\vec{x}, \vec{p})$ übergeht, denn solch ein Produkt wäre zwangsläufig kommutativ und würde die Heisenberg-Algebra nicht erfüllen. Vielmehr muss das normale Produkt auf geeignete Weise modifiziert werden. Man erhält dabei das sogenannte Moyal-Sternprodukt, das auf formal elegante Weise mit der Poissonklammer verknüpft ist. Die Rechenregel besteht darin, dass jede 'normale' Multiplikation durch eine *-Multiplikation zu ersetzen ist. Der *-Operator ist dabei definiert als

$$* = \exp\left(\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p) - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x\right) \quad (2.193)$$

oder kurz $* = e^{\frac{i\hbar}{2}\{\cdot, \cdot\}_{\text{PB}}}$, wobei $\{\cdot, \cdot\}_{\text{PB}}$ die Poissonklammer bezeichnet. Die Pfeile über den partiellen Ableitungen deuten dabei an, ob diese nach links oder nach rechts wirken. In voller Länge ausgeschrieben ist das Sternprodukt durch

$$f * g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \left(\frac{\partial^k}{\partial p^k} \frac{\partial^{n-k}}{\partial x^{n-k}} f(\vec{x}, \vec{p})\right) \times \left(\frac{\partial^{n-k}}{\partial p^{n-k}} \frac{\partial^k}{\partial x^k} g(\vec{x}, \vec{p})\right) \quad (2.194)$$

gegeben. Man kann durch Nachrechnen überprüfen, dass das Sternprodukt wegen

$$x_j * p_k - p_k * x_j = i\hbar \delta_{i,j} \quad (2.195)$$

tatsächlich eine Darstellung der Heisenberg-Algebra ist.

2.2.4 Dynamik

Die im vorherigen Abschnitt diskutierte Heisenberg-Algebra macht eine Aussage über Orts- und Impulsmessungen. Das Konzept der Zeit wurde bislang noch nicht eingeführt.

Aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass Energie und Zeit genau wie Ort und Impuls in enger Beziehung stehen. Es wäre also konsequent, ebenfalls die Zeit als hermiteschen Operator **T** einzuführen und eine geeignete Vertauschungsrelation $[\mathbf{T}, \mathbf{H}] = \dots$ zu postulieren, woraus sich eine Energie-Zeit-Unschärferelation ergäbe. Während dieses Vorgehen in der relativistischen Quantentheorie korrekt ist, führt es aber im Rahmen der nichtrelativistischen Physik zu Widersprüchen. Die absolute Zeit als ein für alle Objekte gleichermaßen verbindlicher Parameter in der nichtrelativistischen Physik erzwingt vielmehr, dass auch in der nichtrelativistischen Quantentheorie die Zeit als ein globaler Parameter beibehalten wird. Diese unzufriedenstellende Asymmetrie der Beschreibung reflektiert jedoch lediglich, dass nichtrelativistische Theorien im Grunde falsch sind.

Es gibt auch in der nichtrelativistischen Quantentheorie eine Unschärferelation zwischen Energie und Zeit in der Form

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (2.196)$$

die jedoch nicht exakt ist. Sie ist eher qualitativ zu interpretieren in dem Sinne, dass eine Energiemessung mit der Genauigkeit ΔE mindestens eine Zeit $\Delta t = \Delta E/\hbar$ benötigt. Ebenso ist die Energie von gebundenen Zuständen mit kurzer Lebensdauer unscharf.

Zeitentwicklungsoperator

Im Zusammenhang mit der Heisenberg-Algebra haben wir gesehen, dass die Eigenschaft von $\vec{\mathbf{P}}$ bzw. $\vec{\mathbf{X}}$ als Generatoren von Translationen in Raum und Zeit einzig und allein aus den Vertauschungsrelationen folgt. Eine entsprechende Vertauschungsrelation für Energie und Zeit fehlt allerdings in der nichtrelativistischen Quantentheorie, da kein Zeitoperator, sondern lediglich ein reeller Zeitparameter existiert¹⁴. Die Struktur der Hamiltonschen Gleichungen aus der klassischen Physik legen aber nahe, dass die Energieoperator, der sogenannte *Hamiltonoperator* oder kurz *Hamiltonian*, Generator zeitlicher Translationen ist.

Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren \mathbf{H} definieren wir einen unitäre Operator

$$\mathbf{U}_{t,t_0} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}}, \quad (2.197)$$

die als *Zeitentwicklungsoperator* bezeichnet wird. Der Zeitentwicklungsoperator ‘verschiebt’ das System in Zeitrichtung von t_0 nach t . Offenbar ist

$$\mathbf{U}_{t,t} = \mathbf{1} \quad (2.198)$$

und

$$\mathbf{U}_{t_2,t_0} = \mathbf{U}_{t_2,t_1} \mathbf{U}_{t_1,t_0}, \quad (2.199)$$

man kann also Zeitentwicklungsoperatoren abschnittsweise hintereinanderschalten, wobei das Produkt wie immer von rechts nach links zu lesen ist, d.h. zuerst findet eine Verschiebung $t_0 \rightarrow t_1$ statt, danach eine Verschiebung $t_1 \rightarrow t_2$.

In vielen Fällen ist der Hamiltonoperator zeitanhängig. In diesem Fall ist der Zeitentwicklungsoperator durch den Ausdruck

$$\mathbf{U}_{t,t_0} = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \mathbf{H}(t)}, \quad (2.200)$$

gegeben. Partielles Differenzieren nach t führt sofort auf die Bewegungsgleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_{t,t_0} = \mathbf{H}(t) \mathbf{U}_{t,t_0}} \quad (2.201)$$

mit der ‘Anfangsbedingung’ $\mathbf{U}_{t_0,t_0} = \mathbf{1}$. Durch formales Integrieren auf beiden Seiten gelangt man ebenso zu einer Integralgleichung

$$\mathbf{U}_{t,t_0} = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathbf{H}(t') \mathbf{U}(t', t_0). \quad (2.202)$$

Wie wirkt nun der Zeitentwicklungsoperator auf Observable und Zustände? Um diese Frage zu beantworten, betrachten wir nun ein System, dass sich zum Zeitpunkt t_0 im

¹⁴Gäbe es einen Zeitoperator \mathbf{T} , so müsste dieser mit \mathbf{H} die Vertauschungsrelation $[\mathbf{T}, \mathbf{H}] = i\hbar \mathbf{1}$ erfüllen. Damit wären aber \mathbf{T} und \mathbf{H} gleichberechtigt und hätten vor allem das gleiche Spektrum, nämlich alle reellen Zahlen. Während negative Zeiten kein Problem sind, sind nach unten unbeschränkte Energien thermodynamisch instabil. In einer relativistischen Theorie sind dagegen negative Energien erlaubt (Antimaterie, Dirac-See) und damit ist die Definition eines Zeitoperators möglich.

Zustand $|\psi_{t_0}\rangle$ befindet. Dieser Zustand entwickelt sich zeitlich durch $|\psi_t\rangle = \mathbf{U}_{t,t_0}|\psi_{t_0}\rangle$, so dass sich der Erwartungswert einer Observable \mathbf{A} ändert:

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) = \langle \psi_{t_0} | \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}_{t,t_0} | \psi_{t_0} \rangle \quad (2.203)$$

Die linke Seite dieser Gleichung ist physikalisch messbar. Die rechte Seite dagegen lässt mehrere Interpretationen zu. Man kann nämlich einerseits die rechte Seite als Erwartungswert des zeitunabhängigen Operators \mathbf{A} zwischen zwei zeitabhängigen Vektoren $\langle \psi_t | \dots | \psi_t \rangle$ interpretieren. Diese Interpretation ist als *Schrödinger-Bild* bekannt. Andererseits kann man ebenso gut die rechte Seite als Erwartungswert einer zeitabhängigen Observable $\mathbf{A}(t) = \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}_{t,t_0}$ zwischen zwei zeitunabhängigen Vektoren interpretieren. Dies ist das sogenannte *Heisenberg-Bild*. Die Zeitabhängigkeit kann auch auf beide Seiten, also sowohl auf den Zustandsvektor als auch auf die Observable, verteilt werden. Ein Beispiel dafür ist das sogenannte Wechselwirkungsbild. Im Folgenden werden diese drei Interpretationsmöglichkeiten im Detail diskutiert.

Schrödinger-Bild

Das *Schrödinger-Bild* ist die Standard-Interpretation der Zeitabhängigkeit in der nicht-relativistischen Quantentheorie. Im Schrödingerbild sind die Zustände zeitabhängig, während die Operatoren konstant sind. Wendet man Gl. (2.201) auf einen Anfangszustand $|\psi_{t_0}\rangle$ an und definiert den zeitabhängigen Zustand als $|\psi_t\rangle := \mathbf{U}_{t,t_0}|\psi_{t_0}\rangle$, so erhält man die *zeitabhängige Schrödingergleichung* (siehe Gl. (1.26) im Abschnitt 1.2.2) für einen im Allgemeinen zeitabhängigen Hamiltonoperator:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \mathbf{H}(t) |\psi_t\rangle} \quad (2.204)$$

Die Observablen sind dagegen konstant und die *Erwartungswerte* für Messungen sind durch

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) = \langle \psi_t | \mathbf{A} | \psi_t \rangle \quad (2.205)$$

gegeben. Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig, so besitzt er als hermitescher Operator ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren

$$\mathbf{H}|\phi_n\rangle = E_n \phi_n. \quad (2.206)$$

Die entsprechenden sich zeitlich entwickelnden Zustände haben eine triviale Zeitabhängigkeit in Form einer komplexen Phase

$$|\phi_{n,t}\rangle = \mathbf{U}_{t,t_0}|\phi_n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |\phi_n\rangle, \quad (2.207)$$

die sich bei der Bildung von Erwartungswerten einer nicht explizit zeitabhängigen Observable heraushebt. Aus diesem Grund werden die Zustände $|\phi_{n,t}\rangle$ als *stationäre Zustände* bezeichnet.

Die Diagonalisierung des Hamiltonoperators, also die Bestimmung aller seiner Eigenwerte E_n und Eigenvektoren $|\phi_n\rangle$ erlaubt es, die zeitabhängige Wellenfunktion $|\psi_t\rangle$ für jeden

beliebigen Anfangszustand $|\psi_{t_0}\rangle$ hinzuschreiben. Dazu entwickelt man den Anfangszustand in den Eigenfunktionen $|\psi_{t_0}\rangle = \sum_m c_m |\phi_m\rangle$ mit Koeffizienten $c_m \in \mathbb{C}$ und erhält

$$\begin{aligned} |\psi_t\rangle &= \underbrace{\sum_n |\phi_{n,t}\rangle \langle \phi_{n,t}|}_{=1} |\psi_t\rangle = \sum_n \mathbf{U}_{t,t_0} |\phi_n\rangle \underbrace{\langle \phi_n | \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{U}_{t,t_0}}_{=1} |\psi_{t_0}\rangle \\ &= \sum_n \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |\phi_n\rangle c_m \underbrace{\langle \phi_n | \phi_m\rangle}_{=\delta_{n,m}} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} c_n |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad (2.208)$$

Heisenberg-Bild

Im *Heisenberg-Bild* sind umgekehrt die Zustände konstant, während die Zeitabhängigkeit auf den Operatoren liegt. Nach Formel (2.203) ist dann

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi | \mathbf{A}_t | \psi \rangle \quad (2.209)$$

wobei der Zustandsvektor $|\psi\rangle \equiv |\psi_{t_0}\rangle$ zeitunabhängig ist und der hermitesche Operator

$$\mathbf{A}_t = \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{U}_{t,t_0}. \quad (2.210)$$

einer unitären Zeitentwicklung unterliegt. Die differentielle Bewegungsgleichung für \mathbf{A}_t kann abgeleitet aus Gl. (2.201) und der dazu adjungierten Gleichung:

$$i\hbar \partial_t \mathbf{U}_{t,t_0} = \mathbf{H} \mathbf{U}_{t,t_0}, \quad -i\hbar \partial_t \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger = \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{H}, \quad (2.211)$$

wobei angenommen wurde, dass der Hamiltonoperator \mathbf{H} nicht explizit von der Zeit abhängt. Man erhält:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{A}_t = (\partial_t \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger) \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} + \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A}_{t_0} (\partial_t \mathbf{U}_{t,t_0}) \quad (2.212)$$

$$= -\mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} + \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{H} \mathbf{U}_{t,t_0} \quad (2.213)$$

$$= -\mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_{t,t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} + \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{A}_{t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} \mathbf{U}_{t,t_0} \mathbf{H} \mathbf{U}_{t,t_0}$$

$$= -\mathbf{H}_t \mathbf{A}_t + \mathbf{A}_t \mathbf{H}_t = [\mathbf{A}_t, \mathbf{H}_t],$$

wobei $\mathbf{H}_t = \mathbf{U}_{t,t_0}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_{t,t_0}$ ist. Diese Zeitentwicklungsgleichung gilt für jeden hermiteschen Operator \mathbf{A}_t , also insbesondere auch für den Hamiltonian selbst:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{H}_t = [\mathbf{H}_t, \mathbf{H}_t] = 0. \quad (2.214)$$

Folglich ist der Hamiltonoperator (und auch alle anderen Operatoren, die mit ihm vertauschen) zeitunabhängig, d.h. $\mathbf{H}_t \equiv \mathbf{H}$. Man gelangt so zu der *Heisenbergschen Bewegungsgleichung*

$$\boxed{\frac{d}{dt} \mathbf{A}_t = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{A}_t]}. \quad (2.215)$$

Für Observable \mathbf{A} mit einer expliziten Zeitabhängigkeit muss man diese Gleichung auf der rechten Seite um einer partielle Zeitableitung ergänzen:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{A}_t = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{A}_t] + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}_t. \quad (2.216)$$

Observablen, die mit \mathbf{H} kommutieren, für die also $[\mathbf{A}_t, H] = 0$ ist, heißen *stationäre Observable* bzw. *Erhaltungsgrößen*. Insbesondere sind die aus den Eigenvektoren von \mathbf{H} gebildeten Dyaden $|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ stationäre Observable. Im Gegensatz zum Schrödingerbild, in dem die stationären Zustände eine triviale Zeitabhängigkeit in Form einer rotierenden komplexen Phase haben, treten solche Phasenfaktoren bei stationären Operatoren im Heisenberg-Bild nicht auf.

Wechselwirkungsbild

Das *Wechselwirkungsbild* manchmal auch Dirac-Bild genannt ist eine Mischform, die zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild angesiedelt ist. Sie eignet sich für Systeme, deren Hamiltonoperator aus zwei Anteilen

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1 \quad (2.217)$$

besteht. Diese Situation besteht oft bei Systemen mit einer Wechselwirkung: \mathbf{H}_0 beschreibt dabei das wechselwirkungsfreie System während \mathbf{H}_1 den Anteil der Wechselwirkung beschreibt.

Beispiel: Als Beispiel betrachten wir zwei gleichartige eindimensionale harmonische Oszillatoren, die miteinander harmonisch gekoppelt sind:



Der klassische Hamiltonoperator dieses Systems ist

$$H(x_1, x_2, p_1, p_2) = \underbrace{\frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2}m\kappa^2(x_1 - x_2)^2}_{H_1} \quad (2.218)$$

wobei x_i die horizontale Auslenkung aus der Gleichgewichtslage ist. Dieses System wird quantisiert, indem man die klassischen Größen x_i, p_i durch Operatoren $\mathbf{X}_i, \mathbf{P}_i$ ersetzt, die die Heisenberg-Algebra erfüllen.

Die Motivation des Dirac-Bildes besteht darin, die Zeitabhängigkeit des ungekoppelten Systems, das allein durch \mathbf{H}_0 beschrieben wird, wie im Heisenberg-Bild den Operatoren zuzuordnen, während der durch \mathbf{H}_1 beschriebene Wechselwirkungsanteil wie im Schrödinger-Bild den Zustandsvektoren aufgeprägt wird. Um die Notation nicht zu überfrachten, setzen wir $t_0 = 0$. Im Wechselwirkungsbild ist dann

$$\mathbf{A}_t = \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}_t, \quad |\psi_t\rangle = \mathbf{V}_t |\psi_0\rangle, \quad (2.219)$$

wobei $|\psi_0\rangle$ der Anfangszustand ist und

$$\mathbf{U}_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t}, \quad \mathbf{V}_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_1 t}, \quad (2.220)$$

die zu \mathbf{H}_0 und \mathbf{H}_1 gehörenden Zeitentwicklungsoperatoren sind. Setzt man für \mathbf{A} die Anteile des Hamiltonoperators ein, so ergibt sich sofort, dass der nichtwechselwirkende Anteil

$$\mathbf{H}_{0,t} = \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{U}_t = \underbrace{\mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{U}_t}_{=1} \mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0 \quad (2.221)$$

zeitunabhängig ist, während der Wechselwirkungsanteil mit

$$\mathbf{H}_{1,t} = \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{U}_t \quad (2.222)$$

einer Zeitentwicklung unterliegt. Mit $i\hbar\partial_t\mathbf{U}_t = \mathbf{H}_0\mathbf{U}_t$ und $i\hbar\partial_t\mathbf{V}_t = \mathbf{H}_1\mathbf{V}_t$ ergeben sich dann zusammenfassend die Bewegungsgleichungen im Wechselwirkungsbild zu

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{1,t} &= e^{+\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0t}\mathbf{H}_1e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0t} \\ i\hbar\partial_t|\psi_t\rangle &= \mathbf{H}_{1,t}|\psi_t\rangle \\ i\hbar\partial_t\mathbf{A}_t &= [\mathbf{A}_t, \mathbf{H}_0] \end{aligned} \tag{2.223}$$

3 Drehimpuls

3.1 Drehimpuls

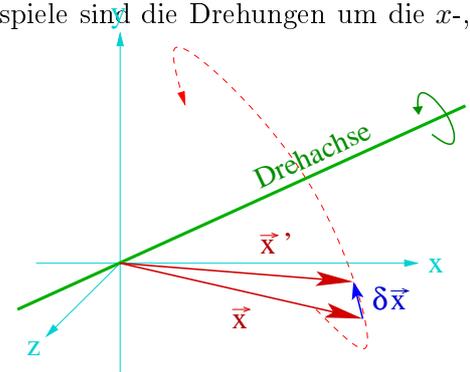
3.1.1 Räumliche Drehungen: Die Gruppe SO(3)

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir gesehen, dass der quantenmechanische Impulsoperator Translationen im Ortsraum erzeugt. Auf analoge Weise erzeugt der Drehimpulsoperator \vec{J} , den wir im Folgenden untersuchen wollen, räumliche Drehungen im \mathbb{R}^3 . Um dies zu verstehen wiederholen wir zunächst die Grundlagen aus der linearen Algebra über räumliche Drehungen.

Räumliche Drehungen im \mathbb{R}^3

Eine räumliche Drehung ist eine lineare Abbildung $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, unter der das Skalarprodukt zweier Vektoren im \mathbb{R}^3 (nicht zu verwechseln mit dem Skalarprodukt im Hilbertraum) invariant ist. Eine Rotation wird in kartesischen Koordinaten durch eine 3×3 -Matrix \mathcal{R} dargestellt, welche die Orthogonalitätseigenschaft $\mathcal{R}^T = \mathcal{R}^{-1}$ besitzt. Diese Abbildungen bilden die Gruppe der *orthogonalen Transformationen in drei Dimensionen* $O(3)$. Beschränkt man sich auf Abbildungen mit der Determinante $+1$, lässt also Punktspiegelungen am Ursprung außen vor, so erhält man die *Gruppe der speziellen orthogonalen Transformationen in drei Dimensionen* $SO(3)$. Beispiele sind die Drehungen um die x -, y -, und z -Achse um die Winkel ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_x(\phi_x) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_x & -\sin \phi_x \\ 0 & \sin \phi_x & \cos \phi_x \end{pmatrix} \\ \mathcal{R}_y(\phi_y) &= \begin{pmatrix} \cos \phi_y & 0 & \sin \phi_y \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi_y & 0 & \cos \phi_y \end{pmatrix} \\ \mathcal{R}_z(\phi_z) &= \begin{pmatrix} \cos \phi_z & -\sin \phi_z & 0 \\ \sin \phi_z & \cos \phi_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$



Infinitesimale Drehung im \mathbb{R}^3 (siehe Text).

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass Drehungen um verschiedene Achsen nicht miteinander vertauschen. Die $SO(3)$ ist also eine *nichtkommutative* Gruppe. Dementsprechend ist es auch nicht möglich, die Drehung um eine beliebige Drehachse als simples Produkt der obigen Drehmatrizen darzustellen.

Drehungen um eine beliebige Achse

Im Folgenden betrachten wir nun eine Drehung um eine beliebige Drehachse, die durch den Vektor $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^3$ beschrieben wird, dessen Richtung die Lage der Achse und dessen Betrag $\phi = |\vec{\phi}|$ den Drehwinkel angibt. Wegen der Nichtkommutativität ist es **nicht** möglich, die gesuchte Drehmatrix $\mathcal{R}(\vec{\phi})$ als simples Produkt der obigen Drehmatrizen darzustellen.

Um die Drehmatrix zu bestimmen, betrachten wir zunächst infinitesimale Drehungen $\delta\phi = |\delta\vec{\phi}| \ll 1$. Unter einer solchen infinitesimalen Drehung bewegt sich ein Ortsvektor \vec{x} um ein infinitesimales Stück $\delta\vec{x}$ nach \vec{x}' :

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x}, \quad (3.1)$$

wobei

$$\delta\vec{x} = \delta\vec{\phi} \times \vec{x} \quad (3.2)$$

ist. Das Kreuzprodukt lässt sich dabei auch schreiben als

$$\delta x_j = \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \delta\phi_k x_l, \quad (3.3)$$

wobei ϵ_{ijk} die Levi-Civita-Symbole sind (vgl. Anhang A.2). Man kann nun für festes k die Levi-Civita-Symbole ϵ_{jkl} als eine Matrix \mathcal{G}_k mit Matrixelementen

$$[\mathcal{G}_k]_{jl} := \epsilon_{jkl} \quad (3.4)$$

so dass $\delta x_j = \sum_{k,l=1}^3 \delta\phi_k [\mathcal{G}_k]_{jl} x_l$ ist. Diese Matrizen sind die sogenannten *Generatoren* der $SO(3)$ und lauten

$$\mathcal{G}_1 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{G}_2 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{G}_3 := \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Mit diesen Generatoren kann eine infinitesimale Drehung durch

$$\vec{x}' = \left(1 + \sum_k \delta\phi_k \mathcal{G}_k\right) \vec{x} \quad (3.6)$$

ausgedrückt werden. Um eine *endliche* Drehung um den Winkel ϕ durchzuführen, wird die infinitesimale Drehung $N = \phi/\delta\phi$ mal hintereinander ausgeführt und im Grenzwert $\delta\phi \rightarrow 0$ bzw. $N \rightarrow \infty$ betrachtet:

$$\mathcal{R}(\vec{\phi}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \sum_k \frac{\phi_k \mathcal{G}_k}{N}\right)^N = e^{\sum_k \phi_k \mathcal{G}_k}. \quad (3.7)$$

Fasst man nun $\vec{G} = (\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \mathcal{G}_3)^T$ formal als einen Vektor auf (dessen Komponenten drei 3×3 -Matrizen sind), gelangen wir zu dem Ergebnis

$$\boxed{\mathcal{R}(\vec{\phi}) = e^{\vec{\phi} \cdot \vec{G}}}. \quad (3.8)$$

Die Matrixexponentialfunktion lässt sich mit *Mathematica*[®] ausführen. Man erhält so die explizite Drehmatrix für eine Drehung um die Achse $\vec{\phi}$ um den Winkel $\phi = |\vec{\phi}|$:

$$\mathcal{R}(\vec{\phi}) = \begin{pmatrix} \phi_1^2 + \cos(\phi) (\phi_2^2 + \phi_3^2) & -(\cos(\phi) - 1)\phi_1\phi_2 - \phi \sin(\phi)\phi_3 & \phi \sin(\phi)\phi_2 - (\cos(\phi) - 1)\phi_1\phi_3 \\ \phi \sin(\phi)\phi_3 - (\cos(\phi) - 1)\phi_1\phi_2 & \phi_2^2 + \cos(\phi) (\phi_1^2 + \phi_3^2) & -\phi \sin(\phi)\phi_1 - (\cos(\phi) - 1)\phi_2\phi_3 \\ -\phi \sin(\phi)\phi_2 - (\cos(\phi) - 1)\phi_1\phi_3 & \phi \sin(\phi)\phi_1 - (\cos(\phi) - 1)\phi_2\phi_3 & \phi_3^2 + \cos(\phi) (\phi_1^2 + \phi_2^2) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Auf diese Weise können in dieser Darstellung alle Gruppenelemente der $SO(3)$ parametrisiert werden.

Algebra der Generatoren der $SO(3)$

Die Nichtkommutativität der Drehgruppe $SO(3)$ schlägt sich nieder in der Nichtkommutativität ihrer Generatoren. Man kann leicht nachrechnen, dass die Generatoren die Vertauschungsrelationen

$$[\mathcal{G}_j, \mathcal{G}_k] = \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \mathcal{G}_l \quad (3.10)$$

erfüllen. Dabei lässt man gemäß der Einsteinschen Summenkonvention häufig die Summe weg, schreibt also $[\mathcal{G}_j, \mathcal{G}_k] = \epsilon_{jkl} \mathcal{G}_l$. Die Komponenten ϵ_{jkl} sind dabei die sogenannten *Strukturkonstanten* der Gruppe und sind im Fall der $SO(3)$ gerade durch die Levi-Civita-Symbole gegeben.

Bemerkung: Wenn man die Darstellung der Gruppenelemente der $SO(3)$ als Matrixexponentialfunktion gemäß Gl. (3.8) postuliert, können die Generatoren \mathcal{G}_k durch Ableitung nach den Drehwinkeln ϕ_k gewonnen werden. Es gilt nämlich

$$\mathcal{G}_k = \left. \frac{\partial}{\partial \phi_k} e^{\vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}}} \right|_{\vec{\phi}=0} = \left. \frac{\partial}{\partial \phi_k} \mathcal{R}(\vec{\phi}) \right|_{\vec{\phi}=0}. \quad (3.11)$$

Beispielsweise ist

$$\mathcal{G}_1 = \left. \frac{\partial}{\partial \phi_x} \mathcal{R}_x(\phi_x) \right|_{\phi_x=0} \quad (3.12)$$

wie man leicht nachrechnen kann, wenn man die entsprechende Drehmatrix einsetzt.

Bitte vergegenwärtigen Sie sich noch einmal, dass in diesem Abschnitt nur von Drehungen im \mathbb{R}^3 die Rede war, während die Verbindung zur Quantentheorie noch nicht hergestellt wurde. Dies geschieht nun im folgenden Abschnitt.

3.1.2 Räumliche Drehungen in der Quantentheorie

Darstellung der $SO(3)$ im Hilbertraum

Wir stellen nun die Frage, wie sich ein quantenmechanisches System unter räumlichen Drehungen verhält. Dabei wird jedem Gruppenelement der $SO(3)$, also jeder Drehung $\mathcal{R}(\vec{\phi})$, eine unitäre Transformation $\mathbf{U}(\vec{\phi})$ zugeordnet, deren Wirkungsweise gerade darin besteht, das System um die Achse $\vec{\phi}$ zu drehen, also beispielsweise Ortseigenvektoren $|\vec{x}\rangle$ in einen passend gedrehten Ortseigenvektor $|\mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{x}\rangle$ zu überführen. Es soll also gelten

$$\mathbf{U}(\vec{\phi})|\vec{x}\rangle = |\mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{x}\rangle. \quad (3.13)$$

Offenbar bewirkt der Operator

$$\mathbf{U}(\vec{\phi}) = \int d^3x |\mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \quad (3.14)$$

genau diese gewünschte Abbildung. Wie man sich leicht überzeugen kann, ist dieser Operator wegen

$$\mathbf{U}(\vec{\phi})^\dagger \mathbf{U}(\vec{\phi}) = \int d^3x \int d^3x' |\vec{x}'\rangle \underbrace{\langle \mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{x}' | \mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{x} \rangle}_{=\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')} \langle \vec{x}| = \int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \mathbf{1} \quad (3.15)$$

in der Tat unitär.

Es ist wesentlich zu erkennen, dass durch die Abbildung $\mathcal{R} \rightarrow \mathbf{U}$ die Gruppe der Drehungen als solche nicht modifiziert wird, man geht lediglich zu einer anderen Darstellung über, indem man die Gruppenelemente nicht mehr als 3×3 -Matrizen auf dem \mathbb{R}^3 , sondern als unitäre Operatoren auf dem Hilbertraum darstellt. Mathematiker bezeichnen die Abbildung $\mathcal{R} \rightarrow \mathbf{U}$ als einen Gruppenhomomorphismus, d.h. die Verknüpfungsstruktur bezüglich Hintereinanderausführung und damit die Nichtkommutativität überträgt sich unverändert auf die \mathbf{U} -Darstellung.

Generatoren der $SO(3)$ in der Hilbertraumdarstellung

Wir suchen nun das Pendant der Generatoren $\vec{\mathcal{G}} = (\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \mathcal{G}_3)$ in der neuen Darstellung, d.h. wir suchen drei hermitesche Operatoren $\vec{\mathbf{L}} = (\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3)$ derart dass

$$\mathcal{R}(\vec{\phi}) = e^{\vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}}} \Leftrightarrow \mathbf{U}(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{L}}}. \quad (3.16)$$

Dabei ist auf der rechten Seite, wie üblich in der Quantentheorie, der Vorfaktor $-i/\hbar$ eingefügt worden, der aber in der Definition der Generatoren absorbiert werden kann. Die imaginäre Einheit führt dazu, dass die gesuchten Generatoren hermitesch (und nicht wie die \mathcal{G} 's antihermitesch) sind.

Um $\vec{\mathbf{L}}$ zu bestimmen, betrachten wir wie vorhin eine infinitesimale Drehung um einen kleinen Winkel $\delta\vec{\phi}$. Dann gilt wegen

$$\mathbf{U}(\delta\vec{\phi}) = \int d^3x |\mathcal{R}(\delta\vec{\phi})\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \quad (3.17)$$

in erster Ordnung von $\delta\vec{\phi}$ die Gleichung

$$\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{L}} \cdot \delta\vec{\phi} = \int d^3x |\vec{x} + \delta\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|. \quad (3.18)$$

wobei $\delta\vec{x} = (\delta\vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}})\vec{x}$ ist.

Die infinitesimale Verschiebung um $\delta\vec{x}$ kann man sich nun vom Impulsoperator erzeugt vorstellen. Entwickelt man nämlich die Formel $e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{d} \cdot \vec{\mathbf{P}}} |\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{d}\rangle$ in Gl. (2.142) in erster Ordnung und setzt $\vec{d} = \delta\vec{x}$ mit $\delta x_j = \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \delta\phi_k x_l$, so erhält man

$$|\vec{x} + \delta\vec{x}\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{P}}\right) |\vec{x}\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{j,k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \delta\phi_k x_l \mathbf{P}_j\right) |\vec{x}\rangle \quad (3.19)$$

und damit durch Koeffizientenvergleich in ϕ_k die Beziehung

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_k &= \int d^3x \sum_{j,l=1}^3 \epsilon_{jkl} x_l \mathbf{P}_j |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \\ &= \sum_{j,l=1}^3 \int d^3x \epsilon_{jkl} |\vec{x}\rangle x_l \langle \vec{x}| \mathbf{P}_j = \sum_{j,l=1}^3 \epsilon_{klj} \mathbf{X}_l \mathbf{P}_j, \end{aligned} \quad (3.20)$$

d.h. \mathbf{L} ist nichts anderes als der Drehimpuls

$$\boxed{\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}}} \quad (3.21)$$

Diese Drehimpulskomponenten erfüllen (bis auf einen Faktor $i\hbar$) die gleichen Vertauschungsrelationen wie die Generatoren \mathcal{G}_k , nämlich

$$[\mathbf{L}_j, \mathbf{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \mathbf{L}_l. \quad (3.22)$$

Die Generatoren der $SO(3)$ sind also die Komponenten des Drehimpulses. Ähnlich wie der Impuls räumliche Translationen erzeugt, erzeugt der Drehimpuls räumliche Rotationen.

3.1.3 Drehimpulsalgebra

Das Problem des *Drehimpulses* in der Quantentheorie scheint zunächst einfach zu sein: Klassisch ist $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$, also ist das quantentheoretische Pendant des Bahndrehimpulses durch $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}}$ gegeben. Alle Eigenschaften des Drehimpulses ließen sich dann von der Heisenberg-Algebra ableiten. In der Tat erhält man durch dieses Vorgehen einen Satz von Vertauschungsrelationen, nämlich die sogenannte *Drehimpulsalgebra*. Man könnte nun meinen, dass die Drehimpulsalgebra keine wesentliche neue Information beinhaltet, da sie sich vollständig aus der Heisenberg-Algebra ableiten lässt. Dieser Eindruck ist falsch, denn die Drehimpulsalgebra *per se* ist allgemeiner und lässt weitere Darstellungen zu, die nicht mehr als konventioneller Bahndrehimpuls eines Massepunktes interpretiert werden können und durch – wie wir noch sehen werden – ‘halbzahlige’ Drehimpulse zulassen. Erstaunlicherweise gibt es physikalische Realisierungen dieser Darstellungen, die als ‘Spin’ der Elementarteilchen bekannt sind. Hier zeigt sich die Stärke algebraischer Methoden: Indem man die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses vom gewöhnlichen Bahndrehimpuls ableitet, sich dann aber von dieser Herleitung löst und die Drehimpulsalgebra als solche untersucht, wird man auf neue Lösungen geführt. Das Wunder, dem man als Physiker mit tiefem Respekt gegenübersteht, besteht darin, dass solche Lösungen tatsächlich in der Natur realisiert sind.

Um die verschiedenen Arten von Drehimpulsen auseinanderzuhalten, hat sich in der Literatur folgende Konvention eingebürgert:

$\vec{\mathbf{L}}$	Konventioneller Bahndrehimpuls
$\vec{\mathbf{S}}$	Spin
$\vec{\mathbf{J}}$	Gesamtdrehimpuls, allgemeiner Drehimpuls

Definition

Die *Drehimpulsalgebra* besitzt drei verschiedene ‘Buchstaben’ $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3$, häufig auch $\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y, \mathbf{J}_z$ genannt, die zu einem Vektor $\vec{\mathbf{J}}$ zusammengefasst sind. Der lineare Raum der daraus gebildeten Wörter wird dabei durch die Relationen

$$\boxed{[\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\mathbf{J}_k} \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\} \quad (3.23)$$

eingeschränkt. Wie wir später sehen werden (Abschnitt 3.1.4), kann man leicht überprüfen, dass der Bahndrehimpuls $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}}$ genau diese Vertauschungsrelationen erfüllt.

Alle Triplets hermitescher Operatoren, die diese Vertauschungsrelationen erfüllen, werden in der Physik als Drehimpulse interpretiert. Die Drehimpulsalgebra ist invariant unter zyklischer Vertauschung der Indices, womit die drei Operatoren eine gleichberechtigte Rolle spielen. Weil deren Kommutator ungleich Null ist, können verschiedene Drehimpulskomponenten nicht gleichzeitig gemessen werden.

Quadrat des Drehimpulses

Ein Element des Wortraums einer Algebra, das mit allen anderen Wörtern und deren Linearkombinationen vertauscht, heisst *zentrales Element*. Auf der Suche nach einem maximalen Satz kommutierender Observabler ist also das Auffinden der zentralen Elemente einer Algebra von besonderer Bedeutung.

Das zentrale Element der Drehimpulsalgebra ist das Quadrat des Drehimpulses

$$\vec{\mathbf{J}}^2 = \vec{\mathbf{J}} \cdot \vec{\mathbf{J}} = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + \mathbf{J}_3^2, \quad (3.24)$$

das mit allen Komponenten des Drehimpulses kommutiert:

$$[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_k] = 0. \quad (3.25)$$

Beweis: Wegen der Symmetrie der Drehimpulsalgebra unter zyklischen Vertauschungen reicht es aus, den Fall $k = 3$ zu beweisen. Durch Einsetzen der Vertauschungsrelationen erhält man

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + \mathbf{J}_3^2, \mathbf{J}_3] &= \mathbf{J}_1\mathbf{J}_1\mathbf{J}_3 + \mathbf{J}_2\mathbf{J}_2\mathbf{J}_3 + \mathbf{J}_3\mathbf{J}_1\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_3\mathbf{J}_2\mathbf{J}_2 & (3.26) \\ &= \mathbf{J}_1[\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_3] + [\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_3]\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2[\mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3] + [\mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3]\mathbf{J}_2 \\ &= i\hbar(-\mathbf{J}_1\mathbf{J}_2 - \mathbf{J}_2, \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_1\mathbf{J}_2) = 0. \end{aligned}$$

Da die Drehimpulskomponenten untereinander nicht vertauschen, bietet es sich nun an, als maximalen Satz miteinander vertauschender Observabler den Operator $\vec{\mathbf{J}}^2$ und eine der drei Komponenten $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3$ zu wählen. Physikalisch entspricht dies der Wahl einer Richtung (Drehachse), bezüglich derer der Drehimpuls gemessen wird. In der Regel wählt man den Operator \mathbf{J}_3 aus, d.h. das Koordinatensystem wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit so gelegt, dass der Drehimpuls entlang der z -Achse gemessen wird. Natürlich könnte man den Drehimpuls auch entlang der x - oder y -Achse messen, wofür die nachfolgenden Formeln zyklisch in den Indices zu permutieren wären. Ebenso sind Messungen entlang beliebiger Richtungen möglich.

Wählt man also die beiden hermiteschen Operatoren $\vec{\mathbf{J}}^2$ und \mathbf{J}_3 als maximalen Satz kommutierender Observabler, postuliert man wie gewohnt ein gemeinsames System von Eigenzuständen

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{J}}^2|q, z\rangle &= q|q, z\rangle, \\ \mathbf{J}_3|q, z\rangle &= z|q, z\rangle.\end{aligned}\tag{3.27}$$

Dabei sind q und z die entsprechenden Eigenwerte.

Konstruktion des Zustandsraums

Wir wollen nun – ähnlich wie beim harmonischen Oszillator – den Zustandsraum auf darstellungsfreie Weise konstruieren. Dazu definieren wir auf analoge Weise *Leiteroperatoren*

$$\mathbf{J}_\pm := \mathbf{J}_1 \pm i\mathbf{J}_2.\tag{3.28}$$

Diese beiden nichthermiteschen Operatoren sind zueinander adjungiert ($\mathbf{J}_\pm = \mathbf{J}_\mp^\dagger$) und erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-] = 2\hbar\mathbf{J}_3,\tag{3.29}$$

$$[\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_\pm] = 0,\tag{3.30}$$

$$[\mathbf{J}_3, \mathbf{J}_\pm] = \pm\hbar\mathbf{J}_\pm.\tag{3.31}$$

Wie wirken diese Leiteroperatoren auf die postulierten Zustände $|q, z\rangle$? Dazu betrachten wir $\mathbf{J}_\pm|q, z\rangle$ und wenden darauf $\vec{\mathbf{J}}^2$ bzw. \mathbf{J}_3 an. Einerseits ist

$$\vec{\mathbf{J}}^2\mathbf{J}_\pm|q, z\rangle = \mathbf{J}_\pm\vec{\mathbf{J}}^2|q, z\rangle = q\mathbf{J}_\pm|q, z\rangle,\tag{3.32}$$

d.h. die Leiteroperatoren haben keinen Einfluss auf die Quantenzahl q . Andererseits ist

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_3\mathbf{J}_\pm|q, z\rangle &= \left(\mathbf{J}_\pm\mathbf{J}_3 + \underbrace{\mathbf{J}_3\mathbf{J}_\pm - \mathbf{J}_\pm\mathbf{J}_3}_{=\pm\hbar\mathbf{J}_\pm}\right)|q, z\rangle \\ &= (z\mathbf{J}_\pm \pm \hbar\mathbf{J}_\pm)|q, z\rangle \\ &= (z \pm \hbar)\mathbf{J}_\pm|q, z\rangle,\end{aligned}\tag{3.33}$$

d.h. die Operatoren \mathbf{J}_\pm erhöhen bzw. erniedrigen die Quantenzahl z in Einheiten von \hbar , was ihre Bezeichnung als *Leiteroperatoren* rechtfertigt.

Ähnlich wie beim harmonischen Oszillator kann die Leiter jedoch nicht unbeschränkt sein, sie ist in diesem Fall sogar sowohl von oben als auch von unten beschränkt. Das ist physikalisch plausibel, da \mathbf{J}_\pm nur die Quantenzahl z , also die z -Komponente des Drehimpulses, modifiziert, die zumindest nach klassischer Vorstellung nicht größer werden kann als die Länge des Vektors, also die Grenzen $\pm\sqrt{q}$ nicht überschreiten kann.

Beweis: Man kann diese Grenzen auch quantenmechanisch beweisen. Seien dazu die Eigenzustände $|q, z\rangle$ normiert und $|\psi_\pm\rangle := \mathbf{J}_\pm|q, z\rangle$. Dann ist

$$\begin{aligned}q - z^2 &= \langle q, z|(q - z^2)|q, z\rangle = \langle q, z|(\vec{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{J}_3)|q, z\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle q, z|(\mathbf{J}_+\mathbf{J}_- + \mathbf{J}_-\mathbf{J}_+)|q, z\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\langle\psi_+|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\psi_-\rangle) \geq 0,\end{aligned}\tag{3.34}$$

also $z^2 \leq q$.

Die Beschränktheit der Quantenzahl z für gegebenes q hat zur Folge, dass es ein z_{\min} und ein z_{\max} geben muss, die der ersten und letzten Sprosse der Leiter entsprechen, d.h.

$$\mathbf{J}_-|q, z_{\min}\rangle = 0, \quad \mathbf{J}_+|q, z_{\max}\rangle = 0. \quad (3.35)$$

Wenn solche Zustände existieren, müssen z_{\min} und z_{\max} durch die Formel

$$q = z_{\min}(z_{\min} - \hbar) = z_{\max}(z_{\max} + \hbar) \quad (3.36)$$

gegeben sein, woraus sich sofort $z_{\min} = -z_{\max}$ ergibt. Darüber hinaus muss die Differenz $z_{\max} - z_{\min}$ ein Vielfaches vom Sprossenabstand \hbar sein.

Beweis: Diese Formel kann man herleiten, indem man $\mathbf{J}_\pm \mathbf{J}_\mp$ auf diese Zustände anwendet. Wegen

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+ &= (\mathbf{J}_1 - i\mathbf{J}_2)(\mathbf{J}_1 + i\mathbf{J}_2) \\ &= \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 - i(\mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2) \\ &= \vec{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{J}_3^2 - \hbar \mathbf{J}_3 \end{aligned} \quad (3.37)$$

gilt für die obere Sprosse der Leiter

$$0 = \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+ |q, z_{\max}\rangle = (\vec{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{J}_3^2 - \hbar \mathbf{J}_3) |q, z_{\max}\rangle = (q - z_{\max}^2 - \hbar z_{\max}) |q, z_{\max}\rangle \quad (3.38)$$

also $q = z_{\max}(z_{\max} + \hbar)$. Ein analoges Resultat erhält man für $\mathbf{J}_+ \mathbf{J}_-$ angewandt auf $|q, z_{\min}\rangle$.

Es ist deshalb üblich, den Eigenwert z sowie z_{\min}, z_{\max} durch dimensionslose Quantenzahlen m und j auszudrücken, so dass

$$z = \hbar m, \quad z_{\max} = -z_{\min} = \hbar j, \quad q = \hbar^2 j(j+1) \quad (3.39)$$

ist. Die entsprechenden Eigenzustände werden dann als $|j, m\rangle$ geschrieben und es gilt

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \\ \mathbf{J}_3 |j, m\rangle &= m \hbar |j, m\rangle. \end{aligned}} \quad (3.40)$$

Dabei kann j die Werte $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ annehmen der Sprossenindex m läuft für vorgegebenes j über den Wertebereich

$$m \in \underbrace{\{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}}_{2j+1 \text{ Zustände}}. \quad (3.41)$$

Die Zahl j charakterisiert dabei den Gesamtdrehimpuls, während m seine Orientierung relativ zur z -Achse beschreibt. Beide Größen sind in der Quantentheorie quantisiert. Die Zahl j wird dabei als *Drehimpulsquantenzahl*, die Zahl m dagegen als *magnetische Quantenzahl* bezeichnet.

Beispiel:

$\mathbf{j} = \mathbf{0}$: In diesem Fall gibt es nur einen Zustand $|0, 0\rangle$, der von allen Drehimpulsoperatoren vernichtet wird. Ein solcher Zustand ist, wie wir noch sehen werden, rotationsinvariant.

$\mathbf{j} = \mathbf{1}/2$: In diesem Fall gibt es zwei Zustände $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ und $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$. Solche Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustände, die auch oft als $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ (*spin up*, *spin down*) geschrieben werden, beschreiben z.B. den Eigendrehimpuls des Elektrons. Aus das Phänomen Spin werden wir weiter unten noch genauer eingehen.

$\mathbf{j} = \mathbf{1}$: In diesem Fall gibt es drei Zustände $|1, -1\rangle, |1, 0\rangle$ und $|1, 1\rangle$.

Matrixelemente der Drehimpulsoperatoren

Die Eigenzustände sind wie bei allen hermiteschen Operatoren orthogonal aufeinander und können so normiert werden, dass die Orthogonalitätsrelation

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad (3.42)$$

gilt. Wie beim harmonischen Oszillator, dessen Zustände sukzessiv vom Vakuum ausgehend durch Anwendung von \mathbf{a}^\dagger konstruiert werden können, ist es auch beim Drehimpuls möglich, die Zustände durch wiederholte Anwendung der Leiteroperatoren zu konstruieren. Dazu müssen wir in der Gleichung

$$|\psi\rangle := \mathbf{J}_\pm |j, m\rangle = c_\pm(j, m) |j, m \pm 1\rangle \quad (3.43)$$

den passenden Proportionalitätsfaktor $c_\pm(j, m)$ berechnen. Es gilt

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle j, m | \mathbf{J}_\mp \mathbf{J}_\pm |j, m\rangle = \langle j, m | (\vec{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{J}_3^2 \mp \hbar \mathbf{J}_3) |j, m\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)]$$

und

$$\langle \psi | \psi \rangle = c_\pm^*(j, m) c_\pm(j, m) \langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = |c_\pm(j, m)|^2. \quad (3.44)$$

Folglich ist

$$|c_\pm(j, m)|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1). \quad (3.45)$$

So ergeben sich die Beziehungen

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{J}_\pm |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned}} \quad (3.46)$$

Mit dieser Rekursionsbeziehung und der Orthogonalitätsrelation sind wir nun in der Lage, die Matrixelemente der Drehimpulsoperatoren in ihrer Eigenbasis anzugeben:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle j', m' | \vec{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\ \langle j', m' | \mathbf{J}_3 |j, m\rangle &= \hbar m \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\ \langle j', m' | \mathbf{J}_\pm |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{j,j'} \delta_{m \pm 1, m'} \end{aligned}} \quad (3.47)$$

Beispiel:

$\mathbf{j} = \mathbf{0}$: In diesem Fall sind alle Matrizen gleich Null

$\mathbf{j} = 1/2$: In diesem Fall sind die Matrizen gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \vec{\mathbf{J}}^2 &= \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Diese Matrizen sind als *Pauli-Matrizen* bekannt und werden noch eingehender diskutiert werden.

$\mathbf{j} = 1$: In diesem Fall sind die Matrizen gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \vec{\mathbf{J}}^2 &= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_- = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

3.1.4 Bahndrehimpuls

Definition und Vertauschungsrelationen

Wie wir bereits gesehen haben, konstruiert man in Analogie zum klassischen Bahndrehimpuls eines Teilchens $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ den entsprechenden quantenmechanischen Drehimpuls $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}}$. Da sich das Kreuzprodukt in der Form $(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} a_j b_k$ schreiben lässt, sind die einzelnen Drehimpulskomponenten durch

$$\mathbf{L}_j = \sum_{k,l} \epsilon_{jkl} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_l \quad (3.50)$$

gegeben. Der so definierte Drehimpuls $\vec{\mathbf{L}} = (\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3)^T$ ist per Konstruktion ein *axialer Vektoroperator*, d.h. er transformiert sich unter Drehungen wie ein Ortsvektor, bleibt aber unter Spiegelungen unverändert.

Man kann durch Rechnung leicht zeigen, dass die drei Operatoren $\{\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3\}$ die Vertauschungsrelationen der Drehimpulsalgebra

$$[\mathbf{L}_j, \mathbf{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \mathbf{L}_l \quad (3.51)$$

erfüllen.

Beweis: Dazu bilden wir den Kommutator

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] &= \left[\sum_{k,m} \epsilon_{ikm} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_m, \sum_{r,s} \epsilon_{jrs} \mathbf{X}_r \mathbf{P}_s \right] \quad (3.52) \\ &= \sum_{k,m,r,s} \epsilon_{ikm} \epsilon_{jrs} [\mathbf{X}_k \mathbf{P}_m, \mathbf{X}_r \mathbf{P}_s] \\ &= \sum_{k,m,r,s} \epsilon_{ikm} \epsilon_{jrs} (\underbrace{\mathbf{X}_k \mathbf{P}_m \mathbf{X}_r}_{=\mathbf{X}_r \mathbf{P}_m - i\hbar \delta_{mr}} \mathbf{P}_s - \mathbf{X}_r \underbrace{\mathbf{P}_s \mathbf{X}_k}_{=\mathbf{X}_k \mathbf{P}_s - i\hbar \delta_{sk}} \mathbf{P}_m) \end{aligned}$$

An dieser Stelle wird der Kommutator der Heisenberg-Algebra benutzt.

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] &= -i\hbar \sum_{k,m,s} \epsilon_{ikm} \epsilon_{jms} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_s + i\hbar \sum_{s,m,r} \epsilon_{ism} \epsilon_{jrs} \mathbf{X}_r \mathbf{P}_m \quad (3.53) \\ &= -i\hbar \sum_{k,m,s} \epsilon_{ikm} \epsilon_{jms} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_s + i\hbar \sum_{m,s,k} \epsilon_{ims} \epsilon_{jkm} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_s \\ &= i\hbar \sum_{k,m,s} \underbrace{(\epsilon_{ims} \epsilon_{jkm} - \epsilon_{ikm} \epsilon_{jms})}_{=\epsilon_{ijm} \epsilon_{mks}} \mathbf{X}_k \mathbf{P}_s = \sum_m \epsilon_{ijm} \mathbf{L}_m. \quad \square \end{aligned}$$

Wir wollen nun in die Ortsraumdarstellung gehen und die Eigenfunktionen von $\vec{\mathbf{L}}^2$ zbd \mathbf{L}_3 explizit konstruieren.

Darstellung in Polarkoordinaten

In kartesischen Koordinaten kann man die Darstellung $\vec{\mathbf{X}} = \vec{x}$, $\vec{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla_x$ einsetzen:

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}} = -i\hbar \vec{x} \times \nabla_x. \quad (3.54)$$

Weil der Drehimpuls aber etwas mit räumlichen Drehungen zu tun hat, sind kartesische Koordinaten für konkrete Rechnungen eher ungeeignet, während Polarkoordinaten

$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi, \quad x_2 = r \sin \theta \sin \phi, \quad x_3 = r \cos \theta \quad (3.55)$$

mit $r \geq 0$, $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi]$ sehr viel natürlicher sind.

Bemerkung: Um in diesen Koordinaten zu rechnen, ist es nützlich, sich in jedem Punkt des \mathbb{R}^3 ein Dreiein orthogonaler Einheitsvektoren $\{\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi\}$ zu konstruieren. Diese sind gegeben durch

$$\vec{e}_r = A_r \frac{\partial \vec{r}}{\partial r} = \underbrace{A_r}_{=1} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

$$\vec{e}_\theta = A_\theta \frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta} = \underbrace{A_\theta r}_{=1} \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

$$\vec{e}_\phi = A_\phi \frac{\partial \vec{r}}{\partial \phi} = \underbrace{A_\phi r \sin \theta}_{=1} \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

wobei A_r, A_θ, A_ϕ Normierungsfaktoren sind. Der Gradient lässt sich dann schreiben als

$$\nabla = \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \vec{e}_\phi + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \quad (3.59)$$

In Polarkoordinaten ist die Ortsraumdarstellung der Drehimpulsoperatoren gegeben durch

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{L}} &= -i\hbar (\vec{r} \times \nabla) \\ &= -i\hbar r \vec{e}_r \times \left(\vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \right) \\ &= -i\hbar \left(r \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_r}_{=0} \partial_r + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\theta}_{=\vec{e}_\phi} \frac{r}{r} \partial_\theta + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\phi}_{=-\vec{e}_\theta} \frac{r}{r \sin \theta} \partial_\phi \right) \\ &= -i\hbar \left(\vec{e}_\phi \partial_\theta - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \right) \end{aligned} \quad (3.60)$$

also

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_1 &= i\hbar (\cot \theta \cos \phi \partial_\phi + \sin \phi \partial_\theta), \\ \mathbf{L}_2 &= i\hbar (\cot \theta \sin \phi \partial_\phi - \cos \phi \partial_\theta), \\ \mathbf{L}_3 &= -i\hbar \partial_\phi. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Daraus ergibt sich

$$\mathbf{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi} (\pm \partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \quad (3.62)$$

$$\vec{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) \quad (3.63)$$

Diese Operatoren hängen nicht von r ab. Wir erkennen also, dass die Drehimpulsoperatoren eine winkelabhängige, aber keinerlei radiale Wirkung entfalten. Die Eigenfunktionen $|l, m\rangle$ werden deshalb nur von θ und ϕ , nicht jedoch vom Radius r abhängen.

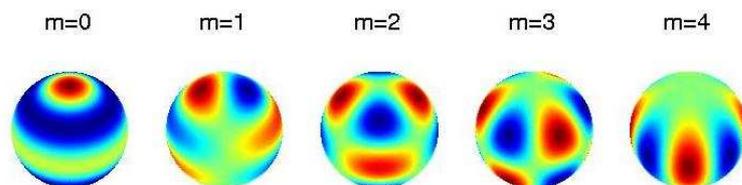


Abbildung 3.1: Kugelflächenfunktionen für $l = 5$. Der Betrag von $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ist hier in einer Farbskala aufgetragen.

Kugelflächenfunktionen

Die Eigenfunktionen

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle \quad (3.64)$$

sind als *Kugelflächenfunktionen* (engl. *spherical harmonics*) bekannt. Die Kugelflächenfunktionen sind anschaulich interpretiert stehende Wellen auf einer Kugeloberfläche (siehe Abb. 3.1).

3.2 Zentralfeldpotentiale

Ein Potential $V(\vec{r})$ wird als *Zentralpotential* bezeichnet, wenn es nur vom Abstand $r = |\vec{r}|$ abhängt. Wie wir sehen werden, lassen sich die stationären Wellenfunktionen für solche Potentiale in einen Radialanteil und eine Kugelflächenfunktion aufspalten. Das vielleicht wichtigste Beispiel ist das Wasserstoffatom.

3.2.1 Allgemeine Formulierung

Erhaltung des Drehimpulses

In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls eines Teilchens in einem Zentralpotential zeitlich erhalten. In der Quantentheorie wird dieser Erhaltungssatz durch den verschwin-

$Y_{l,m}(\theta, \phi)$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m = -3$				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{-3i\phi}$
$m = -2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{-2i\phi}$
$m = -1$		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{-i\phi}$
$m = 0$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$m = 1$		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$	$-\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\phi}$
$m = 2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2i\phi}$
$m = 3$				$-\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{3i\phi}$

Tabelle 3.1: Die ersten 16 Kugelflächenfunktionen

den Kommutator

$$[\vec{\mathbf{L}}, \mathbf{H}] = 0 \quad (3.65)$$

ausgedrückt, wobei

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 + V(\mathbf{X}) \quad (3.66)$$

der Hamiltonian des Teilchens ist.

Beweis: Zum einen vertauscht $\vec{\mathbf{L}}$ mit $\vec{\mathbf{P}}^2$:

$$[\vec{\mathbf{L}}, \vec{\mathbf{P}}^2] = [\vec{\mathbf{X}} \times \vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{P}}^2] = \vec{\mathbf{X}} \times \underbrace{[\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{P}}^2]}_{=0} + \underbrace{[\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}}^2]}_{=2i\hbar\vec{\mathbf{P}}} \times \vec{\mathbf{P}} = i\hbar \vec{\mathbf{P}} \times \vec{\mathbf{P}} = 0. \quad (3.67)$$

Zum anderen vertauscht $\vec{\mathbf{L}}$ auch mit dem Potential. Um dies zu beweisen wählen wir die Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten. Hier ist $V(\vec{\mathbf{X}}) = V(r)$ und $\mathbf{L}_3 = -i\hbar\partial_\phi$. Da das Potential winkelunabhängig ist und der Drehimpuls umgekehrt keine radiale Abhängigkeit besitzt, ist der Kommutator $[\mathbf{L}_3, V(r)] = 0$. Aus Symmetriegründen gilt dies dann auch für die anderen beiden Drehimpulskomponenten. Folglich ist $[\vec{\mathbf{L}}, \mathbf{H}] = 0$.

Insbesondere vertauscht also \mathbf{H} mit $\vec{\mathbf{L}}^2$ und \mathbf{L}_3 :

$$[\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{H}] = [\mathbf{L}_3, \mathbf{H}] = 0. \quad (3.68)$$

Der maximale Satz kommutierender Observabler wird damit um den Hamiltonoperator erweitert. Ist E der Energieeigenwert des Systems, werden also die Eigenzustände $|E, l, m\rangle$ durch drei Quantenzahl E, l, m beschrieben:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}|E, l, m\rangle &= E|E, l, m\rangle \\ \vec{\mathbf{L}}^2|E, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|E, l, m\rangle \\ \mathbf{L}_3|E, l, m\rangle &= \hbar m|E, l, m\rangle \end{aligned} \quad (3.69)$$

Separation

In der Ortsdarstellung hat die stationäre Schrödingergleichung $\mathbf{H}|E, l, m\rangle = E|E, l, m\rangle$ die Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Phi_{Elm}(r, \theta, \phi) = E\Phi_{Elm}(r, \theta, \phi), \quad (3.70)$$

wobei

$$\Phi_{Elm}(r, \theta, \phi) = \langle r, \theta, \phi | E, l, m \rangle \quad (3.71)$$

die zum Eigenzustand $|E, l, m\rangle$ gehörende stationäre Wellenfunktion in Kugelkoordinaten ist. Da einerseits der Laplacian in Kugelkoordinaten durch

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \quad (3.72)$$

gegeben ist, andererseits aber auch

$$\vec{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right] \quad (3.73)$$

ist, gilt $\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \vec{\mathbf{L}}^2$. Mit der Definition des quadrierten *Radialimpulsoperators*

$$\mathbf{P}_r^2 := -\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r^2 r = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r \quad (3.74)$$

geht die stationäre Schrödingergleichung über in

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{P}_r^2 + \frac{\vec{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right) + V(r) - E \right] \Phi_{Elm}(r, \theta, \phi) = 0. \quad (3.75)$$

Wir machen nun einen *Separationsansatz*, indem wir die Wellenfunktion $\Phi_{Elm}(r, \theta, \phi)$ als Produkt einer radialen Wellenfunktion und einer Kugelflächenfunktion schreiben:

$$\Phi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{Elm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.76)$$

Eine nach diesem Ansatz konstruierte Wellenfunktion ist automatisch Eigenfunktion von $\vec{\mathbf{L}}^2$ und \mathbf{L}_3 . Wir können also in der Schrödingergleichung den Operator $\vec{\mathbf{L}}^2$ durch seinen Eigenwert ersetzen:

$$\left[\frac{1}{2m} \mathbf{P}_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] R_{Elm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = 0. \quad (3.77)$$

Da nun auf der linken Seite keine Winkelabhängigkeit mehr vorhanden ist, kann die Kugelflächenfunktion herausgekürzt werden, so dass man zur sogenannten *radialen Schrödingergleichung* oder auch *Radialgleichung* gelangt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r - \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) + V(r) - E \right] R_{Elm}(r) = 0. \quad (3.78)$$

Bis auf Faktoren r und $1/r$ sieht diese Gleichung fast so aus wie eine eindimensionale Schrödingergleichung. Diese Faktoren kann man durch die Substitution

$$R_{Elm}(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (3.79)$$

beseitigen. Man erhält nun

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)}_{V_{\text{eff}}(r)} + V(r) - E \right] u(r) = 0. \quad (3.80)$$

Dabei fasst man – genau wie in der klassischen Mechanik – den Drehimpulsanteil und das Potential zu einem *effektiven Potential*

$$V_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \quad (3.81)$$

Die Radialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + V_{\text{eff}}(r) - E \right) u(r) = 0 \quad (3.82)$$

ist nun formal identisch mit der Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem Potential, allerdings nur für $r \geq 0$. Beachten Sie, dass die Form des effektiven Potentials von dem jeweiligen Drehimpuls abhängt.

Wie man leicht zeigen kann, erhält man auch eine formal identische Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty dr |u(r)|^2 = 1. \quad (3.83)$$

Beweis: Mit der Normierungsbedingung $\langle E, l, m | E, l, m \rangle = 1$ folgt aus der Orthogonalitätsrelation der Kugelflächenfunktionen:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int d^3r \left(\frac{1}{r} u^*(r) Y_{lm}^* \right) \left(\frac{1}{r} u(r) Y_{lm} \right) \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi r^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{r^2} u^*(r) u(r) Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.84) \\
 &= \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r^2} u^*(r) u(r) = \int_0^\infty dr |u(r)|^2
 \end{aligned}$$

3.2.2 Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

In diesem Abschnitt betrachten wir den harmonischen Oszillator in drei Dimensionen mit dem zentralsymmetrischen Potential $V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$.

Lösung in kartesischen Koordinaten

In kartesischen Koordinaten ist der Hamiltonoperator durch

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (3.85)$$

gegeben. Da sowohl ∇^2 als auch r^2 sich als Summen

$$\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad (3.86)$$

darstellen lassen, kann man den Hamiltonoperator in drei additive paarweise kommutierende Operatoren

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_x + \mathbf{H}_y + \mathbf{H}_z \quad (3.87)$$

zerlegen, die jeder für sich einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit Energien E_x, E_y, E_z beschreiben. Die stationären Wellenfunktionen faktorisieren also:

$$\Phi(x, y, z) = \Phi_x(x) \Phi_y(y) \Phi_z(z). \quad (3.88)$$

Das Energieeigenwerte des dreidimensionalen harmonischen Oszillators sind also durch

$$E = \hbar\omega \left[\left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad (3.89)$$

gegeben. Da eine natürliche Zahl $N \in \mathbb{N}_0$ auf

$$\sum_{k=0}^n (k+1) = \frac{n^2 + 3n + 2}{2} \quad (3.90)$$

-fache Weise in drei natürliche Zahlen $N = n_x + n_y + n_z \in \mathbb{N}_0$ zerlegt werden kann, ist das N -te Energieniveau $(N^2 + 3N + 2)/2$ -fach entartet.

Wie in der klassischen Mechanik entkoppelt also die Dynamik der drei senkrecht aufeinander stehenden Freiheitsgrade, so dass wir direkt das Spektrum angeben können. Allerdings sind die so bestimmten Eigenzustände im Allgemeinen keine Eigenzustände der Drehimpulsoperatoren. Aus diesem Grunde behandeln wir nun das gleiche Problem noch einmal in Kugelkoordinaten.

Radialgleichung

Mit $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ lautet die Radialgleichung (3.82) für zentralsymmetrische Potentiale:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1) + \frac{m\omega^2 r^2}{2}\right)u(r) = E^{(l)}u(r) \quad (3.91)$$

Lösung für $l = 0$:

In diesem Fall ist die Radialgleichung formal äquivalent zu der des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Die Eigenfunktionen sind deshalb

$$u(r) \propto H_k\left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}r\right) \exp\left(-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}\right) \quad (3.92)$$

mit der Energie $E_k^{(0)} = \hbar\omega(k+1/2)$, wobei H_k die Hermite-Polynome sind. Nun sind aber die Hermite-Polynome für *gerades* k am Ursprung ungleich Null und führen wegen $\Phi = u/r$ zu einer am Ursprung divergenten Wellenfunktion, die unphysikalisch ist. Deshalb sind nur die ungeraden Lösungen $k = 2\tilde{n} + 1$ zulässig. Die dazugehörigen Eigenenergien sind

$$E_{\tilde{n}}^{(0)} = \hbar\omega\left(2\tilde{n} + \frac{3}{2}\right) \quad (3.93)$$

Lösung für $l \neq 0$:

Wir betrachten zunächst den Limes $r \rightarrow 0$. In diesem Grenzfall dominiert der Drehimpulsterm, der wie r^{-2} divergiert, während das harmonische Potential und die Energie nicht anwachsen. Die Differentialgleichung reduziert sich damit effektiv auf:

$$-\partial_r^2 u(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \simeq 0. \quad (r \rightarrow 0) \quad (3.94)$$

Die Lösungen dieser DGL 2. Ordnung sind Linearkombinationen der beiden Lösungen

$$u(r) = r^{l+1}, \quad u(r) = r^{-l}. \quad (3.95)$$

Nur die erste Lösung ist physikalisch sinnvoll, denn die zweite divergiert für $r \rightarrow 0$ und würde damit zu einer unendlichen Wahrscheinlichkeitsdichte am Ursprung führen.

Danach betrachten wir den Limes großer Radien $r \rightarrow \infty$. Hier dominiert das harmonische Potential, während der Drehimpulsterm vernachlässigt werden kann. Die effektive DGL lautet also

$$-\partial_r^2 u(r) + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} r^2 u(r) \simeq 0 \quad (r \rightarrow \infty) \quad (3.96)$$

deren asymptotische Lösungen Linearkombinationen der Lösungen

$$u(r) = \exp\left(-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}\right), \quad u(r) = \exp\left(+\frac{m\omega r^2}{2\hbar}\right). \quad (3.97)$$

Wiederum ist nur die erste Lösung physikalisch sinnvoll, da die zweite für große r divergiert und damit nicht normierbar wäre.

Für die Gesamtlösung der ursprünglichen DGL bietet sich der Produktansatz

$$u(r) = g(r) r^{l+1} \exp\left(-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}\right) \quad (3.98)$$

an. Als Lösung, die wir hier nur angeben wollen, erhält man die *assozierten Laguerre-Polynome*

$$g(r) = L_{\tilde{n}}^{2l+1}\left(-\frac{m\omega r^2}{\hbar}\right) \quad (3.99)$$

wobei $\tilde{n} \in \mathbb{N}$ ist.

Bemerkung: Die assoziierten (oder auch verallgemeinerten) Laguerre-Polynome $L_n^a(x)$ sind definiert durch

$$L_n^a(x) = \sum_{m=0}^n \binom{n+a}{n-m} \frac{(-x)^m}{m!} \quad (3.100)$$

bzw.

$$L_n^a(x) = \frac{x^{-a} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+a}. \quad (3.101)$$

Sie erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^\infty e^{-x} x^a L_n^a(x) L_m^a(x) dx = \frac{\Gamma(n+a+1)}{n!} \delta_{nm} \quad (3.102)$$

und die Differentialgleichung

$$xL_n''(x) + (a+1-x)L_n'(x) + nL_n^a(x) = 0. \quad (3.103)$$

Die ersten vier Polynome lauten:

$$\begin{aligned} L_0^a(x) &= 1 \\ L_1^a(x) &= -x + a + 1 \\ L_2^a(x) &= \frac{1}{2} [x^2 - 2(a+2)x + (a+1)(a+2)] \\ L_3^a(x) &= \frac{1}{6} [-x^3 + 3(a+3)x^2 - 3(a+2)(a+3)x + (a+1)(a+2)(a+3)]. \end{aligned}$$

Sowohl für $l = 0$ als auch für $l > 0$ erhält man also für die Energieeigenwerte den Ausdruck

$$E_{\tilde{n}}^{(l)} = \hbar\omega \left(2\tilde{n} + l + \frac{3}{2}\right) \quad (3.104)$$

Entartungsschema:

Die Energieniveaus $E_{\tilde{n}}^{(l)}$ sind nicht nur jeweils für sich wegen der Rotationssymmetrie $2l + 1$ -fach entartet, sondern es kommt auch zu Entartungen von Zuständen für verschiedene Drehimpulse. Man führt deshalb die *Hauptquantenzahl* $n = 2\tilde{n} + l$ ein und unterscheidet dabei zwei Fälle: Ist n eine gerade Zahl, so kann der Gesamtdrehimpuls die Werte $l = 0, 2, 4, \dots, n$ annehmen. Für jeden dieser Gesamtdrehimpulse $l = 2k$ kann die magnetische Quantenzahl m insgesamt $2l + 1$ Werte $m \in \{-l, -l+1, \dots, +l\}$ annehmen. Der Entartungsgrad ist also durch

$$d = \sum_{k=0}^{n/2} (4k+1) = \frac{n^2 + 3n + 2}{n} \quad (3.105)$$

gegeben. Ist n dagegen ungerade, so läuft der Gesamtdrehimpuls $l = 2k - 1$ über die Werte $l = 1, 3, 5, \dots, n$ und der Entartungsgrad ist

$$d = \sum_{k=1}^{(n+1)/2} (4k - 1) = \frac{n^2 + 3n + 2}{n}. \quad (3.106)$$

In beiden Fällen ist also der Entartungsgrad durch die selbe Formel gegeben. Dieses Ergebnis ist außerdem identisch mit dem für kartesische Koordinaten ermittelten Entartungsgrad.

Der Unterschied zwischen der Rechnung in kartesischen Koordinaten und der Rechnung in Kugelkoordinaten besteht darin, dass jeweils man andere Basissysteme von Eigenzuständen in den entarteten Unterräumen erhält. Der Vorteil der Rechnung in Kugelkoordinaten ist, dass die Eigenzustände automatisch Drehimpulseigenzustände sind, was in der kartesischen Rechnung nicht der Fall ist.

3.2.3 Wasserstoffatom

Eines der wichtigsten konkreten Beispiele in der nichtrelativistischen Quantentheorie, für das man eine exakte Lösung angeben kann, ist das Wasserstoffatom und ähnliche Systeme. Es handelt sich hier um ein Zweikörperproblem aus Kern und Elektron, das wie in der klassischen Mechanik zunächst durch Separation von Schwerpunkts- und Relativbewegung auf ein Zentralfeldproblem reduziert wird.

Zweikörperproblem

Wir betrachten nun ein System bestehend aus zwei Teilchen mit Massen m_1 und m_2 an den Orten \vec{r}_1 und \vec{r}_2 , das über ein Potential $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ wechselwirken. In der Ortsdarstellung hat der Hamiltonoperator also die Form

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (3.107)$$

In den Übungsaufgaben wird gezeigt, dass sich dieses Problem, ähnlich wie in der klassischen Mechanik, nach Schwerpunkt- und Relativbewegung separieren lässt. Dazu definiert man den Schwerpunkt

$$\vec{R} := \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{M}, \quad (3.108)$$

wobei $M = m_1 + m_2$ die Gesamtmasse ist, sowie die *reduzierte Masse*

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (3.109)$$

mit der sich dann der Hamiltonian in der Form

$$\mathbf{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2}_{=\mathbf{H}_{\text{CM}}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2}_{=\mathbf{H}_r} + V(r) \quad (3.110)$$

schreiben lässt. Damit zerfällt $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{CM}} + \mathbf{H}_r$ in eine Summe aus einem Anteil \mathbf{H}_{CM} , der nur auf die Schwerpunktskoordinate (CM=*center of mass*) wirkt, und einem Anteil \mathbf{H}_r , der nur auf die Relativkoordinate wirkt. Man kann deshalb die Wellenfunktion mit einem weiteren Produktansatz

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi_{\text{CM}}(\vec{R})\psi_r(\vec{r}) \quad (3.111)$$

separieren. Die stationären Lösungen bestimmen sich dann separat aus den Gleichungen

$$\mathbf{H}_{\text{CM}}\psi_{\text{CM}}(\vec{R}) = E_{\text{CM}}\psi_{\text{CM}}(\vec{R}) \quad (3.112)$$

und

$$\mathbf{H}_r\psi_r(\vec{r}) = E_r\psi_r(\vec{r}) \quad (3.113)$$

wobei sich die Gesamtenergie additiv aus den Energien der Schwerpunkts- und Relativbewegung zusammensetzt:

$$E = E_{\text{CM}} + E_r. \quad (3.114)$$

Ein Zweikörperproblem lässt sich also – analog zur klassischen Mechanik – auf das Problem eines Teilchens in einem Zentralpotential zurückführen.

Wasserstoffähnliche Systeme

Unter wasserstoffähnlichen Systemen versteht man Quantensysteme, die sich auf die dreidimensionale Schrödingergleichung in einem zentralsymmetrischen Coulomb-Potential zurückführen lassen. Dazu gehören das Wasserstoffatom, aber auch Ionen wie He^+ mit nur einem Hüllenelektron.

Bemerkung: Streng genommen ist auch der um die Erde kreisende Mond ein wasserstoffartiges System. Dass es hier aber nicht sinnvoll ist, die Gesetze der Quantentheorie anzuwenden, hat vor allem zwei Gründe. Zum einen ist die benötigte Zeit für das 'Zerfließen des Wellenpakets' extrem lang, nämlich weitaus größer als das Alter des Universums, so dass es schon allein aus diesem Grund nicht zu einem delokalisierten Quantenzustand des Mondes kommt. Zum anderen wechselwirkt ein Himmelskörper mit der Umgebung, beispielsweise durch Streuung von Sonnenlicht. Dieser Effekt führt zur sogenannten Dekohärenz des Wellenpakets. Die Untersuchung von Dekohärenzeffekten ist eine relativ neue Forschungsrichtung, die vor etwa 20 Jahren entstanden ist.

Das effektive Potential des Wasserstoffatoms ist in Abb. reffig:veff skizziert. Es stellt sich heraus, dass das Potential für jeden Drehimpuls l ein Minimum besitzt, das jedoch für große Drehimpulse sehr flach ist. Die gebundenen Zustände werden also für große l nur sehr kleine Bindungsenergien haben können.

Die Radialgleichung des Wasserstoffatoms lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right] u(r) = 0, \quad (3.115)$$

wobei Z die Kernladungszahl und $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ die reduzierte Masse des betrachteten Systems ist. Zunächst bringt man diese Gleichung in eine dimensionslose Form, indem man Radius und Potentialstärke durch

$$\rho := \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} r, \quad \lambda := \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2|E|}}, \quad (3.116)$$

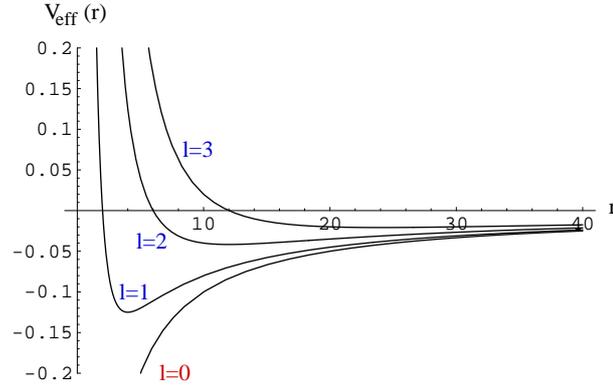


Abbildung 3.2: Effektives Potential für das Coulomb-Potential $V(r) = -1/r$ für verschiedene Drehimpulse l in willkürlichen Einheiten.

umskaliert, womit sie die Form

$$\left[\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] u(\rho) = 0 \quad (3.117)$$

annimmt. Die Randbedingungen behandelt man auf ähnliche Weise wie beim harmonischen Oszillator. Zunächst betrachtet man den Grenzfall kleiner (reskalierter) Radien $\rho \rightarrow 0$. Verschwindet der Drehimpuls ($l = 0$), so dominiert in diesem Limes das Coulomb-Potential. Die effektive DGL $(\partial_\rho^2 + \frac{\lambda}{\rho})u(\rho) \simeq 0$ besitzt als Lösung Bessel-Funktionen $I_1(z)$ und $K_1(z)$, von denen nur erstere im Ursprung regulär ist und die zu niedrigster Ordnung entwickelt das asymptotische Verhalten $u(\rho) \sim \rho$ für $\rho \rightarrow 0$ besitzt. Für $l > 0$ dominiert dagegen der Drehimpulsterm und die entsprechende effektive Differentialgleichung $[\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}]u(\rho) \simeq 0$ liefert die Lösung $u(r) \sim r^{l+1}$. Beide Fälle lassen sich also zusammenfassen mit der Bedingung

$$u(r) \sim r^{l+1} \quad \text{für } r \rightarrow 0. \quad (3.118)$$

Betrachtet man dagegen den Grenzfall großer Radien $r \rightarrow \infty$, sind sowohl der Coulomb- als auch der Drehimpulsanteil vernachlässigbar und die entsprechende effektive Differentialgleichung $[\partial_\rho^2 - \frac{1}{4}]u(r) = 0$ führt auf die Lösung $u(r) \sim e^{-\rho/2}$. Diese beiden Grenzfälle motivieren – genau wie beim harmonischen Oszillator in Gl. (3.98) – den Lösungsansatz

$$u(r) = g(r) r^{l+1} e^{-\rho/2} \quad (3.119)$$

durch den die obige DGL in

$$\left[\rho \partial_\rho^2 + (2 + 2l - \rho) \partial_\rho - (1 + l - \lambda) \right] g(\rho) = 0 \quad (3.120)$$

übergeht. Deren physikalische Lösung wiederum durch ein Laguerre-Polynom

$$g(\rho) = L_{\tilde{n}}^{2l+1}(\rho) \quad (3.121)$$

gegeben, wobei $\tilde{n} = \lambda - 1 - l \in \mathbb{N}_0$ die sogenannte *Radialquantenzahl* ist. Nach Rücksubstitution entspricht dies den Energieniveaus

$$E_{\tilde{n}}^{(l)} = - \left(\frac{\mu Z^2 e^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) \frac{1}{(\tilde{n} + l + 1)^2}. \quad (3.122)$$

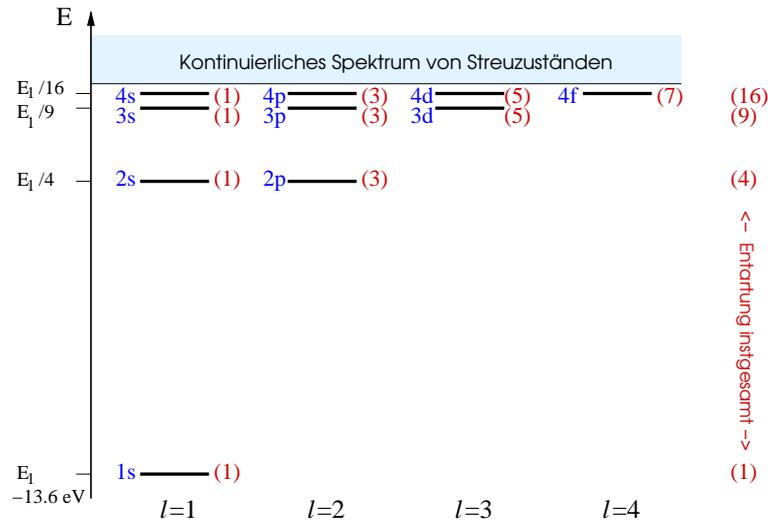


Abbildung 3.3: Termschema des Wasserstoffatoms. Unter Hinzunahme des Spinfreiheitsgrads (siehe Kapitel 5) kommt es zu einer weiteren Verdopplung der Entartungen.

Es ist üblich, statt $\tilde{n} = 0, 1, 2, \dots$ die Zählvariable $n = \tilde{n} + l + 1$ zu verwenden, welche die Werte $l + 1, l + 2, \dots$ annimmt. Die Energieeigenwerte sehen dann quasi drehimpulsunabhängig aus, weshalb man n als *Hauptquantenzahl* bezeichnet

$$E_n = -\left(\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}\right) \frac{1}{n^2}. \quad (3.123)$$

Für $Z = 1$ erhält man für die Grundzustandsenergie E_1 des Wasserstoffatoms den Wert

$$|E_1| = \frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 13.6057 \text{ eV} =: 1 \text{ Ry}, \quad (3.124)$$

die sogenannten *Rydbergenergie*. Diese Energie benötigt man, um das Elektron vom Grundzustand aus der Atomhülle zu entfernen, die Rydbergenergie ist also die Ionisierungs- bzw. Bindungsenergie des Wasserstoffatoms.

Mit der Orthogonalitätsrelation der verallgemeinerten Laguerre-Polynome sind wir nun in der Lage, die normierten Wellenfunktion des Wasserstoffatoms in geschossener Form anzugeben:

$$\Phi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{n a_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.125)$$

wobei $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$ der Bohrsche Radius ist.

Eine schöne Visualisierung dieser Wellenfunktionen finden Sie im Internet unter:

<http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/hydrogenlab/Uebersicht.htm#>

Termschema

Für einen gegebenen Energieeigenwert E_n , d.h. für eine bestimmte Hauptquantenzahl $n \in \mathbb{N}$, kann der Drehimpuls alle ganzzahligen Werte von 0 bis $n - 1$ annehmen. Jeder

dieser Drehimpulszustände ist darüber hinaus $2l+1$ -fach entartet, da die Magnetquantenzahl m , die wegen der Rotationssymmetrie im Ausdruck für die Energie nicht erscheint, ganzzahlige Werte von $-l$ bis $+l$ annehmen kann. Diese entarteten Energieniveaus führen zu dem bekannten Termschema des Wasserstoffatoms, das in Abb. 3.3 dargestellt ist.

Es sollte noch einmal hervorgehoben werden, dass die $2l+1$ -fache Drehimpulsentartung eine Folge der Rotationssymmetrie, also des Zentralpotentials ist. Darüber hinaus gibt es aber sowohl im dreidimensionalen harmonischen Oszillator als auch im Wasserstoffatom Entartungen von Energieniveaus mit verschiedenem Drehimpuls l , welche von der Wahl des Potentials abhängig sind. Man kann zeigen, dass diese Entartungen eine Besonderheit des harmonischen und des Coulomb-Potentials reflektieren, die sich in der klassischen Mechanik dadurch äußert, dass nur diese Potentiale zu geschlossenen Bahnen führen.

3.2.4 Magnetfeld

Da ein Hüllenelektron elektrisch geladen ist, repräsentiert ein Drehimpulszustand mit $l > 0$ einen verlustfreien elektrischen Kreisstrom, der zu einem magnetischen Moment führt. Die Wechselwirkung dieses magnetischen Moments mit einem äußeren Magnetfeld führt in der Regel zu einer Aufhebung der $2l+1$ -fachen Entartung der Energieeigenwerte.

3.2.5 Eichinvariante Ankopplung

Zunächst muss man wissen, wie man ein elektromagnetisches Feld an die Schrödingergleichung ‘ankoppelt’. Dies geschieht nach dem Rezept der *minimalen eichinvarianten Ankopplung*

$$\boxed{\vec{P} \rightarrow \vec{P} - e\vec{A}(\vec{r}), \quad \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H} + e\Phi(\vec{r})} \quad (3.126)$$

wobei $\vec{A}(\vec{r})$ das Vektorpotential und $\Phi(\vec{r})$ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes sind.¹

Anmerkung: Elektrodynamik ist eine Theorie, die jedem raumzeitlichen Punkt der Wellenfunktion einen zusätzlichen inneren Freiheitsgrad zurordnet, der kreisförmig ist und als Einheitskreis in der komplexen Ebene dargestellt werden kann (diese komplexe Ebene ist klassisch zu verstehen und hat nichts mit quantenmechanischen Phasen zu tun!). An jedem raumzeitlichen Punkt der Wellenfunktion befindet sich das System an einem bestimmten Ort auf diesem Kreis. Die Symmetriegruppe für Bewegungen entlang des Kreises ist die Gruppe $U(1)$, die auch als Eichgruppe der Elektrodynamik bezeichnet wird. Diese Gruppe definiert vollständig alle Eigenschaften der Elektrodynamik.

Die Position auf dem inneren Ring hängt im allgemeinen vom Ort \vec{r} ab. Ist die Summe aller Bewegungen auf dem inneren Ring entlang einer geschlossenen raumzeitlichen Bahn ungleich Null, liegt ein topologischer Defekt in Form einer Feldlinie vor. Tritt das beispielsweise bei einer räumlichen geschlossenen Bahn in der xy -Ebene auf, spricht man von einem Magnetfeld in z -Richtung, während bei einer raumzeitlich geschlossenen Bahn in der xt -Ebene von einem elektrischen Feld die in x -Richtung die Rede ist.

Das Vektorpotential \vec{A} sagt aus, wie sich die Position auf dem Ring bei einer infinitesimalen *räumlichen* Verschiebung bewegt. Auf ähnliche Weise sagt das skalare Potential Φ aus, wie sich die Position auf dem Ring bei einer infinitesimalen *zeitlichen* Verschiebung bewegt.

¹Das elektromagnetische Feld wird hier als klassisches Feld angenommen, d.h. die Felder sind keine Operatoren. Eine zusätzliche Quantisierung des elektromagnetischen Feldes würde zur Quantenelektrodynamik führen, die in fortgeschrittenen Theorievorlesungen behandelt wird.

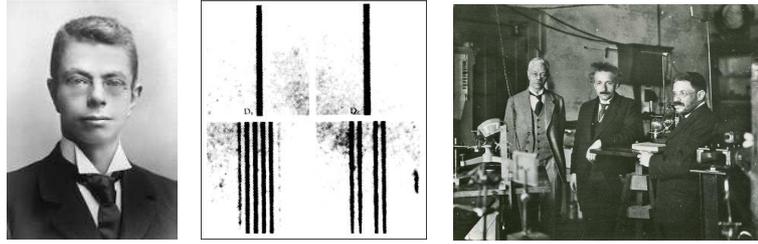


Abbildung 3.4: Pieter Zeeman (1865–1943, rechts mit Einstein und Ehrenfeld) und die von ihm beobachtete Aufspaltung von Spektrallinien in Strahlungsübergängen bei einem äußeren Magnetfeld.

Der Generator für räumliche Translationen ist also nicht mehr \mathbf{P} allein, sondern er muss ergänzt werden, so dass auch die Bewegung auf dem inneren Kreis mitberücksichtigt wird. Ebenso werden zeitliche Translationen nicht länger das ursprüngliche \mathbf{H} erzeugt, vielmehr muss dieser Generator so ergänzt werden, dass auch die Bewegung auf dem inneren Kreis mit ausgeführt wird. Diese ergänzenden Anteile sind genau \vec{A} und ϕ , wodurch plausibel wird, wie das 'Rezept' der minimalen Ankopplung zustande kommt.

Die zeitabhängige Schrödingergleichung in Ortsraumdarstellung geht durch minimale die Ankopplung (3.126) des elektromagnetischen Feldes über in

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - e\vec{A} \right)^2 + V(r) + e\Phi \right] \psi(\vec{x}, t). \quad (3.127)$$

Ausmultiplizieren liefert:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2\nabla^2 - i\hbar e(\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla) + \underbrace{e^2\vec{A}^2}_{\rightarrow 0} \right) + V(r) + e\Phi \right] \psi(\vec{x}, t),$$

wobei der quadratische Term in \vec{A} , der sogenannte diamagnetische Anteil, bei genügend schwachen Feldern, die wir hier betrachten wollen, vernachlässigt werden kann. Die beiden gemischten Terme werden mit der in der nichtrelativistischen Elektrodynamik üblichen Coulomb-Eichung $(\nabla \cdot \vec{A})=0$ vereinfacht

$$(\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla)\psi(\vec{x}, t) = \left(\underbrace{(\nabla \cdot \vec{A})}_{=0} + 2\vec{A} \cdot \nabla \right) \psi(\vec{x}, t) \quad (3.128)$$

und man erhält

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar e}{m}\vec{A} \cdot \nabla + V(r) + e\Phi \right] \psi(\vec{x}, t), \quad (3.129)$$

3.2.6 Homogenes Magnetfeld

Da das magnetische Feld $\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = \nabla \times \vec{A}$ gleich der Rotation des Vektorpotentials ist, lässt sich ein homogenes (=ortsunabhängiges) Feld darstellen als

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x} \times B \quad (3.130)$$

Beweis: Mit Einsteinscher Summenkonvention rechnet man nach:

$$\begin{aligned}
 [\nabla \times (\vec{x} \times \vec{B})]_j &= \epsilon_{jkl} \partial_k [\vec{x} \times \vec{B}]_l \\
 &= \epsilon_{jkl} \epsilon_{lmn} \underbrace{\partial_k x_m}_{=\delta_{km}} B_n \\
 &= \epsilon_{jkl} \epsilon_{lkn} B_n = -\underbrace{\epsilon_{jkl} \epsilon_{kln}}_{=2\delta_{jn}} B_n = -2B_j,
 \end{aligned} \tag{3.131}$$

d.h. $\nabla \times (\vec{x} \times \vec{B}) = -2\vec{B}$, also $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$.

Mit der Rechenregel $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = -(\vec{a} \times \vec{c}) \cdot \vec{b}$ lässt sich in diesem Fall der gemischte Term mit dem Drehimpuls in Zusammenhang bringen:

$$\vec{A} \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) = -\frac{1}{2} (\vec{x} \times \vec{B}) \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) = +\frac{1}{2} \underbrace{(\vec{x} \times \nabla)}_{-\vec{L}/i\hbar} \cdot \vec{B} \psi(\vec{x}, t) \tag{3.132}$$

Mit der Definition des *Bohrschen Magnetons*

$$\mu_B := \frac{e\hbar}{2m} \tag{3.133}$$

lässt sich daher die Schrödingergleichung in der Form

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} + V(r) + e\Phi \right] \psi(\vec{x}, t) \tag{3.134}$$

schreiben. Dabei ist

$$\vec{\mu} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \tag{3.135}$$

das *magnetische Moment* des Elektrons und die Wechselwirkungsenergie mit einem äußeren homogenen Magnetfeld ergibt sich zu

$$H_{\text{int}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \tag{3.136}$$

Weil das Magnetfeld \vec{B} eine Richtung auszeichnet, wird die Rotationsinvarianz im Allgemeinen gebrochen. Im Energiespektrum äußert sich dies durch eine Aufhebung der $2l + 1$ -fachen Entartung der Drehimpulseigenzustände. Dadurch kommt es zu einer Aufspaltung der Spektrallinien, dem sogenannten (normalen) *Zeeman-Effekt*.

4 Spin

4.1 Grundlagen

Viele Elementarteilchen wie z.B. Elektronen tragen neben Masse und elektrischer Ladung eine Eigenschaft, die als *Spin* bezeichnet wird. Der Spin ist ein Effekt, der sich aus dem Zusammenspiel von Relativitätstheorie und Quantentheorie ergibt und deshalb im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie erklärbar ist.

4.1.1 Was ist Spin?

Spin als intrinsische Eigenschaft

Der Spin verhält sich wie ein Drehimpuls, ist aber kein gewöhnlicher Drehimpuls. Die klassische Deutung als ‘Eigendrehimpuls’ vergleichbar mit dem Drehimpuls einer rotierenden Kugel mag für manche qualitativen Argumente nützlich sein, ist aber im Grunde unzutreffend: Ein Elektron ist kein Kügelchen mit einer Eigenrotation wie ein Himmelskörper, sondern nach heutigem Verständnis ein Punktteilchen. Der Spin ist also keine gewöhnliche Rotation, sondern ist – ähnlich wie die Ladung und Masse – eine *innere Eigenschaft* dieses Punktteilchens, die sich einer anschaulichen Deutung entzieht. Solche inneren Eigenschaften eines Punktes werden auch *intrinsische Eigenschaften* genannt. Der Spin wird deshalb auch als *intrinsischer Drehimpuls* bezeichnet.

Dass sich der Spin dennoch wie ein Drehimpuls verhält, hat zweierlei Gründe. Zum einen erfüllen die entsprechenden Generatoren die Drehimpulsalgebra. Zum anderen aber setzt sich der Gesamtdrehimpuls additiv aus dem im letzten Kapitel diskutierten Bahndrehimpuls und dem Spin zusammen.

Während Bahndrehimpulse – wie oben gezeigt – stets ganzzahlig sein müssen, kann der Spin auch die von der Drehimpulsalgebra zugelassenen halbzahligen Werte annehmen. Das Elektron hat beispielsweise einen Spin $1/2$.

Stern-Gerlach Experiment

Das Phänomen ‘Spin’ lässt sich am eindrucksvollsten mit dem Stern-Gerlach-Versuch demonstrieren (siehe Abb. 4.1). In diesem Versuch werden Silberatome durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geschossen. Das Magnetfeld steht dabei senkrecht auf der Flugrichtung. Mit einem inhomogenen Magnetfeld wirkt auf magnetische Dipole eine Kraft, welche die Flugrichtung ändert. Silberatome sind paramagnetisch, so dass man keine

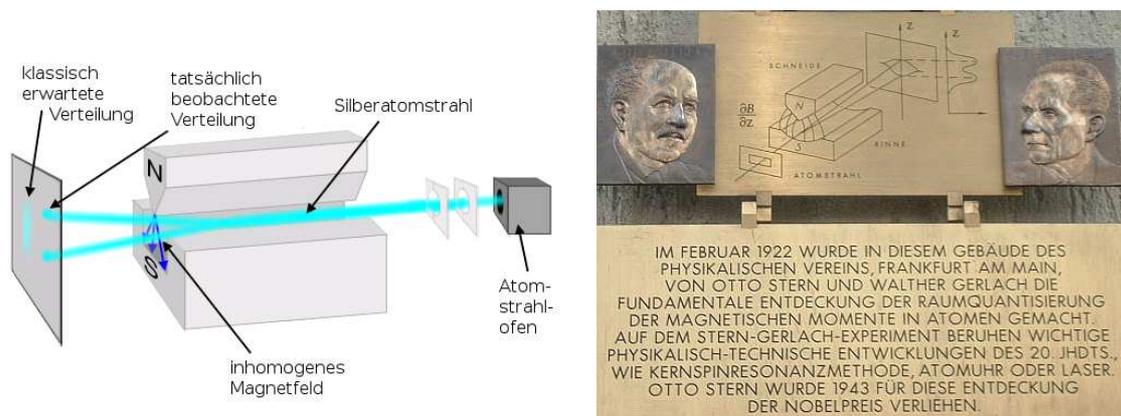


Abbildung 4.1: Links: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach Versuchs. Rechts: Gedenktafel in Frankfurt [Wiki].

Ablenkung erwartet. Doch im Experiment wird der Atomstrahl abgelenkt und in zwei diskrete Teilstrahlen aufgespalten.

Bemerkung: Das magnetische Moment $\vec{\mu} = \frac{q}{2mc}\vec{L}$ einer Ladung q ist proportional zu seinem Drehimpuls. Die potentielle Energie V dieser Ladung in einem Magnetfeld \vec{B} ist $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. In einem homogenen Magnetfeld führt dieses Potential beispielsweise zu einer Verschiebung der Spektrallinien bei Strahlungsübergängen. Zu einer Ablenkung des Teilchens kommt es bei einem homogenen Magnetfeld jedoch nicht, da $\vec{F} = -\nabla V = 0$ ist. In einem inhomogenen Magnetfeld ist dagegen $\vec{F} = \frac{q}{2mc}\vec{L} \cdot \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \neq 0$ und es kommt zu einer Ablenkung des Strahls.

Bei einer quantitativen Analyse der beobachteten Ablenkung wird man auf überraschende Ergebnisse geführt:

- Die Aufspaltung in zwei Teilstrahlen impliziert, dass der Drehimpuls halbzahlig ist, also die Werte $\pm\hbar/2$ annimmt.
- Das magnetische Moment $\vec{\mu}$ ist doppelt so groß wie erwartet.

Da solche Eigenschaften nicht von dem Bahndrehimpuls der Hüllenelektronen stammen können, stellten Uhlenbeck und Goudsmit 1925 die Hypothese auf, dass Elektronen einen intrinsischen halbzahligen Drehimpuls besitzen. Solch ein innerer Drehimpuls von Punktteilchen wird als *Spin* bezeichnet. Auch ein komplexes System wie ein Silberatom besitzt einen Spin, der sich aus den Einzelspins der Konstituenten zusammensetzt.

Spin-Algebra und Darstellungen

Der Spin eines Systems wird durch einen hermiteschen Vektoroperator \vec{S} beschrieben, dessen Komponenten die gewöhnlichen Vertauschungsrelationen des Drehimpulses

$$[\mathbf{S}_j, \mathbf{S}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \mathbf{S}_l \quad (4.1)$$

erfüllen. Alle algebraisch abgeleiteten Ergebnisse für Drehimpulse sind also auch für den Spin gültig. Insbesondere kommutieren $\vec{\mathbf{S}}^2$ und \mathbf{S}_3 , so dass die Eigenzustände $|s, m_s\rangle$ durch die beiden Quantenzahlen s und m_s gekennzeichnet sind. Es gilt:

Operator	Eigenwerte	Wertebereich der Quantenzahl
$\vec{\mathbf{S}}^2$	$\hbar^2 s(s+1)$	$s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$
\mathbf{S}_3	$\hbar m_s$	$m_s \in \{-s, -s+1, \dots, s-1, s\}$

Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass der Bahndrehimpuls $\vec{\mathbf{L}}$ räumliche Drehungen erzeugt, also Generator der Drehgruppe $SO(3)$ ist. Der Spin dagegen ist ein völlig neues Konzept, da er einen inneren Freiheitsgrad der Teilchen beschreibt, den man sich in jedem Punkt der Raumzeit aufgehängt vorstellen kann. Dementsprechend wirkt der Spinoperator in einem separaten Hilbertraum \mathcal{H}_s , dem sogenannten Spinraum. Der gesamte Hilbertraum \mathcal{H} ist also das Tensorprodukt (siehe Anhang A.3)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_s \quad (4.2)$$

wobei \mathcal{H}_l der ‘gewöhnliche’ Hilbertraum über dem physikalischen Ortsraum ist, auf dem die Operatoren $\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}}$ und $\vec{\mathbf{L}}$ wirken. Im Gegensatz zum unendlichdimensionalen Hilbertraum \mathcal{H}_l ist allerdings der Spinraum endlichdimensional, z.B. im Fall eines Spin-1/2 Teilchens ist er nur zweidimensional.

Da der Spinoperator $\vec{\mathbf{S}}$ nur auf \mathcal{H}_s , jedoch nicht auf \mathcal{H}_l wirkt, kommutiert er mit Orts-, Impuls- und Bahndrehimpulsoperator:

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{S}_k] = [\mathbf{P}_j, \mathbf{S}_k] = [\mathbf{L}_j, \mathbf{S}_k] = 0. \quad (4.3)$$

Für ein Teilchen in einem zentralsymmetrischen Potential wird dadurch beispielsweise der maximale Satz paarweise kommutierender Observabler $\mathbf{H}, \vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_3$ um die Spinoperatoren $\vec{\mathbf{S}}^2, \mathbf{S}_3$ erweitert. Die entsprechenden Eigenzustände lassen sich als Tensorprodukt im Gesamttraum (4.2) darstellen:

$$|\psi\rangle = |n, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle, \quad (4.4)$$

wobei die Magnetquantenzahl des Bahndrehimpulses m_l nun zur besseren Unterscheidbarkeit den Index l erhält. Der linke Faktor ist die gewöhnliche räumliche Wellenfunktion, der rechte Faktor dagegen der intrinsische Spinzustand.

In der Literatur ist es üblich, das Tensorprodukt nicht explizit zu schreiben, sondern als Sequenz von Ket-Vektoren zu schreiben oder alle 5 Quantenzahlen in einem einzigen Ket-Vektor zu integrieren:

$$|n, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \equiv |n, l, m_l\rangle |s, m_s\rangle \equiv |n, l, m_l, s, m_s\rangle \quad (4.5)$$

Wechselwirkung des Spins mit einem Magnetfeld

Obwohl der Spin ein innerer Drehimpuls ist, der nichts mit einer konkreten räumlichen Rotation zu tun hat, kann er sehr wohl gemessen werden, da er zu einem zusätzlichen magnetischen Moment führt. Das magnetische Moment des Spins ist

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{\mathbf{S}}. \quad (4.6)$$

Beispielsweise ist für das Elektron

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{e}{2m} \vec{\mathbf{S}}. \quad (4.7)$$

Dabei ist g_s das sogenannte *gyromagnetische Verhältnis*, auch *Landé-Faktor* genannt. Für den Bahndrehimpuls war dieser Faktor gleich 1. Bei einer Herleitung der relativistischen Dirac-Gleichung ergibt sich dagegen der ganzzahlige Wert $g_s = 2$, weshalb man auch von einem anomalen magnetischen Moment spricht.¹

Das gesamte magnetische Moment des Elektrons setzt sich aus dem inneren magnetischen Moment $\vec{\mu}_s$ und dem durch den Bahndrehimpuls verursachten magnetischen Moment $\vec{\mu}_l$ zusammen:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_s + \vec{\mu}_l = \frac{e}{2m} (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \quad (4.8)$$

Beide Anteile wechselwirken mit einem äußeren Magnetfeld \vec{B} . Diese Wechselwirkung wird durch den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{2m} (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \cdot \vec{B} \quad (4.9)$$

beschrieben.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass Spin und Bahndrehimpuls im Rahmen der nichtrelativistischen Quantentheorie additiv zum gesamten magnetischen Moment des Teilchens beitragen, wobei der Spinanteil mit dem Faktor $g_s = 2$ doppelt gewichtet wird.

4.1.2 Spin- $\frac{1}{2}$

Basiszustände und Paulimatrizen

Viele Elementarteilchen wie z.B. das Elektron haben einen Spin $s = 1/2$. Der Eigenwert von $\vec{\mathbf{S}}^2$ ist also $\frac{3}{4}\hbar^2$ und die möglichen Eigenwerte von \mathbf{S}_3 sind $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Die beiden Eigenzustände $|1/2, \pm 1/2\rangle$ werden oft als ‘*spin up*’ und ‘*spin down*’ bezeichnet:

$$|\uparrow\rangle := |1/2, +1/2\rangle, \quad |\downarrow\rangle := |1/2, -1/2\rangle. \quad (4.10)$$

Diese beiden Vektoren bilden eine Basis im zweidimensionalen Spinraum $\mathcal{H}_s = \mathbb{C}^2$ des Spin-1/2-Teilchens. In dieser Basis sind die Spinoperatoren (vgl. Kap. 3.1.3) durch

$$\vec{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (4.11)$$

gegeben, wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ die drei *Paulimatrizen* sind:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

¹Eine genauere Untersuchung im Rahmen der Quantenelektrodynamik, die auch Schleifenkorrekturen in Form von Feynman-Diagrammen berücksichtigt, ergibt den theoretischen Wert $g_s = 2 \cdot (1 + 0,0011596524(\pm 4))$. Der experimentell ermittelte Wert $g_s = 2 \cdot (1 + 0,00115965241(\pm 20))$ stimmt in mindestens 10 Dezimalen mit der Theorie überein. Dies ist die beste Übereinstimmung von Theorie und Experiment, die jemals gemessen wurde, und gibt uns deshalb großes Vertrauen, dass der Formalismus der Quantentheorie korrekt ist.

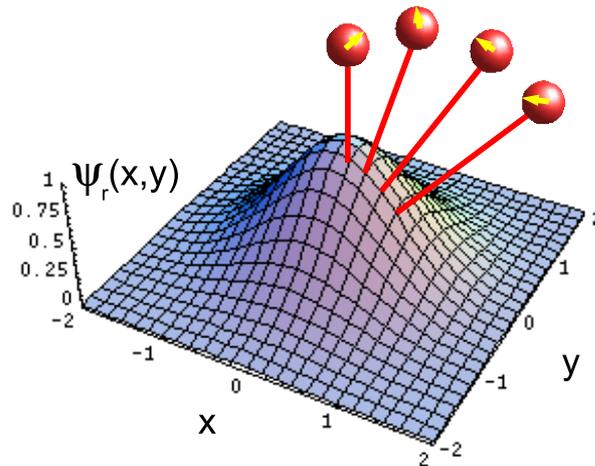


Abbildung 4.2: Cartoon zur Konstruktion des Hilbertraums $\mathcal{H} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_s$. Die Abbildung zeigt eine gewöhnliche Wellenfunktion (hier eine Gaußglocke) in zwei Dimensionen, wobei der Imaginäranteil unterschlagen wird. An jedem Punkt des Ortsraums wird durch die Bildung des Tensorprodukts ein Spinraum $\mathcal{H}_s = \mathbb{C}^2$ ‘aufgehängt’, der durch die roten Kugeln symbolisiert wird. Der Spin ist ein normierter Vektor in diesem Spinraum, wobei die Ausrichtung des Spins von Ort zu Ort unterschiedlich sein kann (gelbe Pfeile).

Zur Erinnerung: Die Pauli-Matrizen erfüllen die Relationen

$$\sigma_j \sigma_k = \mathbf{1} \delta_{jk} + i \epsilon_{jkl} \sigma_l, \quad (4.13)$$

woraus sich (bis auf einen Faktor) die Drehimpulsalgebra ergibt:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \epsilon_{jkl} \sigma_l. \quad (4.14)$$

Insbesondere sind die Paulimatrizen spurlos ($\text{Tr}(\sigma_j) = 0$), hermitesch ($\sigma_j = \sigma_j^\dagger$) und ihr Quadrat ist gleich $\mathbf{1}$.

Ein Spinzustand lässt sich immer als Linearkombination $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ darstellen, ist also ein Vektor auf der Einheitskugel des $\mathcal{H}_s = \mathbb{C}^2$.

Pauli-Gleichung

Den intrinsischen Spinraum kann man sich nun als in jedem Punkt des Ortsraums aufgehängt vorstellen, wie dies als Cartoon in Abb. 4.2 dargestellt ist. An eine ‘gewöhnliche’ Wellenfunktion

$$\psi_l(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_l \rangle, \quad |\psi_l\rangle = \int d^3x \psi_l(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \quad (4.15)$$

wird also in jedem Punkt ein normierter Spinvektor

$$\alpha(\vec{x})|\uparrow\rangle + \beta(\vec{x})|\downarrow\rangle \in \mathbb{C}^2, \quad |\alpha(\vec{x})|^2 + |\beta(\vec{x})|^2 = 1 \quad (4.16)$$

angeheftet, wobei die Koeffizienten α, β , welche die ‘Orientierung’ des Spins in seinem inneren Raum angeben, vom jeweiligen Ort \vec{x} abhängt (eine solche Ortsabhängigkeit hat man z.B. im Stern-Gerlach-Versuch). Die beiden Koeffizienten kann man als zweikomponentigen Spaltenvektor

$$\begin{pmatrix} \alpha(\vec{x}) \\ \beta(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

auffassen, der als *Spinor* bezeichnet wird.

Mit diesen lokal angehefteten Spinraum setzt sich der Gesamtzustand des Systems zusammen aus

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \int d^3x \left[\psi_l(\vec{x})|\vec{x}\rangle \otimes \left(\alpha(\vec{x})|\uparrow\rangle + \beta(\vec{x})|\downarrow\rangle \right) \right] \\
 &= \int d^3x \underbrace{\psi_l(\vec{x})\alpha(\vec{x})}_{=:\psi_\uparrow(\vec{x})} |\vec{x}\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \int d^3x \underbrace{\psi_l(\vec{x})\beta(\vec{x})}_{=:\psi_\downarrow(\vec{x})} |\vec{x}\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad (4.17) \\
 &= |\psi_\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\psi_\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle.
 \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion besteht also jetzt aus zwei Teilwellenfunktionen, eine für *spin-up*, die andere für *spin-down*:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_\uparrow\rangle \\ |\psi_\downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad \psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{x}) \\ \psi_\downarrow(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

mit der Normierung

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle + \langle \downarrow | \downarrow \rangle = \int d^3x \left(|\psi_\uparrow(\vec{x})|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{x})|^2 \right) = 1. \quad (4.19)$$

Dabei ist das Betragsquadrat der Teilwellenfunktionen die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen an einem bestimmten Ort in einem bestimmten Spinzustand (nämlich \uparrow bzw. \downarrow bei Messung von \mathbf{S}_3) zu finden. Diese Darstellung wird als *Spinor-Darstellung* bezeichnet.

Die *Pauli-Gleichung* ist die Bewegungsgleichung für diese zweikomponentigen Wellenfunktionen und hat die Form

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \left[\underbrace{\frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2} + V(\vec{\mathbf{X}})}_{\mathbf{H}_0} + \underbrace{\frac{-e}{2mc}(\vec{\mathbf{L}} + g_s\vec{\mathbf{S}}) \cdot \vec{\mathbf{B}}}_{\mathbf{H}_{\text{int}}} + \underbrace{e\Phi(\vec{x})}_{\mathbf{H}_{\text{el}}} \right] |\psi\rangle \quad (4.20)$$

Die Pauli-Gleichung ist der nichtrelativistische Grenzfall der sogenannten Dirac-Gleichung.

Gesamtdrehimpuls

Wie jede physikalisch sinnvolle Bewegungsgleichung sollte auch die Pauli-Gleichung für zentralsymmetrische Potentiale $V(r)$ und $\Phi(r)$ rotationsinvariant sein. Bei einer Drehung des physikalischen Systems muss deshalb der Wechselwirkungsanteil \mathbf{H}_{int} invariant sein. Wir suchen also einen hermiteschen Vektoroperator $\vec{\mathbf{J}}$, genannt *Gesamtdrehimpuls*, der unitäre Transformationen

$$\mathbf{U}(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} \quad (4.21)$$

erzeugt, unter denen die Pauli-Gleichung invariant ist.

Dazu beweisen wir zunächst, dass für *jeden* Drehimpuls $\vec{\mathbf{Y}}$ gilt:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{Y}}} \vec{\mathbf{Y}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{Y}}} = \mathcal{R}(\vec{\phi})\vec{\mathbf{Y}} \quad (4.22)$$

wobei $\mathcal{R}(\vec{\phi})$ eine 3×3 -Drehmatrix ist (siehe Abschnitt 3.1.2).

Beweis: Ausgangspunkt ist die Drehimpulsalgebra

$$[\mathbf{Y}_j, \mathbf{Y}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\mathbf{Y}_l. \quad (4.23)$$

Diese Vertauschungsrelationen implizieren, dass zu linearer Ordnung in $\epsilon \ll 1$ die folgende Gleichung erfüllt ist:

$$\left(1 - \epsilon \frac{i}{\hbar} \phi_j \mathbf{Y}_j\right) \mathbf{Y}_k \left(1 + \epsilon \frac{i}{\hbar} \phi_j \mathbf{Y}_j\right) = \left(\delta_{kl} + \epsilon \phi_j \epsilon_{jkl}\right) \mathbf{Y}_l \quad (4.24)$$

Diese Gleichung kann man umschreiben, indem man die Generatoren $\vec{\mathcal{G}}$ aus Abschnitt 3.1.1 benutzt, die im obigen Ausdruck den Tensor $\epsilon_{jkl} = -\epsilon_{kjl} = [\mathcal{G}_j]_{kl}$ ersetzen:

$$\left(1 - \epsilon \frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right) \vec{\mathbf{Y}} \left(1 + \epsilon \frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right) = \left(1 + \epsilon \vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}}\right) \vec{\mathbf{Y}} \quad (4.25)$$

Fasst man nun die runden Klammern als infinitesimale Transformationen auf, so kann man diese n -fach hintereinander ausführen, wobei man $\epsilon = 1/n$ setzt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{n\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right)^n \vec{\mathbf{Y}} \left(1 + \frac{i}{n\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}}\right)^n \vec{\mathbf{Y}} \quad (4.26)$$

Die Grenzwerte können ausgeführt werden und ergeben Exponentialfunktionen:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right) \vec{\mathbf{Y}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{Y}}\right) = \exp\left(\vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{G}}\right) \quad (4.27)$$

d.h.

$$\mathbf{U}_Y(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{Y}} \mathbf{U}_Y^{-1}(\vec{\phi}) = \mathcal{R}(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{Y}}. \quad (4.28)$$

Damit das Skalarprodukt in \mathcal{H}_{int} unter Drehungen invariant ist und sich das äußere Feld wie ein Vektor $\vec{B} \rightarrow \mathcal{R}(\phi)\vec{B}$ transformiert, müssen sich sowohl $\vec{\mathbf{L}}$ als auch $\vec{\mathbf{S}}$ wie Vektoren transformieren:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{\mathbf{L}} \rightarrow \mathcal{R}(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{L}} \\ \vec{\mathbf{S}} \rightarrow \mathcal{R}(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{S}} \end{array} \right\} \Rightarrow (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \rightarrow \mathcal{R}(\vec{\phi}) (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \quad (4.29)$$

Da $\vec{\mathbf{L}}$ und $\vec{\mathbf{S}}$ kommutieren, wird dies durch die unitäre Transformation (4.21) mit dem Gesamtdrehimpuls

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}. \quad (4.30)$$

erreicht. Dies ist der Generator physikalischer Drehungen, der sowohl die Wellenfunktion im Ortsraum als auch die Spinoren im Spinraum so transformiert, dass der Wechselwirkungsanteil in der Pauli-Gleichung invariant bleibt.

Welche Eigenschaften hat der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} ? Dazu muss man die Addition von Drehimpulsen beherrschen, die im folgenden Abschnitt besprochen wird.

Drehungen im Spinraum

Im vorangegangenen Kapitel wurde gezeigt, dass der Bahndrehimpulsoperator $\vec{\mathbf{L}}$ räumliche Drehungen erzeugt. Auf Abb. 4.2 bezogen würde also der Bahndrehimpuls über die Exponentialfunktion gemäß Gl. (3.16) unitäre Transformationen $\mathbf{U}_l(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{L}}}$ generieren, welche die abgebildete Wellenfunktion beispielsweise in der xy -Ebene räumlich drehen. Analog dazu erzeugt der Spinoperator $\vec{\mathbf{S}}$ mit Hilfe der Exponentialabbildung unitäre Transformationen

$$\mathbf{U}_s(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{S}}} = e^{-\frac{i}{2} \vec{\phi} \cdot \vec{\sigma}}, \quad (4.31)$$

die nur auf \mathcal{H}_s wirken und deren anschauliche Wirkungsweise darin besteht, die in Abb. 4.2 gezeigten gelben Pfeile in den inneren Räumen (rote Kugeln) zu drehen, während sie die räumliche Wellenfunktion ψ_l nicht modifizieren. Diese unitären Transformationen sind Elemente der Gruppe $SU(2)$.

Bemerkung: Mathematisch Versierte sollten hier stutzen: Warum erzeugen **L** und **S** Transformationen aus verschiedenen Gruppen (nämlich $SO(3)$ und $SU(2)$), wenn doch die Generatoren die gleichen Vertauschungsrelationen besitzen? Die Antwort lautet, dass die beiden Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$ zwar *lokal isomorph* sind, jedoch unterschiedliche globale (topologische) Eigenschaften besitzen. Da aber die Generatoren infinitesimale Transformationen erzeugen, können sie nur lokale Strukturen der Gruppe reflektieren. Diese stimmen bei $SO(3)$ und $SU(2)$ überein.

Als Beispiel betrachten wir eine Drehung um die z -Achse $\vec{\phi} = \phi \vec{e}_3$ und berechnen darstellungsfrei die dazugehörige unitäre Transformation (4.31), indem wir die Taylorreihe der Exponentialfunktion in gerade und ungerade Potenzen aufteilen:

$$\mathbf{U}_s(\phi) = \exp\left(-\frac{i}{2}\phi\sigma_3\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^k}{k!} \left(-\frac{i}{2}\right)^k \sigma_3^k \quad (4.32)$$

$$= \left[\sum_{k=0,2,4,\dots} \frac{\phi^k}{k!} \left(-\frac{i}{2}\right)^k \right] \mathbf{1} + \left[\sum_{k=1,3,5,\dots} \frac{\phi^k}{k!} \left(-\frac{i}{2}\right)^k \right] \sigma_3 \quad (4.33)$$

$$= \mathbf{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sigma_3 \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \quad (4.34)$$

Eine etwas aufwendigere Rechnung für beliebige Drehachsen $\vec{\phi}$ führt auf:

$$\mathbf{U}_s(\vec{\phi}) = \mathbf{1} \cos\left(\frac{|\vec{\phi}|}{2}\right) - \frac{\vec{\phi} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{\phi}|} \sin\left(\frac{|\vec{\phi}|}{2}\right) \quad (4.35)$$

Als überraschendes Resultat erhält man

$$\mathbf{U}_s(2\pi) = -\mathbf{1}, \quad \mathbf{U}_s(4\pi) = \mathbf{1}. \quad (4.36)$$

Eine Drehung um den Winkel 2π ist also **keine** identische Abbildung, sondern liefert eine quantenmechanische Phase -1 . Erst nach einer Drehung um 4π , also nach zwei vollen Umdrehungen, kommt das System wieder in seinen Ausgangszustand zurück. Diese überraschende Eigenschaft unterstreicht, dass das Phänomen Spin mit Begriffen der klassischen Physik nicht erklärbar ist.

Da quantenmechanische Phasen bei Messungen herausfallen, könnte man der Meinung sein, dass dieser Effekt sowieso nicht beobachtbar sei. Für Einzelmessungen an einem isolierten Teilchen trifft das auch zu. Anders verhält es sich aber, wenn man Interferenzexperimente an verschränkten Teilsystemen durchführt (diese Begriffe werden weiter unten erklärt), in denen man solche Phasenfaktoren nachweisen kann.

Eulersche Winkel

Unitäre Transformationen auf dem Spinraum, also Elemente der $SU(2)$, können auf unterschiedliche Weise parametrisiert werden. Die obige Parametrisierung durch einen Vektor

$\vec{\phi}$, dessen Länge den Winkel und dessen Richtung die Drehachse angibt, ist nur eine von vielen Möglichkeiten. Eine andere häufig benutzte Parametrisierung geschieht mit Hilfe der sogenannten *Eulerschen Winkel*. Diese Parametrisierung macht von der Tatsache Gebrauch, dass jede Drehung im \mathbb{R}^3 als Produkt dreier Drehungen um die drei Koordinatenachsen dargestellt werden kann. Weil Drehungen nichtkommutativ sind, kommt es dabei allerdings auf die Reihenfolge an. Die Eulerschen Winkel (α, β, γ) benutzen dabei folgende Konvention (die sogenannte *x-Konvention*):

1. Zuerst wird um die *z*-Achse mit dem Winkel α gedreht. Dabei ändern die *x*- und *y*-Achse ihre Lage.
2. Danach wird um die neue *y*-Achse um den Winkel β gedreht. Dabei ändern die *x*- und die *z*-Achse ihre Orientierung.
3. Schließlich wird um die neue *z*-Achse um den Winkel γ gedreht.

Merke: Eulersche Winkel: *z-y-z*

Im \mathbb{R}^3 entspricht dies einer 3×3 Rotationsmatrix

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & \sin \beta \\ 0 & -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta \sin \alpha \sin \gamma & -\sin \gamma \cos \alpha - \cos \beta \sin \alpha \cos \gamma & \sin \beta \sin \alpha \\ \cos \gamma \sin \alpha + \cos \beta \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \gamma \sin \alpha + \cos \beta \cos \alpha \cos \gamma & -\sin \beta \cos \alpha \\ \sin \gamma \sin \beta & \cos \gamma \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Die unitären Operatoren, die dieser Drehung entsprechen, lassen sich für Eulersche Winkel leicht aufstellen. Die Rotation im Ortsraum wird bewirkt durch

$$\mathbf{U}_l = e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \mathbf{L}_z} e^{-\frac{i}{\hbar} \beta \mathbf{L}_y} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{L}_z}, \quad (4.38)$$

während die entsprechende Transformation im Spinraum durch

$$\mathbf{U}_s = e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \mathbf{S}_z} e^{-\frac{i}{\hbar} \beta \mathbf{S}_y} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{S}_z}, \quad (4.39)$$

gegeben sind.

4.1.3 Addition von Drehimpulsen

Produktbasis

Wir betrachten nun zwei Drehimpulse $\vec{\mathbf{J}}_1$ und $\vec{\mathbf{J}}_2$, die paarweise miteinander kommutieren, d.h.

$$[\vec{\mathbf{J}}_{1,j}, \vec{\mathbf{J}}_{2,k}] = 0. \quad (4.40)$$

In der klassischen Mechanik ist die Addition von zwei Drehimpulsen $\vec{\mathbf{J}}_1$ und $\vec{\mathbf{J}}_2$ einfach, denn hier sind einfach die beiden Vektoren zu addieren. In der Quantentheorie ist die Drehimpulsaddition dagegen nichttrivial.

Die Operatoren $\vec{\mathbf{J}}_1$ und $\vec{\mathbf{J}}_2$ wirken auf zwei separate Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 Eigenzustände seien

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{J}}_1^2 |j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle, & \mathbf{J}_1^z |j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle \\ \vec{\mathbf{J}}_2^2 |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle, & \mathbf{J}_2^z |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle \end{aligned} \quad (4.41)$$

wobei wir der Übersichtlichkeit halber die Notation $\mathbf{J}_1^z := \mathbf{J}_{1,3}^z$ verwenden. Da die Operatoren paarweise kommutieren, kann man die vier Operatoren $\vec{\mathbf{J}}_1^2, \mathbf{J}_1^z, \vec{\mathbf{J}}_2^2, \mathbf{J}_2^z$ als maximalen Satz kommutierender Observable verwenden. Die gemeinsamen Eigenzustände sind dann die Tensorprodukte (siehe Anhang A.3)

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle_P := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle. \quad (4.42)$$

Damit steht eine orthogonale Basis von Zuständen für den Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ zur Verfügung, die auch als *Produktbasis* bezeichnet wird. Die entsprechenden Zustände werden im Folgenden mit dem Subscript $|\dots\rangle_P$ gekennzeichnet.

Gesamtdrehimpulsbasis

Wir betrachten nun die *Summe* der beiden Drehimpulsoperatoren

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{J}}_1 + \vec{\mathbf{J}}_2. \quad (4.43)$$

Wie man leicht überprüfen kann, erfüllen dessen Komponenten die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_j, \mathbf{J}_k] &= [\mathbf{J}_{1,j} + \mathbf{J}_{2,j}, \mathbf{J}_{1,k} + \mathbf{J}_{2,k}] \\ &= [\mathbf{J}_{1,j}, \mathbf{J}_{1,k}] + \underbrace{[\mathbf{J}_{1,j}, \mathbf{J}_{2,k}]}_{=0} + \underbrace{[\mathbf{J}_{2,j}, \mathbf{J}_{1,k}]}_{=0} + [\mathbf{J}_{2,j}, \mathbf{J}_{2,k}] \\ &= i\hbar\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_{1,l} + i\hbar\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_{2,l} = i\hbar\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_l, \end{aligned} \quad (4.44)$$

erfüllen also ebenfalls die Drehimpulsalgebra. Die Summe kommutierender Drehimpulse verhält sich also wiederum wie ein Drehimpuls.

Da sich nun die Summe $\vec{\mathbf{J}}$ wie ein Drehimpuls verhält, möchte man diesen gerne auf gewohnte Weise mit Quantenzahlen J, M beschreiben², indem man Eigenzustände der Operatoren $\vec{\mathbf{J}}^2$ und \mathbf{J}^z benutzt. Dazu benötigt man aber noch zwei weitere Operatoren, die gemeinsam mit $\vec{\mathbf{J}}^2$ und \mathbf{J}^z einen maximalen Satz kommutierender Observabler bilden. Allerdings kommen \mathbf{J}_1^z und \mathbf{J}_2^z dafür nicht in Frage, denn im Quadrat des Gesamtdrehimpulses

$$\vec{\mathbf{J}}^2 = \vec{\mathbf{J}}_1^2 + \vec{\mathbf{J}}_2^2 + 2\vec{\mathbf{J}}_1 \cdot \vec{\mathbf{J}}_2 \quad (4.45)$$

tritt ein gemischter Term auf, der nicht mit \mathbf{J}_1^z und \mathbf{J}_2^z kommutiert. Hingegen kommutieren die *Quadrate* der Einzeldrehimpulse $\vec{\mathbf{J}}_1^2$ und $\vec{\mathbf{J}}_2^2$ sowohl mit $\vec{\mathbf{J}}^2$ als auch mit \mathbf{J}^z . Verwendet man also als maximalen Satz kommutierender Observabler die Operatoren $\{\vec{\mathbf{J}}_1^2, \vec{\mathbf{J}}_2^2, \vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}^z\}$, so sind die entsprechenden Eigenzustände $|j_1, j_2; J, M\rangle_G$ durch die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{J}}_1^2 |j_1, j_2; J, M\rangle_G &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2; J, M\rangle_G \\ \vec{\mathbf{J}}_2^2 |j_1, j_2; J, M\rangle_G &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2; J, M\rangle_G \\ \vec{\mathbf{J}}^2 |j_1, j_2; J, M\rangle_G &= \hbar^2 J(J + 1) |j_1, j_2; J, M\rangle_G \\ \mathbf{J}^z |j_1, j_2; J, M\rangle_G &= \hbar M |j_1, j_2; J, M\rangle_G \end{aligned} \quad (4.46)$$

²Der besseren Unterscheidbarkeit wegen verwenden wir für diese beiden Quantenzahlen Grossbuchstaben J und M .

gegeben. Diese Eigenzustände bilden – wie alle Eigenzustände eines maximalen Satzes kommutierender Observabler – ein vollständiges orthogonales Basissystem, das hier als *Gesamtdrehimpulsbasis* bezeichnet wird. Die entsprechenden Zustände wollen wir mit $|\dots\rangle_P$ kennzeichnen.

Wertebereich der Quantenzahlen J und M

Nicht nur die Gesamtdrehimpulseigenzustände $|j_1, j_2; J, M\rangle$ sind Eigenzustände von \mathbf{J}^z , sondern auch die Produktzustände $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ in Gl. (4.42), wobei $M = m_1 + m_2$ ist. Einerseits ist für vorgegebenes j_1, j_2 der maximale Wert $M_{\max} = j_1 + j_2$, also $J \leq j_1 + j_2$. Andererseits ist die Entartung der Niveaus für $|M| \leq |j_1 - j_2|$ stets gleich, so dass keine Darstellungen mit $J < |j_1 - j_2|$ auftreten können. Dementsprechend kann die Quantenzahl J auf den Bereich

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (4.47)$$

eingegrenzt werden. Wie wir sehen werden, ist dies tatsächlich der volle Wertebereich. Die Quantenzahl M kann, wie üblich, Werte im Bereich

$$-J \leq M \leq +J \quad (4.48)$$

annehmen.

Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Sowohl die Produktzustände (4.42) als auch die Gesamtdrehimpulseigenzustände (4.46) sind orthogonale Basen des Hilbertraums. Nimmt man an, dass diese Zustände normiert sind, so kann man die Gesamtdrehimpulsbasis nach der Produktbasis entwickeln:

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \underbrace{\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2|}_{=1} |j_1, j_2; J, M\rangle \quad (4.49)$$

Die dabei auftretenden Matrixelemente

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M \rangle}_{=: \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \quad (4.50)$$

werden als *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* bzw. *Vektoradditionskoeffizienten* bezeichnet. Die Phase dieser Matrixelemente ist unbestimmt und kann so gewählt werden, dass alle Clebsch-Gordan-Koeffizienten reell sind. Wir können deshalb die CG-Koeffizienten ohne komplexe Konjugation spiegeln:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = \langle JM | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \quad (4.51)$$

Bemerkung: Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$ sind in der Quantenmechanik oft benötigte Zahlen, die deshalb in *Mathematica*[®] bereits mit der Funktion

`ClebschGordan[{j1,m1},{j2,m2},{J,M}]`

zur Verfügung stehen.

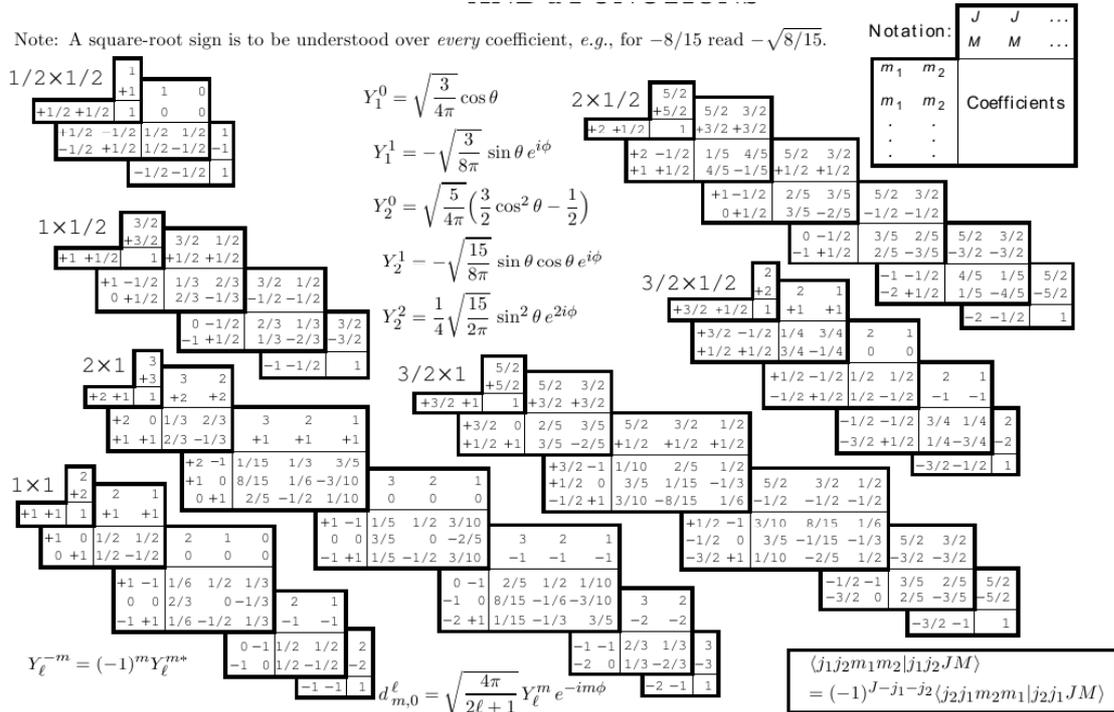


Abbildung 4.3: Tabelle einiger Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Aus jedem der Einträge ist die Wurzel zu ziehen. Quelle: D.E. Groom et al., The European Physical Journal C15 (2000) 1.

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind die Matrixelemente einer unitären Transformation \mathbf{U} welche die Produktbasis in die Gesamtdrehimpulsbasis überführt, und erfülle deshalb die Relation $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}$. Diese Eigenschaft führt zu den beiden Orthogonalitätsrelationen

$$\sum_{J,M} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle \langle J M | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} \quad (4.52)$$

$$\sum_{m_1, m_2} \langle J M | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{J, J'} \delta_{M, M'} \quad (4.53)$$

Da $\mathbf{J}^z = \mathbf{J}_1^z + \mathbf{J}_2^z$ ist, sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle$ nur dann von Null verschieden, wenn $M = m_1 + m_2$ ist.

Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Die CG-Koeffizienten lassen sich wie folgt berechnen. Ausgangspunkt ist die Beobachtung, dass der Eigenzustand für maximale Magnetquantenzahlen eindeutig ist, dass also für gegebenes j_1, j_2 der Eigenzustand höchsten Gewichts in der Produktbasis $|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$ auch Eigenzustand in der Gesamtdrehimpulsbasis ist:

$$|j_1, j_2; J, M\rangle_G = |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle_P \quad \text{mit } J = M = j_1 + j_2 \quad (4.54)$$

Dabei wurden zur besseren Kennzeichnung die Basisvektoren mit G (Gesamtdrehimpulsbasis) und P (Produktbasis) gekennzeichnet. Da nun ein gemeinsamer Eigenzustand bekannt ist, können die übrigen Zustände durch sukzessive Anwendung des Absteigeoperators $\mathbf{J}_- = \mathbf{J}_{1,-} + \mathbf{J}_{2,-}$ konstruiert werden. Wenden wir diesen Operator auf beide Seiten

der obigen Gleichung an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_- |j_1, j_2; J, M\rangle_G &= \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_G \\ &= \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle_P + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1; j_2, j_2 - 1\rangle_P. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Ein Vergleich ergibt die CG-Koeffizienten

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_1 - 1; j_2, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}, \\ \langle j_1, j_1; j_2, j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle &= \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Zur Quantenzahl $M = j_1 + j_2 - 1$ gibt es in der Gesamtdrehimpulsbasis genau zwei Eigenzustände, nämlich den soeben bestimmten Zustand mit $J = j_1 + j_2$ und einen weiteren Zustand mit $J = j_1 + j_2 - 1$, die beide orthogonal aufeinander stehen müssen. Da man in zwei Dimensionen einen Vektor um 90° drehen kann, indem man die Komponenten tauscht und eine mit einem Minuszeichen versieht, erhält man sofort

$$\begin{aligned} \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1, j_2; j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_G \\ = \sqrt{2j_2} |j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle_P - \sqrt{2j_1} |j_1, j_1; j_2, j_2 - 1\rangle_P \end{aligned} \quad (4.57)$$

und die entsprechenden CG-Koeffizienten lauten

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_1 - 1; j_2, j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle &= \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}, \\ \langle j_1, j_1; j_2, j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle &= -\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Wendet man nun auf die so gewonnenen Vektoren erneut den Absteigeoperator an und führt einen (immer komplexer werdenden) Koeffizientenvergleich durch, so lassen sich sukzessive alle Clebsch-Gordan-Koeffizienten konstruieren.

Bemerkung: Man kann zeigen (ohne Beweis), dass die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für $M \geq 0$ durch die geschlossene Formel

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle &= \delta_{m, m_1 + m_2} \sqrt{\frac{(2J+1)(J+j_1-j_2)!(J-j_1+j_2)!(j_1+j_2-J)!(J+M)!(J-M)!}{(j_1+j_2+J+1)!(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!}} \\ &\quad \times \sum_{k=0}^{J+M} (-1)^{k+j_2+m_2} \frac{(j_2+J+m_1-k)!(j_1-m_1+k)!}{k!(J-j_1+j_2-k)!(J+M-k)!(k+j_1-j_2-M)!} \end{aligned} \quad (4.59)$$

gegeben sind. Die Koeffizienten für $M < 0$ ergeben sich durch

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1 - j_2} \langle j_1, -m_1; j_2, -m_2 | J, -M \rangle. \quad (4.60)$$

Beispiel: Zwei Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$:

In diesem Fall sind die Drehimpulseigenzustände der einzelnen Teilchen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, die Produktbasis besteht also aus den vier Zuständen $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$. Der Gesamtdrehimpuls kann die beiden Werte $J = 0$ und $J = 1$ annehmen, die Gesamtdrehimpulsbasis

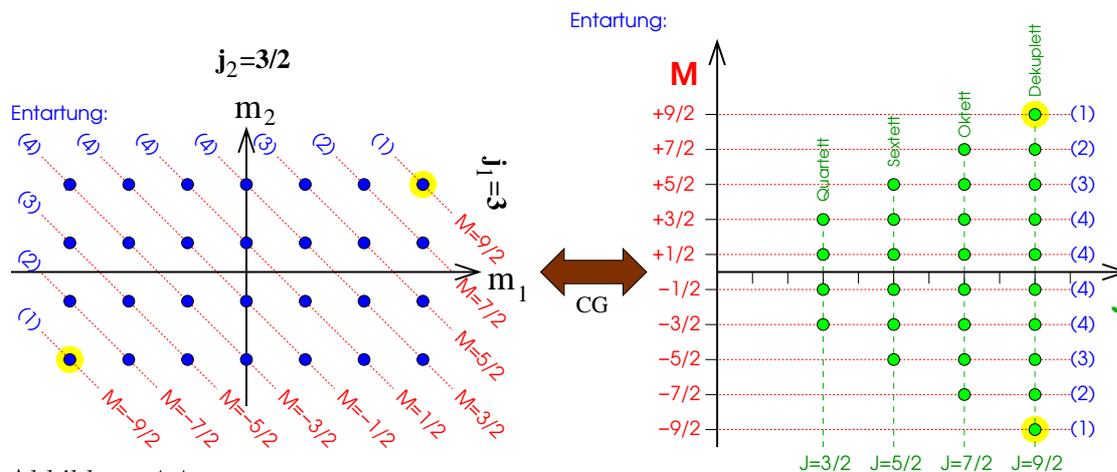


Abbildung 4.4: Schema zur Bestimmung der Darstellungen bei der Addition zweier Drehimpuls. Gezeigt ist das Beispiel $j_1 = 3/2$ und $j_2 = 3$. Die blauen Punkte im linken Teil der Abbildung symbolisieren die Vektoren in der Produktbasis, die grünen Punkte im rechten Teil der Abbildung dagegen die Vektoren der Gesamtdrehimpulsbases. Der Gesamtdrehimpuls nimmt dabei die Werte $J = 3/2, 5/2, 7/2, 9/2$ an und führt dabei zu einer Zerlegung in ein Quartett, ein Sextett, ein Oktett und ein Dekuplett. Die Clebsch-Gordon-Transformation ist eine Basistransformation zwischen beiden Darstellungen, durch die die Zustände in Sektoren für jeweils gleiches $M = m_1 + m_2$ (gestrichelte rote Linien) gemischt werden. Nur die gelb markierten Basisvektoren sind in beiden Darstellungen identisch.

$|J, M\rangle$ besteht also aus einem Singulett

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{4.61}$$

und einem Triplett

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\rangle\uparrow \tag{4.62}$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{4.63}$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\rangle\downarrow \tag{4.64}$$

Die Zerlegungsregel lautet also

$$2 \otimes 2 = 1 \oplus 3. \tag{4.65}$$

Beispiel: Spin $\frac{1}{2}$ plus Bahndrehimpuls $l > 0$:

Der Gesamtdrehimpuls kann hier die Werte $J = l \pm 1/2$ annehmen. Die Zerlegungsregel lautet also

$$2 \otimes (2l + 1) = 2l \oplus (2l + 2). \tag{4.66}$$

Die dazugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten kann man beispielsweise einer Tabelle (siehe Abb. 4.3) entnehmen.

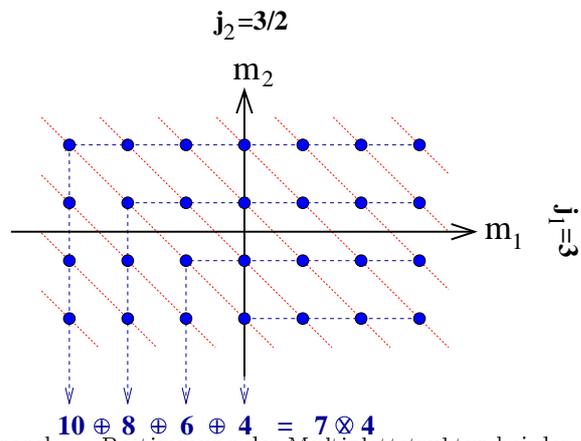


Abbildung 4.5: Faustregel zur Bestimmung der Multiplettstruktur bei der Addition von Drehimpulsen. Gezeigt ist wie in der vorhergehenden Abbildung das Beispiel $j_1 = 3/2$ und $j_2 = 3$. Dazu zählt man die Zustände entlang der gestrichelten blauen über Eck verlaufenden Linien. Diese Linien darf man aber nicht als Zuordnung von Zuständen missverstehen.

5 Vielteilchensysteme

5.1 Symmetrien von Vielteilchenzuständen

Bisher haben wir einfache quantenmechanische Systeme untersucht, die sich aus einem einzigen Teilchen oder zwei unterscheidbaren Teilchen (z.B. Kern und Hüllenelektron) zusammensetzen. In diesem Kapitel wollen wir nun Systeme *identischer* Teilchen betrachten wie z.B. ein Gas. Hier ergibt sich in der Quantentheorie ein grundlegendes Problem, das es in der klassischen Mechanik nicht gibt. In der klassischen Physik sind nämlich identische Teilchen unterscheidbar. Jedem Teilchen kann nämlich eine eindeutige Trajektorie zugeordnet werden, auf der es sich bewegt, und so kann man in Gedanken jedes Teilchen markieren und vorhersagen, wo es zu welcher Zeit sein wird. In der Quantentheorie werden dagegen Teilchen durch Wellenfunktionen repräsentiert, die sich räumlich überschneiden können. Führt man nun in einem solchen Überlappungsbereich eine Messung durch, mit der die Anwesenheit eines Teilchens festgestellt wird, so gibt es keine Möglichkeit, die beteiligten Teilchen zu unterscheiden, da man sie nicht individuell verfolgen kann (siehe Cartoon in Abb. 5.1). Die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen führt zu einem grundlegenden konzeptionellen Problem in der Quantentheorie, das mit dem Begriff *Austauschentartung* umschrieben wird.

5.1.1 Konstruktion des Hilbertraums

Die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen führt zu einem grundlegenden konzeptionellen Problem in der Quantentheorie, das mit dem Begriff *Austauschentartung* umschrieben wird. Dazu betrachten wir der Einfachheit halber ein System mit zwei identischen Teilchen. Das erste Teilchen lebe im Hilbertraum \mathcal{H}_1 und habe den Zustand $|\alpha\rangle$, das zweite

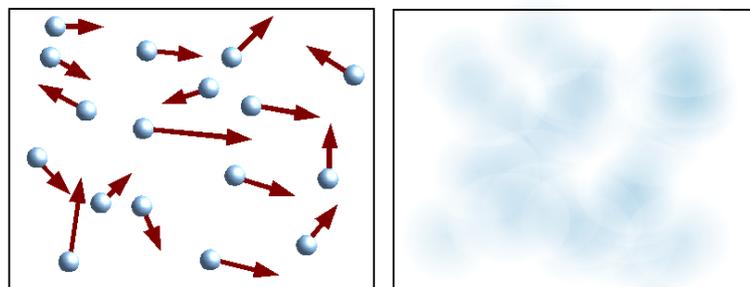


Abbildung 5.1: Cartoon eines klassischen Vielteilchensystems (links) und eines quantenmechanischen Vielteilchensystems (rechts). Während im klassischen Fall eine Unterscheidbarkeit identischer Teilchen durch Nachverfolgung ihrer Trajektorien gewährleistet ist, sind identische Teilchen in gegenseitig überlappenden quantenmechanischen Wellenfunktionen nicht unterscheidbar.

lebe im Hilbertraum \mathcal{H}_2 und habe den Zustand β . Der gesamte Hilbertraum ist also durch das Tensorprodukt (siehe Anhang A.3)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (5.1)$$

gegeben und das System befindet sich im Zustand

$$|\alpha, \beta\rangle := |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \quad (5.2)$$

Wenn wir den Spin der der Teilchen noch außen vor lassen, die jeweiligen Einteilchenzustände also durch die Wellenfunktionen $\psi_\alpha(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \alpha \rangle$ und $\psi_\beta(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \beta \rangle$ gegeben sind, so wird das gesamte System durch die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha\beta}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha, \beta \rangle = \left(\langle \vec{x}_1 | \otimes \langle \vec{x}_2 | \right) \left(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \right) \\ &= \langle \vec{x}_1 | \alpha \rangle \langle \vec{x}_2 | \beta \rangle = \psi_\alpha(\vec{x}_1) \psi_\beta(\vec{x}_2) \end{aligned} \quad (5.3)$$

beschrieben. Würden beide Teilchen ihre Rolle tauschen, erhielte man dagegen den Zustand

$$|\beta, \alpha\rangle := |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle \quad (5.4)$$

Die beiden Vektoren $|\alpha\beta\rangle$ und $|\beta\alpha\rangle$ repräsentieren verschiedene Systemzustände, die orthogonal aufeinander stehen:

$$\langle \alpha\beta | \beta\alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle = 0. \quad (5.5)$$

Hier scheinen also die Teilchen noch identifizierbar zu sein, denn das erste Teilchen ist stets dem linken Faktor zugeordnet, das zweite dem rechten.

5.1.2 Messungen

Das Problem besteht jedoch darin, dass es kein Messgerät gibt, das in der Lage wäre, die beiden Zustände $|\alpha, \beta\rangle$ und $|\beta, \alpha\rangle$ zu unterscheiden. Wir können nämlich kein Messgerät konstruieren, das uns sagt, *welches* Teilchen am Ort \vec{x} ist, sondern allenfalls ein Messgerät, das uns sagt, *ob und wie viele* Teilchen am Ort \vec{x} sind.

Bemerkung: Der Hintergrund ist der, dass die beiden Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 nicht so unabhängig voneinander sind, wie es vielleicht auf den ersten Blick erscheinen mag, denn ihre Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ repräsentieren Wellenfunktionen im *selben* Ortsraum. Es gibt nämlich nur einen Ortsraum \mathbb{R}^3 , in dem die Teilchen leben. Wirklich unabhängig wären die beiden Tensorfaktoren nur, wenn sich \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 auf zwei verschiedene \mathbb{R}^3 's beziehen würden. Den Zustandsraum \mathcal{H} würde man zwar in genau derselben Weise wie oben beschrieben konstruieren, man hätte jedoch dann zwei voneinander getrennte Universen mit je einem Teilchen, die dann auf natürliche Weise unterscheidbar bleiben. Nur dadurch, dass sich die Tensorfaktoren \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 den gleichen \mathbb{R}^3 'teilen' müssen, kommt es zu dem in diesem Kapitel behandelten Problem der Ununterscheidbarkeit.

Ein Messgerät ist nämlich so konstruiert, dass es mit dem zu untersuchenden Quantensystem zunächst physikalisch wechselwirkt und das Resultat dieser Wechselwirkung dann so weit verstärkt, dass es makroskopisch sichtbar wird. Die erste Stufe – die physikalische

Wechselwirkung – kann aber zwischen identischen Teilchen nicht unterscheiden. Ein Ladungsmessgerät wird deshalb auf *jedes* Elektron, ein Photomultiplier auf *jedes* Photon, in gleicher Weise ansprechen.

Mathematisch kann dieser Sachverhalt dadurch ausgedrückt werden, dass die Observable \mathbf{A} eines Messgeräts mit dem *Transpositionsoperator* \mathbf{T}_{12} kommutieren muss. Der Transpositionsoperator ist so definiert, dass er im obigen Beispiel die beiden Teilchen tauscht, d.h. er vertauscht die Reihenfolge der Tensorfaktoren:

$$\mathbf{T}_{12} |\alpha, \beta\rangle = |\beta, \alpha\rangle. \quad (5.6)$$

Für identische Teilchen kommutiert dieser Operator mit jeder Observablen \mathbf{A} , also auch mit dem Hamiltonian:

$$[\mathbf{T}_{12}, \mathbf{A}] = [\mathbf{T}_{12}, \mathbf{H}] = 0. \quad (5.7)$$

Beispiel: In einem Einteilchensystem kann man mit dem Projektionsoperator $\mathbf{a} := |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ die Wahrscheinlichkeitsdichte messen, am Ort \vec{x} ein Teilchen zu finden. Wie konstruiert man daraus den entsprechenden Operator für zwei identische Teilchen? Die obigen Argumente besagen, dass z.B. der hermitesche Operator $\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{1}$ kein Messgerät repräsentieren kann, da er nicht mit \mathbf{T}_{12} vertauscht. Ein solches Messgerät würde nämlich selektiv nur auf das erste Teilchen ansprechen, was bei identischen Teilchen mittels einer physikalischen Wechselwirkung unmöglich ist. Zulässig sind dagegen ist der Operator

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{a} \quad (5.8)$$

mit den Eigenwerten 0, 1, 2, der uns die Möglichkeit bietet, die Wahrscheinlichkeitsdichte für eine gewisse Anzahl von Teilchen in einem Punkt zu bestimmen. Zulässig wäre auch der Operator

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{a} \quad (5.9)$$

mit den Eigenwerten 0, 1, mit dem die Wahrscheinlichkeitsdichte gemessen werden kann, am Ort \vec{x} genau zwei Teilchen zu finden. Auch der Operator

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{a} - \mathbf{a} \otimes \mathbf{a} \quad (5.10)$$

wäre zulässig, da er mit \mathbf{T}_{12} kommutiert und in diesem Fall die Wahrscheinlichkeitsdichte angeben würde, genau ein Teilchen, jedoch nicht zwei, am Ort \vec{x} zu finden.

5.1.3 Austauschentartung

Bei N identischen Teilchen ohne innere Wechselwirkung setzt sich der Ortsoperator additiv aus N gleichartigen Einteilchenoperatoren \mathbf{h} zusammen:

$$H_i = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \underbrace{\otimes \mathbf{h} \otimes}_{i\text{-ter Faktor}} \dots \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad (5.11)$$

$$H = \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_i. \quad (5.12)$$

wobei $\mathbf{1}$ die identische Abbildung auf nur einem Teilchen, also eine Einheitsmatrix von derselben Dimension wie \mathbf{h} ist. Beispielsweise gilt für drei Teilchen

$$\mathbf{H} = \mathbf{h} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{h} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{h}. \quad (5.13)$$

Dieser Hamiltonoperator ist, wie bereits oben gezeigt, invariant unter der Vertauschung von Teilchen, d.h.

$$[\mathbf{T}_{12}, \mathbf{H}] = 0. \quad (5.14)$$

Dieser Sachverhalt wird als *Austauschentartung* bezeichnet.

5.1.4 Eigenschaften des Transpositionsoperators

Wir betrachten jetzt etwas allgemeiner ein System aus N identischen Teilchen in den Einzelzuständen $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_N\rangle$. Der Gesamtzustand im Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N =: \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}_j \quad (5.15)$$

wäre dann der Produktzustand

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle := |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle. \quad (5.16)$$

Die Wirkungsweise des *Transpositionsoperator* \mathbf{T}_{ij} besteht nun darin, die beiden Teilchen i und j auszutauschen, also die i -te und die j -te Tensorkomponente zu vertauschen:

$$\mathbf{T}_{ij}|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle = |\alpha_1, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle \quad (5.17)$$

Der Transpositionsoperator ist hermitesch und erfüllt die Relationen

$$\mathbf{T}_{ij} = \mathbf{T}_{ji}, \quad \mathbf{T}_{ij}^2 = \mathbf{1}. \quad (5.18)$$

Wegen der zweiten Relation besitzt er die Eigenwerte 1 und -1 . Ein Produktzustand $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$ ist, wie wir gesehen haben, im Allgemeinen *kein* Eigenzustand des Transpositionsoperators. Wir können aber durch *Symmetrisierung* und *Antisymmetrisierung* solche Eigenzustände konstruieren. So ist die symmetrische Kombination

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle + |\alpha_1, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle \right) \quad (5.19)$$

ein Eigenzustand von \mathbf{T}_{ij} zu dem Eigenwert $+1$, während die antisymmetrische Kombination

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle - |\alpha_1, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle \right) \quad (5.20)$$

der entsprechende Eigenzustand zum Eigenwert -1 ist.

In Systemen mit N Teilchen gibt es $N(N-1)/2$ Transpositionsoperatoren. Diese kommutieren paarweise, wenn sie auf verschiedenen Tensorfaktoren wirken

$$[\mathbf{T}_{ij}, \mathbf{T}_{kl}] = 0 \quad \text{falls } i \neq k, i \neq l, j \neq k, j \neq l \quad (5.21)$$

andernfalls ist der Kommutator ungleich Null.

5.1.5 Symmetrisierungspostulat

Die Besonderheit des Transpositionsoperators besteht darin, dass es trotz seiner Hermitizität unmöglich ist, ein Messgerät zu konstruieren, das den Transpositionsoperator repräsentiert. Wir sind deshalb nicht in der Lage, den maximalen Satz kommutierender Observabler zu konstruieren, der notwendig wäre, um Zustände eindeutig zu charakterisieren – ein Phänomen, das als *Austauschentartung* bezeichnet wird. Wie können wir dieses Problem lösen?

Die Antwort ist überraschend: Die Natur löst das Problem für uns, indem sie für jede Teilchensorte den Eigenwert von \mathbf{T}_{ij} fest schreibt. Dies bedeutet, dass für eine gegebene Teilchensorte von allen denkbaren Zuständen, die durch Transposition auseinander hervorgehen, diejenige Linearkombination realisiert ist, die Eigenzustand *aller* Transpositionsoperatoren zum *gleichen* Eigenwert ist. Teilchensorten, für den diese Eigenwerte stets $+1$ sind, heißen *Bosonen*, Teilchensorten mit zugeordneten Eigenwerten -1 dagegen *Fermionen*. Die Natur ist also so beschaffen, dass es nur Zustände gibt, so dass für alle $i, j = 1, \dots, N$ gilt:

$$T_{ij}|N \text{ identische Bosonen}\rangle = +|N \text{ identische Bosonen}\rangle \quad (5.22)$$

$$T_{ij}|N \text{ identische Fermionen}\rangle = -|N \text{ identische Fermionen}\rangle \quad (5.23)$$

Ein Elektron ist beispielsweise ein Fermion, ein Photon dagegen ein Boson. Es ist eine empirische Tatsache, dass nur diese beiden Möglichkeiten gibt, dass es also keine quantenmechanischen Mischungen aus Fermionen und Bosonen auftreten.

Bemerkung: Es stellt sich heraus, dass Teilchen mit ganzzahligem Spin stets Bosonen, Teilchen mit halbzahligem Spin stets Fermionen sind. Diesen Zusammenhang kann man im Rahmen relativistischer Quantenfeldtheorien verstehen. Dennoch gibt es Versuche, diese Theorien so zu erweitern, dass Fermionen und Bosonen symmetrisch für jede Teilchenart auftreten, dass es also auch bosonische Elektronen gibt. Diese Symmetrie wird als *Supersymmetrie* bezeichnet und postuliert für jedes Teilchen einen Superpartner, also für jedes Boson ein zugehöriges Fermion und umgekehrt. Ein direkter Nachweis solcher Teilchen ist bislang nicht gelungen, es wird spekuliert, ob die sogenannte dunkle Materie im Universum etwas damit zu tun hat. Ebenso wird LHC (Large Hadron Collider, Genf) ab 2008 Hinweise liefern, ob Supersymmetrie in der Natur verwirklicht ist oder nicht.

5.1.6 (Anti-)Symmetrisierungsoperator

Eine N -stellige *Permutation* σ ist eine Umordnung von N Elementen $i \rightarrow \sigma(i)$. Die $N!$ möglichen Permutationen bilden dabei eine endliche Gruppe, die als S_N bezeichnet wird. Jede Permutation lässt sich als eine Hintereinanderausführung von Transpositionen $i \leftrightarrow j$ darstellen. Je nachdem, ob die Anzahl der benötigten Transposition gerade oder ungerade ist, spricht man von einer geraden ($\text{sgn}(\sigma) = +1$) oder ungeraden ($\text{sgn}(\sigma) = -1$) Permutation.

Unter einem *vollständig symmetrisierten Zustand* versteht man die normierte Summe aller möglichen N -Teilchen-Zustände, die durch Permutation der Teilchen auseinander hervorgehen:

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \bigotimes_{i=1}^N |\alpha_{\sigma(i)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} |\alpha_{\sigma(1)}, \alpha_{\sigma(2)}, \dots, \alpha_{\sigma(N)}\rangle. \quad (5.24)$$

Auf analoge Weise versteht man unter einem *vollständig antisymmetrisierten Zustand* die normierte Summe

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) \bigotimes_{i=1}^N |\alpha_{\sigma(i)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) |\alpha_{\sigma(1)}, \alpha_{\sigma(2)}, \dots, \alpha_{\sigma(N)}\rangle. \quad (5.25)$$

Da die Determinante einer Matrix $M_{i,j}$ formal durch $\det(M) = \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) \prod_i M_{i,\sigma(i)}$ ausgedrückt werden kann, schreibt man den vollständig antisymmetrisierten Zustand auch gerne in Form einer sogenannten *Slater-Determinante*

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\alpha_1\rangle & |\alpha_1\rangle & \dots & |\alpha_1\rangle \\ |\alpha_2\rangle & |\alpha_2\rangle & \dots & |\alpha_2\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |\alpha_N\rangle & |\alpha_N\rangle & \dots & |\alpha_N\rangle \end{vmatrix} \quad (5.26)$$

wobei die Multiplikation durch Tensorproduktbildung zu ersetzen ist.

Da Symmetrisierung und Antisymmetrisierung lineare Operationen sind, die sich als Summe über Produkte von Transpositionsoperatoren darstellen lassen, führt man formal einen *Symmetrisierungsoperator* \mathbf{S} und einen *Antisymmetrisierungsoperator* \mathbf{A} ein:

$$|\psi_S\rangle = \mathbf{S}|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \quad (5.27)$$

$$|\psi_A\rangle = \mathbf{A}|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \quad (5.28)$$

Die so erzeugten vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Zustände sind Eigenzustände *aller* Transpositionsoperatoren

$$\mathbf{T}_{ij}|\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle \quad (5.29)$$

$$\mathbf{T}_{ij}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (5.30)$$

Bemerkung: Das Symmetrisierungspostulat besagt also, dass die Natur so beschaffen ist, dass in dem $N!$ -dimensionalen Raum der Austauschentartung nur genau ein Zustand auftritt, nämlich in Abhängigkeit von der betrachteten Teilchensorte entweder $|\psi_S\rangle$ oder $|\psi_A\rangle$. Durch diesen Mechanismus wird die Austauschentartung aufgehoben und die beschriebenen konzeptionellen Probleme bei der Charakterisierung der Zustände beseitigt. Offen bleibt, wie die Natur dies bewerkstelligt. Als anschauliche Hilfe könnte man sich vorstellen, dass die Teilchen bei überlappenden Wellenfunktionen tatsächlich ihre Identität wechseln können, dass sich die Natur deshalb in einem Zustand einpendelt, der neutral gegenüber diesen fortwährenden Wechselprozessen ist. Bei Bosonen geschieht der Wechsel ohne Änderung der Wellenfunktion, während bei Fermionen jeder Wechsel eine quantenmechanische Phase von $e^{i\pi} = -1$ mit sich bringt.

5.1.7 Pauli-Prinzip

Aus dem Antisymmetrisierungspostulat ergibt sich sofort, dass Fermionen nur in verschiedenen Einteilchenzuständen existieren können. Zwei Fermionen müssen sich also stets in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden. Bosonen dagegen können sich in gleichen Einteilchenzuständen befinden.

Das Pauli-Prinzip hat dramatische Auswirkungen auf die Besetzungsstatistik der Energieniveaus. In einem harmonischen Potential würden sich beispielsweise mehrere Bosonen (bei Temperatur $T = 0$) gemeinsam im Grundzustand befinden (man spricht auch von einem Bose-Kondensat), während bei Fermionen die ersten N Energieniveaus bis zur sogenannten Fermi-Kante besetzt werden müssen.

Abbildung 5.2: Periodensystem der Elemente.

Bemerkung: Im Standardmodell sind alle Elementarteilchen (Elektronen, Neutrinos, Quarks) Fermionen, während die zugeordneten Eichfelder (Photonen, Vektorbosonen, Gluonen) Bosonen sind.

5.1.8 Periodensystem der Elemente

Mit Hilfe des Pauli-Prinzips kann man die Schalenstruktur der Atome und damit das Periodensystem der Elemente erklären. In niedrigster Näherung bewegt sich jedes Elektron im Zentralfeld des Atomkerns und befindet sich deshalb in wasserstoffähnlichen Niveaus, die durch die Quantenzahlen \tilde{n}, l, m_l, m_s charakterisiert werden (siehe Gl. (3.122)). Wegen des Pauli-Prinzips kann aber ein Zustand mit vorgegebenem n nur mit einer beschränkten Anzahl von Elektronen besetzt werden, die sich in ihren Quantenzahlen l, m_l, m_s unterscheiden. Diese Quantenzahlen müssen zudem die Auswahlregeln

$$\begin{aligned}
 l &\in \{0, 1, \dots, n - 1\} \\
 m_l &\in \{-l, -l + 1, \dots, l - 1, l\} \\
 m_s &\in \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}
 \end{aligned}
 \tag{5.31}$$

erfüllen, so dass es zu einer Schalenstruktur kommt. Die \tilde{n} -te Schale ist vollständig aufgefüllt, wenn sie mit

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2
 \tag{5.32}$$

Elektronen in paarweise verschiedenen Zuständen aufgefüllt ist. Für die Besetzung der durch die Hauptquantenzahl $n = \tilde{n} + l + 1$ charakterisierten Elektronenzustände gilt also:

n	Schale	Niveaus	maximale Besetzungszahl
1	K	$1s$	2
2	L	$2s, 2p$	$2 + 2 \cdot 3 = 8$
3	M	$3s, 3p, 3d$	$2 + 2 \cdot 3 + 2 \cdot 5 = 18$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Dies entspricht bis auf einen durch den Spinfreiheitsgrad verursachten Faktor 2 den in Abb. 3.3 angegebenen Entartungen.

5.1.9 Helium-Atom

Das einfachste Beispiel für ein Mehrteilchenproblem und die Wirkung des Pauli-Prinzips ist das Helium-Atom

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}_1^2}{2m} + \frac{\vec{\mathbf{P}}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (5.33)$$

wobei $r_1 = |\vec{\mathbf{X}}_1|$, $r_2 = |\vec{\mathbf{X}}_2|$ und $r_{12} = |\vec{\mathbf{X}}_1 - \vec{\mathbf{X}}_2|$ ist. Die gesamte Wellenfunktion besteht aus einem räumlichen und einem Spinanteil:

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (5.34)$$

Die beiden Elektronenspins addieren sich zu einem Gesamtspin $|\chi_{s,m_s}\rangle$ und bilden nach dem Additionstheorem für Drehimpulse einen symmetrischen $s = 1$ *Triplet-Zustand*

$$|\chi_{11}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\chi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle), \quad |\chi_{1-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.35)$$

und einen antisymmetrischen $s = 0$ *Singulett-Zustand*

$$|\chi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (5.36)$$

Ebenso addieren sich die beiden Bahndrehimpulse l_1, m_1, l_2, m_2 zu einem Bahndrehimpuls l, m_l des Gesamtsystems. Da wir uns hier auf den Grundzustand des Heliumatoms beschränken wollen, sind aber die Bahndrehimpulse gleich Null und die Hauptquantenzahlen sind gleich 1. Die beiden Elektronen befinden sich also jeweils im Grundzustand $|n_1, l_1, m_1\rangle = |n_2, l_2, m_2\rangle = |1, 0, 0\rangle$ und der entsprechende Zustandsvektor

$$|\psi_0\rangle = |1, 0, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle \quad (5.37)$$

ist symmetrisch unter Teilchenaustausch. Da aber dem Pauli-Prinzip zufolge der Gesamtzustand eines Fermionensystems antisymmetrisch sein muss, muss der dazugehörige Spinanteil der Wellenfunktion antisymmetrisch sein. Der Grundzustand

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\chi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{|1, 0, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle}_{\text{Ortsanteil}} \otimes \underbrace{(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)}_{\text{Spinanteil}} \quad (5.38)$$

Da man eine antisymmetrische Kombination der Ortswellenfunktion nicht konstruieren kann, ist der Grundzustand des Heliumatoms ein Singulettzustand.

5.1.10 Statistiken*

Das Symmetrisierungspostulat hat auch weitreichende Konsequenzen im Hinblick auf die statistische Physik. In der statistischen Physik ist die Charakterisierung des Zustandsraums eine der wesentlichen Komponenten und wird in der Regel in Form einer Zustandssumme ausgedrückt. Je nachdem, ob klassische Teilchen, Bosonen oder Fermionen angenommen werden, sind die Zustände auf unterschiedliche Weise abzuzählen. An dieser Stelle soll nur erwähnt sein, dass dies auf drei unterschiedliche Statistiken führt, nämlich:

- Maxwell-Boltzmann-Statistik für klassische Teilchen
- Bose-Einstein-Statistik für Bosonen
- Fermi-Dirac-Statistik für Fermionen

6 Näherungsmethoden

Die in diesem Skript und anderen Büchern dargestellte Quantentheorie dreht sich immer wieder um einige wenige konkrete Beispiele, vor allem um den harmonischen Oszillator und das Wasserstoffatom. Die exakte Lösbarkeit ist in der Quantentheorie aber eher eine Ausnahme, schon einfache Atome mit mehr als einem Elektron sind zwar noch im Prinzip, jedoch nicht mehr praktisch exakt lösbar. Wir verfügen also über eine Gleichung (Paule- bzw. Dirac-Gleichung), die uns im Prinzip das gesamte Periodensystem der Elemente liefert, exakt lösbar ist aber nur das Wasserstoffatom. Für komplexere Probleme ist man deshalb auf geeignete *Näherungsverfahren* angewiesen¹. Wir wollen uns in diesem Kapitel mit den einfachsten Näherungsverfahren befassen.

6.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

6.1.1 Formulierung des Problems

Gegeben sei ein Hamiltonoperator, der sich wie folgt zerlegen lässt:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1. \quad (6.1)$$

Dabei ist \mathbf{H}_0 ein ‘einfacher’ Bestandteil des Hamiltonoperators, dessen Eigenschaften bekannt sind, der sich also z.B. exakt lösen lässt. Der andere Bestandteil \mathbf{H}_1 wird als *Störung* bezeichnet, wobei der sogenannte *Störparameter* $\lambda \in \mathbb{R}$ die Stärke der Störung bestimmt. Wir wollen zunächst annehmen, dass die Störung \mathbf{H}_1 zeitunabhängig ist.

Beispiel: Für ein Teilchen in einem anharmonischen Potential $V(x) = ax^2 + \lambda x^4$ ist beispielsweise $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + ax^2$ und $\mathbf{H}_1 = x^4$. Das ungestörte Problem $\lambda = 0$, also der harmonische Oszillator, ist exakt lösbar, während der allgemeine Fall $\lambda \neq 0$ nicht exakt lösbar ist.

Wir wollen nun annehmen, dass das ungestörte Problem $\lambda = 0$ gelöst sei, dass also die Eigenvektoren $|n^{(0)}\rangle$ und die Eigenwerte $E_n^{(0)}$ des Eigenwertproblems

$$\mathbf{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (6.2)$$

bekannt seien. Die Eigenvektoren seien bereits korrekt normiert, so dass sie ein vollständiges Basissystem bilden, d.h.

$$\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{mn} \quad \sum_n |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| = 1. \quad (6.3)$$

¹Ein Teilbereich der angewandten Quantentheorie, der sich mit solchen Näherungsmethoden befasst, ist die Quantenchemie.

Der Einfachheit halber wollen wir annehmen, dass diese Eigenzustände diskret seien, die zu entwickelnde Störungstheorie ist aber auch mit kontinuierlichen Zuständen formulierbar.

6.1.2 Stationäre Störungsrechnung ohne Entartung

Die grundlegende Idee der Störungsrechnung besteht darin, eine Potenzreihenentwicklung in dem Störparameter λ durchzuführen. Zunächst wollen wir dazu der Einfachheit halber annehmen, dass die Energieniveaus des ungestörten Hamiltonians \mathbf{H}_0 nicht entartet sind. Solch eine Situation hat man beispielsweise beim eindimensionalen harmonischen Oszillator. Betrachtet man nun das volle Eigenwertproblem

$$(\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (6.4)$$

so werden sowohl die Eigenzustände $|n\rangle$ als auch die Energieeigenwerte E_n kontinuierlich von λ abhängen und im Limes $\lambda \rightarrow 0$ in die ungestörten Pendants $|n^{(0)}\rangle$ bzw. $E_n^{(0)}$ übergehen. Ausgangspunkt der Störungstheorie ist deshalb, sowohl die Eigenvektoren als auch die Eigenwerte als Potenzreihen in λ anzusetzen:

$$E_n = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)}, \quad |n\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |n^{(j)}\rangle \quad (6.5)$$

Die Norm des Vektors $|n\rangle$ ist dabei noch nicht festgelegt, lediglich $|n^{(0)}\rangle$ ist normiert. Wir benutzen diese Freiheit, um $\langle n|n^{(0)}\rangle = 1$ zu setzen. Daraus folgt dann

$$\langle n^{(0)}|n^{(j)}\rangle = \delta_{0j}. \quad (6.6)$$

Setzt man den Potenzreihenansatz in die Gl. (6.4) ein, so erhält man

$$\sum_{j=0}^{\infty} (\lambda^j \mathbf{H}_0 |n^{(j)}\rangle + \lambda^{j+1} \mathbf{H}_1 |n^{(j)}\rangle) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^{j+k} E_n^{(j)} |n^{(k)}\rangle. \quad (6.7)$$

Durch einen Koeffizientenvergleich in λ^k gelangt man für $k = 0$ zum ungestörten Problem und für $k > 1$ zu dem Gleichungssystem

$$\mathbf{H}_0 |n^{(k)}\rangle + \mathbf{H}_1 |n^{(k-1)}\rangle = \sum_{j=0}^k E_n^{(j)} |n^{(k-j)}\rangle. \quad (6.8)$$

Korrektur der Energieeigenwerte in erster Ordnung:

Die ersten drei Gleichungen dieses Gleichungssystems lauten:

$$\lambda^0 : \quad \mathbf{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (6.9)$$

$$\lambda^1 : \quad \mathbf{H}_0 |n^{(1)}\rangle + \mathbf{H}_1 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle \quad (6.10)$$

$$\lambda^2 : \quad \mathbf{H}_0 |n^{(2)}\rangle + \mathbf{H}_1 |n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle. \quad (6.11)$$

⋮ ⋮

Ausgehend von den ungestörten Zuständen und Eigenwerten lässt sich dieses Gleichungssystem sukzessive lösen. Multipliziert man beispielsweise die Gl. (6.10) von links mit $\langle n^{(0)}|$, so erhalten wir die *Korrektur erster Ordnung* für das Energieniveau

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle} \quad (6.12)$$

Die Korrektur der Energieeigenwerte ist also in erster Ordnung von λ durch den Erwartungswert des Störoperators \mathbf{H}_1 im jeweiligen ungestörten Eigenzustand von \mathbf{H}_0 gegeben.

Korrektur der Eigenzustände in erster Ordnung:

Als nächstes berechnen wir den Zustand $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$. Da die ungestörten Zustände ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, kann der Korrekturvektor $|n^{(1)}\rangle$ nach dieser Basis entwickelt werden:

$$|n^{(1)}\rangle = \underbrace{\sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|}_{=1} |n^{(1)}\rangle = \sum_m \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle |m^{(0)}\rangle \quad (6.13)$$

Diese Entwicklung wird nun in die Gleichung $E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle - \mathbf{H}_0|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle = \mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle$ eingesetzt. Man erhält

$$\sum_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle |m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle = \mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle \quad (6.14)$$

Von links wird dann der Vektor $\langle k^{(0)}|$ heranzumultipliziert:

$$\sum_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle \underbrace{\langle k^{(0)}|m^{(0)}\rangle}_{=\delta_{km}} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{=\delta_{kn}} = \langle k^{(0)}|\mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle, \quad (6.15)$$

also

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\delta_{kn} = \langle k^{(0)}|\mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle, \quad (6.16)$$

Damit ergibt sich für das in Gl. (6.13) auftretende Skalarprodukt

$$\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } k = n \\ \frac{\langle k^{(0)}|\mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} & \text{für } k \neq n \end{cases} \quad (6.17)$$

so dass wir den Eigenzustand des gestörten Hamiltonoperators in erster Ordnung angeben können:

$$\boxed{|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)}|\mathbf{H}_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)} \quad (6.18)$$

Korrektur der Energieeigenwerte in zweiter Ordnung:

Mit diesem Ergebnis ist es einfach, die nächste Ordnung der Energiekorrekturen zu berechnen. Dazu entwickeln wir den Zustand $|n^{(2)}\rangle$ nach der Basis der ungestörten Zustände:

$$|n^{(2)}\rangle = \underbrace{\sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|}_{=1} |n^{(2)}\rangle = \sum_m \langle m^{(0)}|n^{(2)}\rangle |m^{(0)}\rangle \quad (6.19)$$

Diese Entwicklung wird nun in die dritte Gleichung (6.10), d.h. $E_n^{(0)}|n^{(2)}\rangle - \mathbf{H}_0|n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(1)}\rangle - \mathbf{H}_1|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle = 0$ eingesetzt:

$$\sum_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \langle m^{(0)} | n^{(2)} \rangle |m^{(0)}\rangle + \sum_m \left(E_n^{(1)} - \mathbf{H}_1 \right) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle |m^{(0)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (6.20)$$

Wiederum wird von links der Vektor $\langle k^{(0)} |$ heranmultipliziert:

$$\begin{aligned} & \sum_m \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \langle m^{(0)} | n^{(2)} \rangle \underbrace{\langle k^{(0)} | m^{(0)} \rangle}_{=\delta_{km}} \\ & + \sum_m \langle k^{(0)} | \left(E_n^{(1)} - \mathbf{H}_1 \right) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle |m^{(0)}\rangle + E_n^{(2)} \underbrace{\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{=\delta_{kn}} = 0, \end{aligned} \quad (6.21)$$

also

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \langle k^{(0)} | n^{(2)} \rangle - \sum_m \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle \langle k^{(0)} | \mathbf{H}_1 | m^{(0)} \rangle + E_n^{(2)} \delta_{kn} = 0 \quad (6.22)$$

Für $k = n$ erhält man mit Gl. (6.17) die Energiekorrektur zweiter Ordnung

$$E_n^{(2)} = \sum_m \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle \langle n^{(0)} | \mathbf{H}_1 | m^{(0)} \rangle \quad (6.23)$$

und nach Einsetzen von Gl. (6.17) das Endergebnis

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (6.24)$$

Dieses Verfahren kann auf die beschriebene Weise fortgesetzt werden, um sukzessive alle Ordnungen der Entwicklung zu berechnen, wobei sich zunehmend komplexere Ausdrücke ergeben. In der Praxis beschränkt man sich in der Regel jedoch nur auf Zustandskorrekturen erster und Energiekorrekturen zweiter Ordnung.

Merke: Für eine stationäre Störung $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1$ erhält man:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n^{(0)} | \mathbf{H}_1 | n^{(0)} \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (6.25)$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (6.26)$$

6.1.3 Stationäre Störungsrechnung mit Entartung

Wird nachgetragen...

6.2 Zeitabhängige Störungstheorie

6.2.1 Formulierung des Problems im Wechselwirkungsbild

Oft hat man in der Praxis die Situation, dass eine Störung nur für kurze Zeit besteht. Bei einem Streuprozess fühlt beispielsweise das gestreute Teilchen im Vorbeiflug nur für kurze Zeit das Potential des Streuzentrums. In anderen Versuchen wird eine Störung wie z.B. ein äußeres Magnetfeld für nur kurze Zeit ein- und wieder ausgeschaltet. Ein weiteres Beispiel ist der Photoeffekt, bei dem ein Hüllenelektron, das sich zuvor im Eigenzustand befand, durch ein einfallendes Photon so stark ‘durchgeschüttelt’ wird, dass es auf andere Bindungszustände verteilt wird oder sogar in einen ungebundenen Zustand übergeht.

Wenn die Störung schwach genug ist, kann sie mit der im Folgenden beschriebenen *zeitabhängigen Störungstheorie* behandelt werden. Dazu betrachtet man die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t|\psi_t\rangle = \left(\mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{H}_1(t)\right)|\psi_t\rangle, \quad (6.27)$$

wobei \mathbf{H}_0 wie zuvor der zeitunabhängige Hamiltonoperator des ungestörten Problems ist, während die Störung $\mathbf{H}_1(t)$ zeitabhängig und dabei auf ein endliches Zeitintervall beschränkt ist.

Für die zeitabhängige Störungstheorie eignet sich das in Kap. 2.2.4 diskutierte *Wechselwirkungsbild*. Die Zeitabhängigkeit des ungestörten Problems wird dabei wie im Heisenbergbild den Operatoren aufgeprägt, während die durch die Störung hervorgerufene Zeitabhängigkeit den Zuständen zugeordnet wird. Jede Observable \mathbf{A} geht also über in eine zeitabhängige Observable $\tilde{\mathbf{A}}_t$ mit der Bewegungsgleichung

$$i\hbar\partial_t\tilde{\mathbf{A}}_t = [\tilde{\mathbf{A}}_t, \mathbf{H}_0]. \quad (6.28)$$

Dies gilt auch für den Störoperator $\mathbf{H}_1(t)$:

$$\tilde{\mathbf{H}}_1(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0t}\mathbf{H}_1(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0t} \quad (6.29)$$

Die Bewegungsgleichung für Zustände $|\tilde{\psi}_t\rangle := e^{+\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0t}|\psi_t\rangle$ im Wechselwirkungsbild lautet dann:

$$i\hbar\partial_t|\tilde{\psi}_t\rangle = \lambda\tilde{\mathbf{H}}_{1,t}|\tilde{\psi}_t\rangle. \quad (6.30)$$

Für $\lambda = 0$, also ohne äußere Störung, ist $\tilde{\mathbf{H}}_{1,t} = 0$, d.h. der Zustand $|\tilde{\psi}_t\rangle$ ist zeitunabhängig. Mit einer Störung kommt es allerdings zu einer Änderung des Zustands im Wechselwirkungsbild.

6.2.2 Potenzreihenansatz

Die Lösung der partiellen Differentialgleichung (6.30) kann durch Iteration bestimmt werden. Dazu integrieren wir zunächst die Gleichung über die Zeit von 0 bis t :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle - |\tilde{\psi}(0)\rangle = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_{1,t'} |\tilde{\psi}(t')\rangle \quad (6.31)$$

Für die Lösung dieser (noch exakten) Integralgleichung wird ein Potenzreihenansatz gemacht:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\tilde{\psi}^{(j)}(t)\rangle. \quad (6.32)$$

Setzt man diesen Potenzreihenansatz in die Integralgleichung ein und führt eine Koeffizientenvergleich in λ durch, so wird man auf die folgende Rekursionsformel geführt:

$$|\tilde{\psi}^{(j)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_{1,t'} |\tilde{\psi}^{(j-1)}(t')\rangle \quad (6.33)$$

Insbesondere erhält man für die Korrektur 1. Ordnung

$$|\tilde{\psi}^{(1)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left(\int_0^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_{1,t'} \right) |\tilde{\psi}(0)\rangle. \quad (6.34)$$

Wenn man also die höheren Ordnungen vernachlässigt, erhält man als Näherung den Zustand

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle \approx \left(\mathbf{1} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_{1,t'} \right) |\tilde{\psi}(0)\rangle. \quad (6.35)$$

Wie man leicht nachrechnen kann, ist dieser Zustand bei einem normierten Anfangszustand

$$\mathcal{N}(\lambda) := \langle \tilde{\psi}(0) | \tilde{\psi}(0) \rangle = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (6.36)$$

bis auf Korrekturen zweiter Ordnung in λ ebenfalls normiert.

6.2.3 Übergangswahrscheinlichkeiten

Die Störung werde nun bei $t = 0$ eingeschaltet und bei $t = T$ wieder ausgeschaltet. Außerdem befinde sich das System vor der Störung in einem der Eigenzustände des ungestörten Hamiltonians:

$$|\tilde{\psi}(0)\rangle := |n\rangle, \quad \mathbf{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (6.37)$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P_{n \rightarrow m}(t)$ für einen durch die Störung hervorgerufenen Übergang in einen anderen Eigenzustand $|m\rangle$? Eine einfache Rechnung zeigt:

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow m}(t) &= |\langle m | \psi_t \rangle|^2 = |\langle m | \tilde{\psi}_t \rangle|^2 \\ &\approx \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \langle m | \tilde{\mathbf{H}}_{1,t'} |n\rangle \right|^2 |\mathcal{N}|^2 \\ &\approx \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t'} \langle m | \mathbf{H}_{1,t'} |n\rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (6.38)$$

Mit der Notation

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n \quad (6.39)$$

erhält man also für die Übergangswahrscheinlichkeit am Endzeitpunkt T den Ausdruck

$$\boxed{P_{n \rightarrow m}(T) \approx \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt' e^{i\omega_{mn}t'} \langle m | \mathbf{H}_{1,t'} |n\rangle \right|^2} \quad (6.40)$$

6.2.4 Konstante Störung auf Intervall $[0, T]$

Als Beispiel wollen wir nun annehmen, dass der Störoperator $\mathbf{H}_{1,t'}$ auf dem Intervall $t' \in [0, T]$ konstant und gleich \mathbf{H}_1 ist. In diesem Fall können die Matrixelemente vor das Integral gezogen werden. Man erhält

$$P_{n \rightarrow m}(T) \approx \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt e^{i\omega_{mn}t} \right|^2 |\langle m | \mathbf{H}_1 | n \rangle|^2. \quad (6.41)$$

Das Integral kann nun ausgeführt werden:

$$P_{n \rightarrow m}(T) \approx \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(\frac{1}{2}\omega_{mn}T)}{\frac{1}{2}\omega_{mn}} \right)^2 |\langle m | \mathbf{H}_1 | n \rangle|^2. \quad (6.42)$$

Durch die für die Zeitdauer T eingeschaltete Störung kann also die Energie des gestreuten Teilchens erhöht und erniedrigt werden. Dabei gibt der Vorfaktor mit der Sinusfunktion an, wie stark insbesondere grosse Energiedifferenzen unterdrückt sind (siehe Abb. xxx).

Offenbar wird die durch den Vorfaktor gegebene Verteilung für zunehmendes T immer schmaler, d.h. die durch den Streuprozess hervorgerufene Energieänderung wird immer kleiner. In der Tat konvergiert diese Verteilung im Limes $T \rightarrow \infty$ gegen eine δ -Funktion. Diese Beobachtung ist in Übereinstimmung mit der phänomenologischen Energie-Zeit-Unschärferelation $\delta E \sim 1/\Delta T$.

Beweis: Zum Beweis dafür, dass der Vorfaktor im Limes $T \rightarrow \infty$ gegen eine δ -Funktion konvergiert,

7 Streutheorie

7.1 Grundlagen

7.1.1 Wirkungsquerschnitt

Der grundsätzliche Aufbau eines Streuexperiments ist in Abb. 7.1 zu sehen: Ein einlaufendes Teilchen, repräsentiert durch eine ebene Welle mit wohldefiniertem Impuls in z -Richtung, trifft auf ein Streuzentrum, welches durch ein ortsfestes radialsymmetrisches Potential $V(r)$ modelliert wird. Die ebene Welle wird an diesem Potential gestreut, wobei es zu einer Richtungsänderung, also zu einer Änderung des Impulses kommt. Im Experiment wird der Streuprozess in der Regel durch in Kugelschalen angeordnete Detektoren analysiert. Man stellt sich deshalb die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit das Teilchen in einen bestimmten *Raumwinkel* gestreut wird. Die Orientierung dieses Raumwinkels wird durch die üblichen Winkel θ und ϕ in Kugelkoordinaten beschrieben und sein (infinitesimaler) Öffnungswinkel $d\Omega(\theta, \phi)$ entspricht der beanspruchten Fläche auf der Einheitskugel.

In einem typischen Beschleunigerexperiment findet eine Vielzahl solcher Streuungen statt. Die einlaufende Welle besteht also aus einem kontinuierlichen Strom $\vec{J} = J\vec{e}_3$ voneinander unabhängiger Teilchen. Wie im klassischen Fall werden aber nicht alle dieser Teilchen gestreut. Die Anzahl aller gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit wird aber in jedem Fall proportional zum Strom der einlaufenden Teilchen sein:

$$\dot{N} = \sigma_{\text{tot}} J \quad (7.1)$$

Die Proportionalitätskonstante σ_{tot} wird dabei als *totaler Wirkungsquerschnitt* (engl.

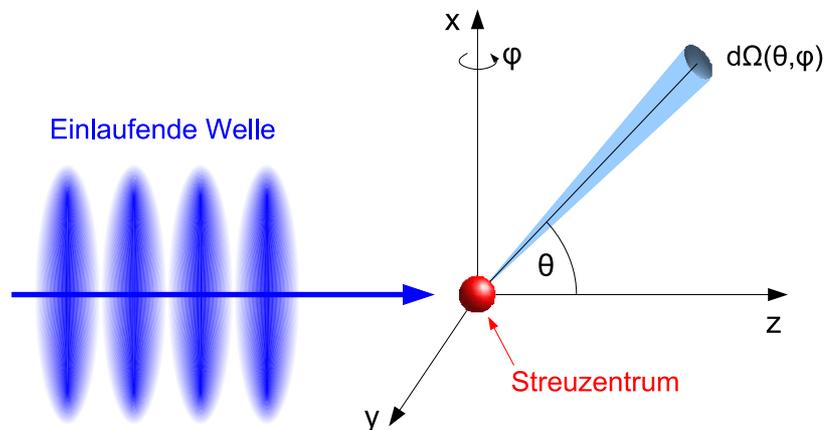


Abbildung 7.1: Typischer schematischer Aufbau eines Streuversuchs (siehe Text).

total cross section) oder *Streuquerschnitt* bezeichnet. Da \dot{N} und J die Dimensionen $1/\text{Zeit}$ bzw. $1/(\text{Zeit Länge}^2)$ haben, hat σ_{tot} die Dimension einer Fläche,

Während der totale Wirkungsquerschnitt die Anzahl *aller* gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit bei einem gegebenen Strom J bestimmt, gibt der sogenannte *differentielle Wirkungsquerschnitt* $\sigma(\theta, \phi)$ die Anzahl der in einen bestimmten (infinitesimalen) Raumwinkel $d\Omega$ gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit an:

$$d\dot{N} = \sigma(\theta, \phi) d\Omega J \quad (7.2)$$

Integriert man den differentiellen Wirkungsquerschnitt über die Kugeloberfläche, so erhält man den totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \sigma(\theta, \phi) d\Omega \quad (7.3)$$

Den totalen Wirkungsquerschnitt kann man sich im klassischen Grenzfall in etwa so vorstellen wie die Fläche einer Zielscheibe. Trifft das einlaufende Teilchen auf die Scheibe, so wird es abgelenkt, ansonsten bleibt die Bewegungsrichtung unverändert.

7.1.2 Annahmen

Wir wollen nun annehmen, dass die Streuung *elastisch* ist, d.h.

- das Teilchen verliert keine Energie durch Dissipationseffekte,
- der Kern (das Streuzentrum) nimmt beim Streuprozess keine Energie auf,
- die einlaufenden Teilchen verlassen die Streuregion wieder, es kommt also nicht zur Bildung von Bindungszuständen.

Unter diesen Bedingungen kommt es bei einem konstanten Strom fortwährend einlaufender Teilchen mit der Wellenzahl \vec{k} zur Ausbildung eines stationären Zustands, d.h. eines Zustands mit trivialer Zeitabhängigkeit in Form einer oszillierenden Phase

$$|\psi_t\rangle = |\Phi_{\vec{k}}\rangle e^{-i\omega_k t} \quad \psi(\vec{r}, t) = \Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\omega_k t} \quad (7.4)$$

dessen Frequenz durch die Dispersionsrelation des freien Teilchens

$$\hbar\omega_k = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (7.5)$$

bestimmt ist. Die Energie ist eine Funktion von \vec{k} , das Spektrum ist also wie bei einer ebenen Welle kontinuierlich und die Wellenfunktionen sind nicht normierbar.

Wir wollen nun weiterhin annehmen, dass das Streupotential $V(r)$ kurzreichweitig genug ist, um nur einen *endlichen* Anteil der einlaufenden Welle zu streuen, dass also der obigen klassischen Vorstellung zufolge die Fläche der Zielscheibe endlich ist. Es stellt sich heraus, dass bereits ein Coulomb-Potential $V(r) \propto 1/r$ zu einem divergenten Wirkungsquerschnitt führt, also alle einlaufenden Teilchen ablenkt. Für die folgende Rechnung wird angenommen, dass

- $V(r)$ für große r schneller abfällt als $1/r$, d.h.

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$$

- $V(r)$ am Ursprung langsamer divergiert als $1/r^2$, d.h.

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2V(r) = 0$$

7.1.3 Streuamplitude

Für die Lösung des Streuproblems benutzt man den Ansatz, dass sich die Wellenfunktion in großer Entfernung vom Streuzentrum additiv zusammensetzt aus der einlaufenden Welle und einer gestreuten Kugelwelle:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (7.6)$$

Dabei wird angenommen, dass die Wellenzahl der einlaufenden Welle in z -Richtung orientiert ist. Die Amplitude $f(\theta, \phi)$ der auslaufenden Kugelwelle bezeichnet man als *Streuamplitude*. Diese Funktion hängt von durch θ und ϕ beschriebenen Richtung ab und ist im Allgemeinen komplex.

Wir wollen nun die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte* (1.38)

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \quad (7.7)$$

für die ein- und auslaufende Welle berechnen. Für die einlaufende ebene Welle $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ ist

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (2i\vec{k}) = \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_3 \quad (7.8)$$

Zur Berechnung der Kugelwelle benutzen wir die Darstellung des Gradienten in Kugelkoordinaten

$$\nabla \psi = \vec{e}_1 \partial_r \psi + \vec{e}_2 \frac{1}{r} \partial_\theta \psi + \vec{e}_3 \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \psi \quad (7.9)$$

Wendet man den Gradienten auf eine (rotationssymmetrische) Kugelwelle $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} e^{ikr}$ an, wobei $r = |\vec{r}|$ und $k = |\vec{k}|$ ist, so erhält man

A Anhänge

A.1 Dirac δ -Funktion

Die *Dirac δ -Funktion* ist streng genommen eine *Distribution*. Man kann sie aber in vielen Fällen wie eine gewöhnliche Funktion behandeln. Anschaulich ist die δ -Funktion eine bei x_0 fokussierte ‘Nadelspitze’ mit normierter Fläche:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty & x = x_0 \\ 0 & x \neq x_0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) = 1. \quad (\text{A.2})$$

In einem Integral selektiert die δ -Funktion den Wert des Integranden an der Stelle x_0 :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0), \quad (\text{A.3})$$

deshalb ist

$$\delta(x - x_0) f(x) = \delta(x - x_0) f(x_0). \quad (\text{A.4})$$

Die δ -Funktion kann man sich als Grenzprozess einer immer schmaleren und höheren Gaußkurve mit Fläche 1 vorstellen:

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma}}. \quad (\text{A.5})$$

Die δ -Funktion hat folgende Eigenschaften. Sie ist symmetrisch unter Vorzeichenwechsel des Arguments:

$$\delta(x) = \delta(-x). \quad (\text{A.6})$$

Ein Skalar kann als Betrag des Kehrwerts vor die δ -Funktion gezogen werden:

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x). \quad (\text{A.7})$$

Ist das Argument selbst eine Funktion von x , so kommt es nur auf die Ableitung der Funktion nahe der Nullstellen x_k an, die dann ebenfalls als Betrag des Kehrwerts vor die δ -Funktion gezogen werden kann. Dabei muss über alle Nullstellen summiert werden:

$$\delta(f(x)) = \sum_k \frac{\delta(x - x_k)}{|f'(x_k)|}. \quad (\text{A.8})$$

Ausserdem gilt:

$$\delta'(x) = -\frac{\delta(x)}{x}. \quad (\text{A.9})$$

Beweis: Einerseits ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\delta(x)}{x} f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\delta(x)}{x} (f(0) + xf'(0) + \dots) = f'(0). \quad (\text{A.10})$$

Andererseits ist

$$-\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta'(x) f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f'(x) = f'(0) \quad (\text{A.11})$$

Da beide Distributionen identische Ergebnisse liefern für alle f , müssen sie gleich sein, d.h. $\frac{\delta(x)}{x} = -\delta'(x)$.

Für Fourierintegrale ist die Darstellung

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{\pm ikx} \quad (\text{A.12})$$

von fundamentaler Bedeutung, wobei das Vorzeichen im Exponenten keine Rolle spielt.

In drei Dimensionen ist für kartesische Koordinaten

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \delta(x_3 - x'_3). \quad (\text{A.13})$$

Hier lässt sich die Fourierdarstellung kompakt schreiben mit einem Skalarprodukt:

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{x}}. \quad (\text{A.14})$$

Oft wird dabei auch die Potenz ‘3’ auf der linken Seite weggelassen.

Bei einer Koordinatentransformation $x_i \rightarrow \xi_i$ wird der Kehrwert des Betrages der Jacobi-Determinante $J(x_i, \xi_i)$ vor die Funktion gezogen:

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{\delta(\xi_1 - \xi'_1) \delta(\xi_2 - \xi'_2) \delta(\xi_3 - \xi'_3)}{|J(x_i, \xi_i)|}. \quad (\text{A.15})$$

Für Kugelkoordinaten r, θ, φ erhält man insbesondere

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{\delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')}{r^2 \sin \theta}. \quad (\text{A.16})$$

A.2 Levi-Civita-Symbole

Die *Levi-Civita-Symbole*, auch *total antisymmetrischer Tensor* genannt, sind definiert durch

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \{i, j, k\} \text{ eine gerade Permutation von } \{1, 2, 3\} \text{ ist,} \\ -1 & \text{wenn } \{i, j, k\} \text{ eine ungerade Permutation von } \{1, 2, 3\} \text{ ist,} \\ 0 & \text{wenn } \{i, j, k\} \text{ keine Permutation von } \{1, 2, 3\} \text{ ist,} \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

d.h. die sechs Komponenten

$$\begin{aligned} \epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} &= 1 \\ \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} &= -1 \end{aligned}$$

sind ungleich Null und alle anderen Komponenten sind gleich Null.

A.3 Direkte Summe und Tensorprodukt von Vektorräumen

Ein häufiger Anfängerfehler besteht darin, das Produkt und die Summe zweier Vektorräume zu verwechseln. Sei im Folgenden $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ eine orthonormale Basis des Hilbertraums \mathcal{H}_1 und $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle\}$ eine orthonormale Basis des Hilbertraums \mathcal{H}_2 . Sei ferner $|a\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + a_3|e_3\rangle$ ein Vektor aus \mathcal{H}_1 und $|b\rangle = b_1|f_1\rangle + b_2|f_2\rangle$ ein Vektor aus \mathcal{H}_2 . Für die Komponentendarstellung schreibt man auch oft:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Direkte Summe von Vektorräumen:

Die *direkte Summe* $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ erhält man, indem man beide Vektorräume vereinigt. Dabei addieren sich die Dimensionen der Einzelräume. Die Vereinigungsmenge

$$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, |f_1\rangle, |f_2\rangle\}$$

der Basisvektoren ist eine Basis des Summenraums. Die Komponenten der Einzelvektoren werden also einfach zusammengefasst:

$$|c\rangle = |a\rangle \oplus |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

Zwei lineare Abbildungen erhalten in der Matrixdarstellung eine Blockstruktur im neuen Raum:

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \oplus \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{11} & b_{12} \\ 0 & 0 & 0 & b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

Die direkte Summe von Vektorräumen begegnet uns häufig in der klassischen Mechanik, in der Quantentheorie dagegen nur sehr selten. Die Bildung der Summe ist leicht vorstellbar, z.B. ist der \mathbb{R}^3 die direkte Summe aus \mathbb{R}^2 (z.B. xy -Ebene) und \mathbb{R} (z -Achse).

Tensorprodukt von Vektorräumen:

Das *Tensorprodukt* $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ erhält man, indem alle *Kombinationen* der Basisvektoren als neue Basis auffasst, d.h. die Basis des Produktraums ist

$$\{|e_1\rangle|f_1\rangle, |e_1\rangle|f_2\rangle, |e_2\rangle|f_1\rangle, |e_2\rangle|f_2\rangle, |e_3\rangle|f_1\rangle, |e_3\rangle|f_2\rangle\} \quad (\text{A.21})$$

wobei wir die Kurzschreibweise $|e_i\rangle|f_j\rangle := |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$ verwendet haben. Bei einem Tensorprodukt multiplizieren sich also die Dimensionen der Einzelräume. Als Konvention

werden dabei die Basisvektoren lexikographisch geordnet (“der rechte Index zählt am schnellsten”).

Tensorprodukte von Vektoren in Komponentendarstellung folgen der Regel “jeder mit jedem” und werden folgendermaßen gebildet:

$$|c\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \\ a_3 b_1 \\ a_3 b_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.22})$$

Zwei lineare Abbildungen erhalten in der Matrixdarstellung eine Blockstruktur im neuen Raum:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{13}b_{11} & a_{13}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{13}b_{21} & a_{13}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{23}b_{11} & a_{23}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{23}b_{21} & a_{23}b_{22} \\ a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{33}b_{11} & a_{33}b_{12} \\ a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{33}b_{21} & a_{33}b_{22} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Tensorproduktbildung ist nicht ohne weiteres anschaulich vorstellbar, da der kleinste Vektorraum, der in zwei Tensorfaktoren zerlegt werden kann, bereits der \mathbb{R}^4 ist.

Eigenschaften von Tensorprodukten

Für Tensorprodukte gelten die folgenden Rechenregeln. Zum einen wirkt ein Tensorprodukt von Operatoren auf ein Tensorprodukt von Vektoren in jedem Faktor separat, d.h.

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(|a\rangle \otimes |b\rangle) = \mathbf{A}|a\rangle \otimes \mathbf{B}|b\rangle. \quad (\text{A.24})$$

Die Hintereinanderausführung zweier Operatoren wird in jeder Tensorkomponente einzeln durchgeführt:

$$(\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{B}_1)(\mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{B}_2) = (\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2) \otimes (\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2). \quad (\text{A.25})$$

Beim Adjungieren \dagger sind alle Tensorkomponenten einzeln zu adjungieren, die Reihenfolge der tensoriellen Faktoren wird (im Gegensatz zu Operatorprodukten) nicht umgedreht:

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger \otimes \mathbf{B}^\dagger \quad (\text{A.26})$$

$$(|a\rangle \otimes |b\rangle)^\dagger = \langle a| \otimes \langle b| \quad (\text{A.27})$$

Allerdings wird die Reihenfolge von Operatorprodukten innerhalb der Tensorkomponenten auf gewohnte Weise umgedreht:

$$\left((\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2) \otimes (\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2 \mathbf{B}_3) \right)^\dagger = (\mathbf{A}_2^\dagger \mathbf{A}_1^\dagger) \otimes (\mathbf{B}_3^\dagger \mathbf{B}_2^\dagger \mathbf{B}_1^\dagger) \quad (\text{A.28})$$

Das Tensorprodukt von Skalaren $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ wird formal als Multiplikation in \mathbb{C} aufgefasst:

$$\lambda \otimes \mu \equiv \lambda\mu \quad (\text{A.29})$$

So ist beispielsweise

$$\left(\langle a_1 | \otimes \langle b_1 | \right) \left(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \right) \left(|a_2\rangle \otimes |b_2\rangle \right) = \langle a_1 | \mathbf{A} | a_2 \rangle \langle b_1 | \mathbf{B} | b_2 \rangle \in \mathbb{C} \quad (\text{A.30})$$

Insbesondere ist die Norm eines Tensorprodukts von Vektoren gleich dem Produkt der Normen der Faktoren.

Tensorprodukte können ohne weiteres mehrfach durchgeführt werden, z.B. kann ein Hilbertraum \mathcal{H} als Tensorprodukt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$ aus Einzelräumen $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3$ definiert werden. Für eine große Anzahl von Faktoren verwendet man auch die Schreibweise

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^n \mathcal{H}_j \quad (\text{A.31})$$

Bei N identischen Faktoren $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_0 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_0$ wird auch gerne die Schreibweise der Tensorpotenz $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0^{\otimes N}$ verwendet.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Böhm, Vorlesungsskript, Uni Würzburg, zu beziehen bei der Fachschaft
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Volume 1/2, Paris 1977
- [3] T. Fliessbach, *Quantenmechanik*, Mannheim 1991
- [4] S. Gasiorowicz, *Quantenphysik*, München 1981
- [5] W. Greiner, *Theoretische Physik*, Vol. 4/5, Thun 1990
- [6] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Vol. III, Berlin 1979
- [7] A. Messiah, *Quantenmechanik*, Vol. 1-2, Berlin 1991.
- [8] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik*, Vol. 5-1,2, Ulmen 1992
- [9] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Menlo Park, 1985
- [10] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Berlin 1993

Index

- Absteigeoperator, 57
- Algebra, 50
 - zentrales Element, 78
- Amplitude
 - quantenmechanische, 4
- Ankopplung
 - minimale, Ankopplung
 - eichinvariante, 94
- Anschlussbedingungen, 24
- Antikommutator, 37
- Antisymmetrisierung
 - von Zuständen, 116
- Antisymmetrisierungsoperator, 118
- Anzahloperator, 57
- Aufsteigeoperator, 57
- Austauschentangung, 113, 115, 116

- Basis, 35
 - adjungierte, 35
 - normierte, 35
 - orthonormierte, 35
- Basistransformation, 64
- Bewegungsgleichung
 - Heisenbergsche, 69
- Bewegungsgleichungen, 1
- Bohr'sches Korrespondenzprinzip, 12
- Bohrsches Magneton, 96
- Bosonen, 117
- bra-Vektoren, 34

- Caley-Klein-Parameter, Parameter
 - Caley-Klein, 49
- Clebsch-Gordan-Koeffizienten, 107

- Determinismus, 1
- Dirac- δ -Funktion, 135
- Dispersionsrelation, 17
- Distribution, 135
- Drehimpuls, 77
 - intrinsischer, 97
- Drehimpulsalgebra, 77, 78

- Drehimpulsquantenzahl, 80
- Dualraum, 35
- Dyaden, 43, 44

- Eigenbasis, 39
- Eigenschaften
 - intrinsische, 97
- Eigenvektoren, 37
- Eigenwert, 37
- Eigenwerte
 - entartete, 37
- Eigenwertgleichung, 37
- Einheitsoperator, 41
- Energiedarstellung, 64
- Erhaltungsgrößen, 70
- Erwartungswert, 14
- Erwartungswerte
 - im Schrödinger-Bild, 68
- Eulersche Winkel, 105

- Fermionen, 117
- Funktionale
 - lineare, 34

- Generatoren, 47
 - der $SO(3)$, 74
- Gesamtdrehimpuls, 102
- Gesamtdrehimpulsbasis, 107
- Gleichung
 - adjungierte, 38
- Grundzustand, 23, 58
- Gruppe
 - nichtkommutative, 73
 - spezielle unitäre, 49
 - unitäre, 49

- Häufungspunkt, 60
- Hamiltonian, 67
- Hamiltonoperator, 42
- Hamiltonoperator, Energieoperator, 67
- Hauptquantenzahl, 89, 93

- Heisenberg-Bild, 68, 69
 stationäre Observable, 70
 Heisenbergschen Vertauschungsrelationen, 55
 heuristisches Prinzip der Einfachheit, 3
 Hilbertraum, 32
 Abschluss, 61

 Idempotenz, 43
 Impulseigenzustand, 63
 Impulsoperator, 42
 Impulsraumdarstellung, Heisenberg-Algebra
 Impulsraumdarstellung, 63

 Kollaps der Amplituden, 6
 Kommutator, 37
 Kontinuitätsgleichung, 14
 Kugelflächenfunktionen, 84

 Lagrangefunktion, 3
 Laguerre-Polynome
 assoziierte, Polynome
 Laguerre-, 89
 Landé-Faktor, 100
 Laplace'scher Dämon, 2
 Leiteroperatoren, 57
 Leiteroperatoren, 79
 Levi-Civita-Symbole, 136
 Linearkombinationen, 17

 magnetisches Moment, Moment
 magnetisches, 96
 Masse
 reduzierte, 90
 Matrixexponentialfunktion, 45
 Moyal-Sternprodukt, 65

 Näherungsverfahren, 123
 Nullvektor, 33

 $O(3)$, Gruppe
 $O(3)$, 73
 Observablen, 51
 Operator, 36
 antihermitescher, 42
 diagonaler, 41
 hermitesch konjugierter, 38
 hermitescher, 39
 selbstadjungierter, 39
 skalarer, 40

 Operatoren, 15
 antihermitesche, 39
 Orbitale, 21
 Ortseigenzustand, 60
 Ortsoperator, 41
 Ortsraumdarstellung, Heisenberg-Algebra
 Ortsraumdarstellung, 60

 Parität, 23
 Pauli-Gleichung, 102
 Pauli-Matrizen, 49, 81
 Paulimatrizen, 100
 Permutation, 117
 Pfadintegral, 8
 Planck'sches Wirkungsquantum, 4
 Potential
 effektives, 86
 Präparierung von Quantenzuständen, 53
 Prinzip der kleinsten Wirkung, 2
 Produktbasis, 106
 Projektionsoperator, 43
 Projektionsoperatoren
 hermitesche, 43
 orthogonale, 44
 Projektionsoperatoren
 vollständiger Satz von, 44

 Quantenelektrodynamik, 7
 Quantenzahl
 magnetische, 80
 Quantenzahlen, 53

 Radialgleichung, 86
 Radialimpulsoperator, Operator
 Radialimpuls-, 85
 Radialquantenzahl, 92
 Raumwinkel, 131
 Rydbergenergie, 93

 Schrödinger-Bild, 68
 Schrödingergleichung, 11
 radiale, 86
 zeitabhängige, 11, 68
 Separationsansatz, 86
 Singulett-Zustand, 120
 Skalarprodukt, 33
 Slater-Determinante, 118
 $SO(3)$, Gruppe
 $SO(3)$, 73

- Spektralzerlegung, 44
- Spin, 98
- Spin, Elektronenspin, 97
- Spinor, 102
- Spinor-Darstellung, 102
- Spur, 48
- Störparameter, 123
- Störung, 123
- Störungstheorie
 - zeitabhängige, 127
- stationäre Schrödingergleichung, 22
- Störungstheorie
 - Energiekorrektur, 125
- Streuamplitude, 133
- Streuquerschnitt, 132
- Streuung
 - elastische, 132
- Strukturkonstanten, 75
- Symmetrisierung
 - von Zuständen, 116
- Symmetrisierungsoperator, 118
- Teilchen
 - identische, 113
- Tensor
 - total antisymmetrischer, 136
- Tensoroperator, Operator
 - Tensor-, 40
- Tensorprodukt, 137
- Transformation
 - unitäre, 46
- Transpositionsoperator, 115, 116
- Triplett-Zustand, 120
- u, 113
- Unschärfe, 53
- Unterraum, Teilraum, 43
- Vektoradditionskoeffizienten, 107
- Vektoroperator, 40, 41
 - axialer, 82
- Vektorräume
 - direkte Summe, 137
- Verhältnis
 - gyromagnetisches, 100
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 12
- Wahrscheinlichkeitsstromdichte, 14, 133
- Wechselwirkungsbild, 68, 70, 127
- Wellenfunktion, 8
- Wellenfunktionen
 - stationäre, Zustände
 - stationäre, 21
- Wirkung, 2
- Wirkungsfunktional, 2
- Wirkungsquerschnitt
 - differentieller, 132
 - totaler, 131
- Zeeman-Effekt, 96
- Zeitentwicklungsoperator, 67
- Zentralpotential, 84
- Zerfließen des Wellenpakets, 18
- Zustände
 - gebundene, 20
 - stationäre, 68
 - ungebundene, 20
- Zustand
 - niedrigsten Gewichts, 58
 - Vakuum, Vakuumzustand, 58
 - vollständig antisymmetrisierter, 117
 - vollständig symmetrisierter, 117
- Zustandsleiter, 57
- Zustandsraum, 32
- Zustandsvektor, 32