

Heinrich Mitter

Quantentheorie

**Vorlesungen über
Theoretische Physik III**

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
1. Grundbegriffe und grundlegende Struktur	
1.1 Warum Quantentheorie ?	1
1.2 Die Quantennatur des Lichtes	3
1.3 Energieniveaus	6
1.4 Der Begriff des Zustands	8
2. Kinematik von Quantenzuständen	
2.1 Ein Experiment mit polarisiertem Licht und seine Interpretation	11
2.2 Analysatoren, Projektoren, Analysatorkreise	16
2.3 Verallgemeinerung auf Mehrzustandssysteme	24
2.4 Algebraisierung	28
2.5 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Interferenz	32
2.6 Transformationsmatrizen	37
2.7 Allgemeine Apparate und Matrizen	41
2.8 Zustandsvektoren und Operatoren	46
2.9 Der Zustandsraum (Hilbertraum)	53
2.10 Ergänzung: Paulialgebra und Paulimatrizen	58
3. Dynamik von Quantenzuständen	
3.1 Spinzustände	63
3.2 Spindrehungen für Spin $1/2$	66
3.3 Dynamik von Spindrehungen	73
3.4 Die Zeitentwicklung von Zuständen	80
3.5 Dynamik von Zweizustandssystemen	87
4. Der Formalismus der Quantentheorie	
4.1 Impuls- und Ortszustände eines Teilchens	93
4.2 Wellenpakete und Unschärferelation	102
4.3 Quantenmechanische Operatoren für ein Teilchen	108
4.4 Die kanonische Quantelung	115
4.5 Andere Fassungen der Quantendynamik	124
4.6 Ergänzung: Exponentielle Operatoren	128
4.7 Transformationen, Symmetrien und Erhaltungsgrößen	131

5. Einfache Anwendungen	
5.1 Zur Reduktion von Freiheitsgraden	139
5.2 Der harmonische Oszillator	143
5.3 Quantentheorie von Drehimpulsen	153
5.4 Ergänzungen zur Drehimpulstheorie	163
5.5 Zentralsymmetrisches Potential	171
5.6 Das Wasserstoffatom	179
5.7 Rotationen und Schwingungen zweiatomiger Moleküle	187
5.8 Wahrscheinlichkeitsdichte und -stromdichte	193
6. Quantenmechanische Näherungsverfahren	
6.1 Stationäre Störungstheorie	199
6.2 Variationsverfahren	202
6.3 Die quasiklassische Näherung	209
6.4 Teilchen in elektromagnetischen Feldern	214
6.5 Zeitabhängige Störungstheorie	223
7. Streuprobleme	
7.1 Grundlagen	231
7.2 Die Lippmann-Schwinger-Gleichung	234
7.3 Formale Streutheorie	240
7.4 Streuphasen	246
7.5 Resonanzverhalten	248
8. Ununterscheidbare Teilchen	
8.1 Zustände für ununterscheidbare Teilchen	251
8.2 Vereinfachte Theorie des Heliumatoms	258
8.3 Die Valenzbindung des Wasserstoffmoleküls	263
8.4 Pauliprinzip und periodisches System	267
8.5 Die Besetzungszahldarstellung	271
8.6 Mehrteilchenoperatoren	279
8.7 Bewegungsgleichungen	281
8.8 Quasiteilchen	283

A1. Quantenmechanik des Coulombproblems	
A1.1 Gruppentheoretische Struktur und Energieniveaus	287
A1.2 Streuphasen	290
A1.3 Algebraische Berechnung von Eigenvektoren	293
A2. Zur historischen Entwicklung	301
Sachverzeichnis	311

Übungen

	Seite
Beispiele	
2.1 - 2.4	23
2.5 - 2.8	40
2.9 - 2.12	45
2.13 - 2.15	57
2.16 - 2.26	60 f.
3.1 - 3.8	72
3.9 - 3.11	79
3.12 - 3.14	86
3.15 - 3.21	90 f.
4.1 - 4.3	107
4.4 - 4.9	113 f.
4.10 - 4.12	122 f.
4.13 - 4.19	129 f.
4.20 - 4.24	137
5.1 - 5.11	149 f.
5.12 - 5.25	161 f.
5.26 - 5.31	170
5.32 - 5.37	177 f.
5.38 - 5.39	186
5.40	192
5.41 - 5.44	197
6.1 - 6.7	206 f.
6.8 - 6.14	221 f.
6.15 - 6.20	229
7.1 - 7.3	239
7.4 - 7.8	244 f.
8.1 - 8.5	277 f.
8.6 - 8.10	285

Vorwort

Infolge ihrer großen Bedeutung für den Aufbau der Materie nimmt die Quantentheorie in der Physik eine zentrale Stellung ein. Nur mit ihrer Hilfe ist es möglich, die Stabilität und Struktur der Bestandteile – Kerne, Atome, Moleküle – zu verstehen, aus denen die uns umgebende Welt zusammengesetzt ist. Der Anwendungsbereich der Quantentheorie ist aber längst nicht mehr auf diese mikroskopischen Systeme beschränkt. Eine Reihe von Phänomenen in der Physik der Flüssigkeiten und Festkörper ist durch das quantenhafte Verhalten von Systemen bedingt, die nicht wesentlich kleiner sind, als wir selbst. Supraflüssiges Helium, supraleitende Substanzen, Ferromagneten sind makroskopische Quantensysteme, es gibt Schaltkreise, in denen man das quantenmechanische Verhalten geeigneter Halbleiterkontakte technisch ausnützt, weiße Zwerge und Neutronensterne sind Quantensysteme mit (für unsere Begriffe) riesigen Abmessungen.

Eine einführende Darstellung der Quantentheorie kann, wenn sie in einer Vorlesung mit begrenzter Stundenzahl untergebracht werden soll, nur einen sehr begrenzten Ausschnitt aus den vielen Anwendungen der Theorie enthalten. Auch aus dem entsprechend reichhaltigen Katalog von Lösungsmethoden quantenmechanischer Probleme muß eine enge Auswahl getroffen werden. Die Darstellung sollte aber den Formalismus der Quantentheorie so vermitteln, daß seine wesentlichen Züge nicht aus den Augen verloren werden.

Der hervorstechendste Unterschied zwischen der klassischen und der Quantenmechanik besteht in der Tatsache, daß die letztere eine statistische Theorie ist, in der es um Wahrscheinlichkeitsaussagen über Zustände des betrachteten Systems geht. In der vorliegenden Ausarbeitung wird daher zunächst versucht, diesen Aspekt plausibel zu machen. Dies geschieht mit Hilfe einer Analyse einfacher Experimente und ihrer Resultate in Form einer “Algebra von Messungen”, die verallgemeinerungsfähig ist und zur Kinematik quantenmechanischer Zustände führt. Der Schritt zur Dynamik als Theorie von Zustandsänderungen wird ebenfalls anhand einfacher Experimente vollzogen. Dadurch erhält man bereits die Möglichkeit, die Dynamik von Systemen bei gegebenen Matrixelementen der Energie zu untersuchen und entsprechende Probleme zu lösen. Erst der letzte noch fehlende Schritt (Vertauschungsrelationen physikalischer Operatoren) wird mit Hilfe des Welle-Teilchen-Dualismus plausibel gemacht. Die Verallgemeinerung zur endgültigen

Form des quantenmechanischen Formalismus erfolgt über den von Dirac gewiesenen Weg.

Die folgenden Abschnitte enthalten eine Auswahl von Methoden zur Lösung typischer Probleme der Quantentheorie, die einen Minikatalog dessen bildet, was aus diesem Bereich zur Allgemeinbildung des Physikers gehören sollte. Der Text enthält nur wenige Anwendungsbeispiele. Eine wesentlich größere Anzahl ist in den Übungen enthalten. **Die selbständige Lösung möglichst vieler Übungsbeispiele ist für das Verständnis wesentlich.**

Die vorliegende Ausarbeitung enthält den dritten Teil einer viersemestrigen Kursvorlesung über Theoretische Physik für Hauptfachphysiker sowie eine Reihe von Abschnitten zur Abrundung des Lehrstoffes. Auf Begriffsbildungen und Methoden, die bereits in den ersten beiden Teilen dieser Vorlesungsreihe besprochen wurden, wird gelegentlich unter Angabe von Kapitel- und Abschnittsnummer verwiesen (wie z.B. M 5.4 = Mechanik Kap. 5, Abschnitt 4, ED 2.7 = Elektrodynamik Kap. 2, Abschnitt 7). Gegenüber den früheren Auflagen wurde der enthaltene Lehrstoff gestrafft und die Anzahl der Übungsbeispiele vergrößert. Dadurch ist es möglich geworden, einige Ergänzungen hinzuzufügen, ohne den Rahmen einer Vorlesungsausarbeitung zu sprengen. Der Zugang zur Quantentheorie über die Meßalgebra (der von Schwinger stammt) und die (auf Feynman zurückgehende) Veranschaulichung durch Schaltzeichen wurde jedoch beibehalten. Daß in der Folge algebraische Techniken gegenüber von Methoden aus der Theorie der Differentialgleichungen bevorzugt werden, liegt in der Natur dieses Zugangs.

Die vorliegende Ausarbeitung wurde mit dem Satzsystem $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ erstellt. Ich danke Frau S. Fuchs für die rasche und gewissenhafte Ausführung der schwierigen Schreibearbeit, Herrn Dr. F. Widder für Rat und Hilfe bezüglich $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ und allen Assistenten, die in einer Reihe von Jahren an den Übungen zur Vorlesung mitgewirkt haben, für ihre Unterstützung.

Graz, im Februar 1999

Heinrich Mitter

1. Grundbegriffe und grundlegende Struktur

1.1 Warum Quantentheorie ?

Die klassische Physik beschreibt viele Naturphänomene in ausreichender Weise, und zwar nicht nur im makroskopischen Bereich: die kinetische Gastheorie ist z.B. eine mikroskopische Theorie. Dennoch gibt es eine Reihe von physikalischen Sachverhalten, die von ihr nicht oder nicht zufriedenstellend erklärt werden. Einige davon sind die folgenden:

- (1) In der Physik makroskopischer Systeme (Gase, Flüssigkeiten, Festkörper):
Energieverteilung der Strahlung eines schwarzen Körpers. Thermodynamisches Verhalten bei niedrigen Temperaturen (z.B. spezifische Wärme). Kondensationsphänomene. Suprafluidität. Kohäsionsenergie von Flüssigkeiten und Festkörpern. Schallphänomene in Festkörpern (Gitterschwingungen, Phononen). Elektrische Leitfähigkeit (insbesondere Halbleiter, Supraleiter). Ferromagnetismus.
- (2) In der Chemie und Molekülphysik:
Form und Größe der Moleküle, Molekülspektren. Theorie der chemischen Bindung: Zustandekommen der homöopolaren Bindung, quantitative Aussagen (Stärke der Bindung). Mechanismus von Reaktionen (Reaktivität verschiedener Atomsorten).
- (3) In der Atomphysik:
Größe und Stabilität der Atome. Ladungsverteilung in Atomen. Atomspektren: diskretes Spektrum (scharfe Linien) angeregter Atome, Linienbreite, Linienaufspaltung in elektrischen und magnetischen Feldern (Stark- bzw. Zeemaneffekt). Wechselwirkung von Licht oder Teilchen mit Atomen: Photoeffekt, erzwungene Emission bzw. Absorption, Streuung von Teilchen an Atomen.
- (4) In der Kernphysik:
Größe und Stabilität der Kerne. Ladungsverteilung. Kernspektren. Kernreaktionen: Wechselwirkung von γ -Strahlen oder Teilchen mit Kernen, radioaktiver Zerfall, Kernspaltung, Kernfusion.

(5) In der Teilchenphysik:

Größe der Elementarteilchen. Elektromagnetische und mechanische Eigenschaften (Masse, Ladung, Drehimpuls, magnetisches Moment). Wechselwirkung von Strahlung mit Teilchen (z.B. Comptoneffekt). Teilchenreaktionen: Streuung, Zerfall, Erzeugung neuer Teilchen.

Die Quantentheorie (Quantenmechanik) kann diese Phänomene (mit Ausnahme des größten Teils der unter (5) genannten) qualitativ und quantitativ erklären. Die Quantentheorie ist keineswegs a priori eine Theorie mikroskopischer Systeme (Ferromagneten oder Supraleiter sind makroskopische Objekte), sondern ihr Formalobjekt sind **beliebige physikalische Systeme** (Teilchen, Kerne, Atome, Moleküle, Festkörper u.a.m.). Die klassische Physik ist in der Quantentheorie als Grenzfall enthalten. Der Übergang zu diesem Grenzfall ist allerdings nicht bei allen Problemen leicht durchzuführen. Es gibt Systeme, bei denen er mathematisch nicht existiert, die also kein klassisches Gegenstück haben.

Die Quantentheorie ist eine nichtrelativistische Theorie, d.h. die Geschwindigkeiten aller betrachteten materiellen Objekte müssen klein gegen die Lichtgeschwindigkeit sein, damit der Formalismus anwendbar ist. Für die Probleme der Teilchenphysik ist die nichtrelativistische Quantentheorie nicht ausreichend. Eine konsequente Inkorporation der Relativitätstheorie (die in der relativistischen Quantenfeldtheorie versucht wird) ist zwar möglich, doch sind der Durchführung dieses Programms immer noch Grenzen gesetzt.

Wie jeder Fortschritt in der Physik erfordert auch die Erweiterung der klassischen Physik zur Quantentheorie eine Erweiterung der Begriffsbildung. Gewisse bisher benützte und vertraute Begriffe stellen sich als unangemessen oder sogar widerspruchsvoll heraus, wenn neue Phänomene betrachtet werden sollen. Eine erfolgreiche Beschreibung muß mit einer Kritik des Begriffsapparates beginnen. Das ist in der Physik ein durchaus normaler (“evolutiver”) Vorgang. Die Tatsache, daß viele Physiker der älteren Generation die Quantentheorie als “revolutionär” empfunden haben (was gelegentlich, je nach Einstellung, zu obstinatem Widerwillen oder unkritischem Enthusiasmus führte), mag darauf zurückzuführen sein, daß die kritisierten Begriffe besonders vertraut waren. Die Begriffsbildung und der mathematische Apparat der Quantentheorie sind als besonders “unanschaulich” verrufen. Die folgenden Abschnitte versuchen zu zeigen, daß diese Meinung unberechtigt

ist. Die Quantentheorie kann anhand der Analyse durchaus “anschaulicher” experimenteller Situationen entwickelt werden und man kann sich an ihren Apparat (wie an alle Formalismen) gewöhnen.

In diesem Zusammenhang soll hervorgehoben werden, daß man die Grundgesetze der Quantentheorie genausowenig “abgeleitet” hat, wie etwa die Newtonschen Gesetze oder die Maxwell’schen Gleichungen. Auch die Entwicklung der Quantentheorie erfolgte nicht deduktiv, sondern in Form eines “Lernvorganges by trial and error”. Durch ein Zusammenwirken von Intuition, Genialität und Sachverstand wurden an einigen wenigen Fakten neue Begriffsbildungen und Formalismen abstrahiert, deren Zweckmäßigkeit und Konsistenz hinterher gezeigt wurde, indem man die daraus folgenden Aussagen für eine große Klasse von Phänomenen mit dem Experiment verglich. Ohne allen historischen Umwegen zu folgen, will die folgende Einführung diesen Aspekt herausstellen.

1.2 Die Quantennatur des Lichtes

Der Beginn der Quantentheorie wird durch die Hypothese markiert, daß die elektromagnetische Strahlung aus Lichtquanten (Photonen) besteht, also außer ihren Welleneigenschaften auch eine Teilchenstruktur hat. Max Planck war 1901 bei einer Untersuchung der Energieverteilung der Strahlung eines schwarzen Körpers zu einer mit dem Experiment übereinstimmenden Formel gelangt, indem er die für seine Zeit äußerst kühne Annahme machte, daß Strahlungsenergie der Frequenz ν nur in Portionen emittiert oder absorbiert werden kann, die ganzzahlige Vielfache von $E = h\nu$ sind. Dabei ist $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Joule·Sek. $\approx 4 \cdot 10^{-15}$ eV·Sek. eine Naturkonstante. Monochromatische Strahlung besteht daher aus Quanten (Photonen) dieser Energie.

Es ist amüsant festzustellen, daß man die Quantennatur des Lichtes mit freiem Auge beobachten kann. Betrachtet man eine sehr schwach beleuchtete Wand, so sieht man sie nicht gleichmäßig beleuchtet, sondern bemerkt eine sich rasch ändernde “körnige” Struktur. Sie resultiert aus der “körnigen” Struktur des Lichtes selbst: Man beobachtet statistische Schwankungen in der Anzahl der Photonen, die das Auge in einem gegebenen Zeitintervall treffen. Bei größerer Helligkeit sind diese Schwankungen relativ so klein, daß sie nicht mehr gesehen werden.

Starke Evidenz für die Korpuskularstruktur des Lichtes und die

Richtigkeit der Planckschen Beziehung zwischen Energie der Photonen und der Frequenz des Lichtes liefern zwei wichtige Experimente.

1. **Photoeffekt:** Eine mit Licht höherer Frequenz bestrahlte Kathode einer evakuierten Röhre emittiert Elektronen. Der zuerst von Hertz (1887) beobachtete Effekt wurde 1905 von Einstein in folgender Weise gedeutet: Absorbiert ein Elektron im Metall der Kathode ein Photon der Frequenz ν , so verläßt es die Kathode mit der kinetischen Energie

$$\frac{mv^2}{2} = h\nu - W \leq h\nu - \phi .$$

Dabei ist W die Energie, die es auf dem Weg durch das Metall durch Wechselwirkung mit anderen Teilchen (bzw. dem Gitter) verliert, das ist günstigstenfalls die Austrittsarbeit ϕ . Die Energie des Elektrons kann gemessen werden, indem man untersucht, welches verzögernde Potential es überwinden kann (Sperrspannung). Das experimentelle Resultat ist, daß es eine Schwelle gibt. Unterhalb einer bestimmten Grenzfrequenz (die einer Wellenlänge von etwa 680 nm entspricht) findet selbst bei sehr hoher Lichtintensität kein Photoeffekt statt, selbst wenn ein beschleunigendes Potential verwendet wird. Oberhalb der Schwelle steigt der Photostrom mit abnehmender Verzögerungsspannung an und erreicht einen (intensitätsabhängigen) Sättigungswert.

Klassisch ist zwar das Zustandekommen des Effektes verständlich. Eine elektromagnetische Welle induziert eine oszillatorische Bewegung der getroffenen Elektronen (sie werden von der Welle "geschüttelt"). Die Existenz einer Grenzfrequenz ist nicht verständlich. Die Zahl der emittierten Elektronen sollte mit wachsender Amplitude zunehmen, da bei größerer Amplitude mehr Elektronen "losgeschüttelt" werden, sie sollte aber von der Frequenz unabhängig sein, in krassem Gegensatz zum experimentellen Befund. Mit der Lichtquantenhypothese ist der experimentelle Befund nicht nur qualitativ, sondern auch quantitativ verständlich. Die lineare Abhängigkeit der Elektronenenergie von ν ist experimentell gut bestätigt. Die Steigung der Geraden liefert den Wert von h in guter Übereinstimmung mit andersartigen Experimenten.

2. **Comptoneffekt:** Streut man γ -Strahlen an Elektronen und trägt die Intensität (Anzahl) der gestreuten Photonen als Funktion ihrer Energie bei festem Streuwinkel auf, so beobachtet man bei größeren Winkeln zwei Maxima: eines bei der Energie der einfallenden Photonen und ein nach kleineren Energien verschobenes Maximum. Durch Untersuchung der Winkelabhängigkeit der Lage des verschobenen Maximums

findet man, daß Energie- und Impulssatz für den Zusammenstoß eines Photons mit einem Elektron erfüllt sind:

$$\begin{aligned} E_{(\gamma)} + E_{(e)} &= E'_{(\gamma)} + E'_{(e)} \\ \mathbf{p}_{(\gamma)} + \mathbf{p}_{(e)} &= \mathbf{p}'_{(\gamma)} + \mathbf{p}'_{(e)} . \end{aligned}$$

Dabei ist für anfangs ruhende Elektronen $\mathbf{p}_{(e)} = 0$, $E_{(e)} = m_{(e)}c^2$ sowie $E_{(\gamma)} = c|\mathbf{p}_{(\gamma)}|$ (ebenso für $E'_{(\gamma)}$), denn das Photon ist ein relativistisches Teilchen mit der Masse Null (vgl. M 5.5). Die unverschobene Spitze entspricht elastischen Zusammenstößen der γ -Quanten mit ganzen Atomen. Wegen der relativ großen Masse des Atoms ist der Energieverlust des γ -Quants zu klein, um sich bemerkbar zu machen.

Nach der klassischen Theorie würde man zwar eine Frequenzverschiebung erwarten: Berechnet man das Verhalten eines Elektrons in einem elektromagnetischen Wechselfeld, so sieht man, daß das Elektron nicht nur in Schwingung versetzt wird, sondern außerdem gleichmäßig beschleunigt wird. Die resultierende Streustrahlung in einer gegebenen Richtung hat wegen des Dopplereffektes eine verschobene Frequenz. Die Dopplerverschiebung hat aber keinen festen Wert, sondern sollte mit der Zeit zunehmen. Man würde daher nicht zwei scharfe Maxima, sondern eine breite Kurve erwarten, im scharfen Gegensatz zum Experiment. Die Erklärung mit Hilfe der Lichtquantenvorstellung ist nicht nur im Einklang mit dem Experiment, sondern außerdem besonders einfach. Man braucht nur die (relativistische) Kinematik des elastischen Stoßes von zwei Teilchen (vgl. M 5.8, Beispiel 20).

Die physikalischen Eigenschaften der Photonen sind der klassischen Elektrodynamik zu entnehmen. Nach dieser transportiert ein Lichtstrahl Energie und Impuls. Ist das Licht zirkular polarisiert, so transportiert der Strahl außerdem Drehimpuls. Diese Resultate der Maxwell'schen Theorie können experimentell geprüft werden. Der Impuls kann z.B. als Lichtdruck mit einem an einem Torsionsfaden aufgehängten Spiegel gemessen werden; der Drehimpuls kann z.B. für eine Mikrowelle mit einem an einem Faden aufgehängten Absorber nachgewiesen werden. Aus den Maxwellgleichungen erhält man quantitative Zusammenhänge zwischen der absorbierten Energie und dem damit übertragenen Impuls bzw. Drehimpuls (vgl. ED 2.9, insbes. Beispiel 2.29). Im Photonenbild bedeutet das, daß wir einem Photon mit der Energie $E = h\nu = \hbar\omega$ den Impuls $p = h\nu/c = \hbar\omega/c$ und (bei zirkularer Polarisation) den Drehimpuls $\pm\hbar$ zuordnen müssen (anstelle

der Planckschen Konstante h tritt sehr oft die Kombination $\hbar = h/2\pi$ auf, für die wir daher eine eigene Abkürzung eingeführt haben). Durch die angedeuteten Absorptionsexperimente ist das zwar nicht gesichert, denn sie bestimmen nur den mittleren Impuls und Drehimpuls. Der Comptoneffekt beweist hingegen die Richtigkeit der Impulszuordnung für das einzelne Photon. Für den Drehimpuls kann man die Aussage aus der Drehimpulsänderung angeregter Atomniveaus bei Abstrahlung oder Absorption eines Lichtquants erschließen.

1.3 Energieniveaus

Eine wichtige Basis der Quantentheorie ist die empirische Feststellung, daß gewisse Parameter, durch die man physikalische Systeme charakterisiert, diskrete Werte annehmen, die durch deutliche Intervalle getrennt sind. Ein Beispiel dafür sind die Frequenzen des Lichtes, das von angeregten Atomen ausgesandt wird.

Betrachtet man eine elektrische Entladung in einem Gas, z.B. Quecksilberdampf, und trägt die Intensität des ausgesandten Lichtes als Funktion der Frequenz ν auf, so findet man ein Linienspektrum. Es stellt sich heraus, daß zwar der absolute Wert der Intensität von der Anzahl der Atome in der Entladung abhängt, daß aber die Lage der Linien davon unabhängig ist und daher ein Charakteristikum der Atomsorte (Quecksilber Hg) darstellt. Wir dürfen wohl annehmen, daß alle Hg-Atome gleich aufgebaut sind und daß man ihre Wechselwirkung vernachlässigen kann, wenn das Gas genügend verdünnt ist, sodaß die Atome im Mittel genügend weit voneinander entfernt sind. Wir müssen dann die Lage der Spektrallinien als charakteristisch für das einzelne Atom ansehen. Wenn das Atom einzelne Photonen der Energie $E = h\nu$ emittiert (Lichtquantenhypothese) und die Energie dabei erhalten bleibt, so folgt aus der Existenz scharfer Linien, daß die Atome diskrete Energieniveaus haben. Wenn ein Atom ein Photon emittiert, so verliert es den entsprechenden Energiebeitrag. Da die Frequenz der Photonen diskret ist (scharfe Linien), müssen es auch die Energieniveaus des Atoms gewesen sein.

Geht also ein Atom von einem angeregten Zustand E_1 in einen tieferen E_2 über, so strahlt es ein Photon der Frequenz $h\nu_{12} = E_1 - E_2$ ab (N. Bohr). Diese Annahme erklärt das Rydberg-Ritzsche Kombinationsprinzip (das empirisch gefunden worden war): Für ein Atom charakteristische Frequenzen erfüllen Beziehungen in der Form

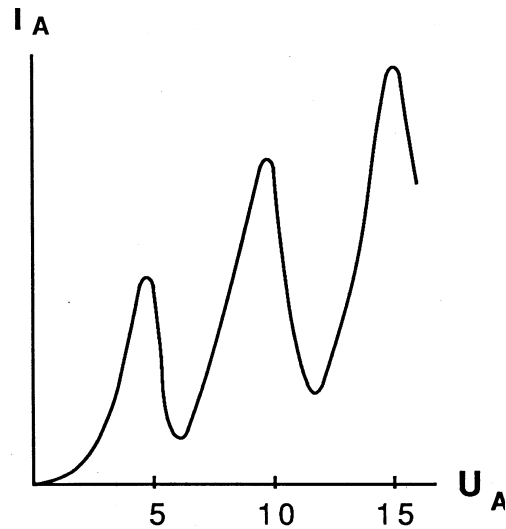
$$\nu_{3,1} = \nu_{3,2} + \nu_{2,1} .$$

Aus der Bohrschen Annahme ist das sofort klar:

$$E_3 - E_1 = E_3 - E_2 + E_2 - E_1 .$$

Mit der Bohrschen Hypothese können alle Atomspektren konsistent interpretiert werden. Ein sehr umfangreiches Tatsachenmaterial (viele Spektrallinien) wird mit Hilfe von verhältnismäßig wenigen Energieniveaus der einzelnen Atome verständlich. Die Annahme ist daher zweckmäßig. Sie reduziert das empirische Material beträchtlich. Quantitativ sind die gemessenen Energiedifferenzen von der Größenordnung eV: Die angeregten Niveaus aller Atome liegen daher um Beträge dieser Größenordnung über dem Grundniveau.

Der Franck-Hertz-Versuch testet die Vorstellung diskreter Energieniveaus direkt. Die Versuchsanordnung ist die folgende: Die Glühkathode einer Quecksilberdampf-Entladungsröhre emittiert Elektronen, die von einer angelegten Anodenspannung U_A beschleunigt werden. Das Gitter der Röhre liegt gegenüber der Anode auf einer kleinen positiven Spannung U_g ($\approx 1/2$ V). Gemessen wird der Anodenstrom I_A als Funktion der Anodenspannung U_A . Wenn die Elektronen das Gas passieren, so stoßen sie mit den Quecksilberatomen zusammen. Verliert ein Elektron bei einem Stoß soviel Energie, daß seine kinetische Energie nach dem Stoß kleiner als eU_g ist, so kann es die Anode nicht erreichen. Das Resultat der Messung ist die folgende Kurve:



Der Strom nimmt also zunächst zu. Etwas unterhalb von 5 V sinkt er plötzlich ab. Bei höherer Spannung nimmt er wieder zu, usw. Besonders viele Elektronen verlieren daher durch einen Zusammenstoß mit Hg-Atomen eine Energie von 5 eV. Ein solcher Stoß **muß** unelastisch sein, denn diese Energie reicht nicht aus, um das Hg-Atom als Ganzes in Bewegung zu setzen. Die Energie wird daher zur Anregung des Atoms verwendet. Das Hg-Atom muß daher einen Anregungszustand von etwa 5 eV haben. Das weitere Verhalten der gemessenen Kurve stützt die Annahme: Der nächste Abfall entspricht Elektronen, die mit zwei Hg-Atomen zusammengestoßen sind usw. Der aus dem Experiment bestimmte Wert von 4.9 ± 0.1 eV für den Anregungszustand stimmt mit dem spektroskopisch bestimmten von 4.886 eV gut überein. Durch Verbesserung der Apparatur konnten auch höhere Niveaus gemessen werden.

Kernniveaus: Auch Atomkerne haben diskrete Energieniveaus und daher ein Linienspektrum. Die quantitativen Verhältnisse sind verschieden. Die Anregungsenergien sind von der Größenordnung von 100 keV. Man kann die Niveaus sowohl spektroskopisch (γ -Spektren) als auch durch Stöße (Proton-Kernstreuung) untersuchen.

Elementarteilchenniveaus: Auch bei den Elementarteilchen hat man so etwas wie "angeregte Zustände" gefunden (z.B. solche des Protons). Die Anregungsenergien liegen in der Größenordnung GeV ($1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV}$). Die Zustände gehen aber vorzugsweise unter Emissionen von Teilchen (z.B. Pionen) in den entsprechenden Grundzustand über. Da die Relativitätstheorie eine wesentliche Rolle spielt, reicht die nichtrelativistische Quantentheorie zur Beschreibung dieses Phänomens nicht aus.

1.4 Der Begriff des Zustands

Es gibt kaum Experimente der Atom-, Kern- oder Teilchenphysik, die mit Einzelobjekten (z.B. einem einzelnen Atom) gemacht werden. Bei der weitaus größten Zahl der Versuche arbeitet man mit sehr vielen identischen Objekten. Man streut z.B. nicht ein Elektron an einem Proton, sondern einen Elektronenstrahl an einem aus vielen Protonen bestehenden Target, man mißt nicht die Frequenz eines Photons, das von einem Quecksilberatom ausgesandt wird, sondern diejenige eines Lichtstrahls aus einer Gasentladung, in der viele Atome vorhanden sind. Wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt wurde, erhält man trotzdem eine

Information über das einzelne Objekt, da sich die vielen am Versuch beteiligten Objekte gleich verhalten. Diese Identität der Objekte (Elektronen, Protonen, Quecksilberatome, Photonen usw.) ist eigentlich per definitionem gegeben: Wir **nennen** ein Quecksilberatom ein Gebilde, das Eigenschaften hat, die alle anderen Quecksilberatome auch haben, so daß es von diesen nicht unterscheidbar ist. Wir treffen also eine Klasseneinteilung, die so gemacht ist, daß die Elemente einer Klasse ununterscheidbar sind. Ob eine solche Einteilung genügend fein ist und ob die dafür verwendeten Merkmale zweckmäßig sind, kann von vornherein nicht entschieden werden, sondern bedarf einer näheren Untersuchung. Die Klasse "ruhende Quecksilberatome" (mit allen chemischen und physikalischen Kriterien, die ein ruhendes Hg-Atom charakterisieren) wird z.B. von einem Moment an nicht mehr genügend gut definiert erscheinen, in dem man feststellt, daß solche Atome im Grundniveau und in Anregungsniveaus existieren können, wobei man die letzteren von den ersteren sehr wohl unterscheiden kann. Hingegen scheint es kein Kriterium zu geben, nach dem man ruhende Hg-Atome im Grundniveau voneinander unterscheiden kann.

Man beachte, daß eine solche Klasseneinteilung durch die Existenz von Variablen, die **diskrete** Werte annehmen können (wie z.B. die Energie bei Energieniveaus von Atomen oder Kernen) stark erleichtert, wenn nicht überhaupt erst ermöglicht wird. Das heißt nicht, daß man nur diskrete Variablen für die Klasseneinteilung heranziehen kann. Bewegte Hg-Atome sind von ruhenden unterscheidbar. Die Geschwindigkeit kann kontinuierlich verändert werden. Gäbe es aber überhaupt keine diskreten Variablen, so erschiene eine solche Klasseneinteilung jedenfalls unnatürlich und man käme nicht auf die Idee, damit etwas anfangen zu wollen.

Dieser Begriff der Klasseneinteilung ist für die Quantentheorie von fundamentaler Bedeutung, denn es zeigt sich, daß man solche Einteilungen für alle bisher untersuchten atomaren und subatomaren Systeme treffen kann. Sie ermöglicht eine Aussage über jedes einzelne Objekt der Klasse, die wir in folgender Weise präzisieren wollen: **Sei eine Klasse von ununterscheidbaren Objekten in hinreichender Weise so beschrieben, daß man sie von allen anderen Klassen unterscheiden kann. Wir sagen dann: Die Objekte sind in dem durch diese Beschreibung definierten Zustand.**

Diese Begriffsbildung ist von den Energieniveaus (= Energiezuständen) von Atomen abstrahiert. Die Objekte, um die es sich handelt,

können beliebige physikalische Systeme sein (Elektronen, Atome, Moleküle, Festkörper usw.). Die Merkmale, die die betrachtete Klasse von allen anderen unterscheiden, charakterisieren den Zustand. Da wir Physik treiben, werden wir dafür Zahlwerte beobachtbarer Größen verwenden. Es kann sich um Größen handeln, die auch in der klassischen Physik bedeutungsvoll sind (Energie, Impuls, Drehimpuls, Ladung usw.), aber auch um rein quantenmechanische Größen ohne klassisches Gegenstück. Die Werte der Zustandsvariablen können diskret, also quantisiert sein (z.B. die Energiewerte, welche die unteren Anregungszustände eines Atoms charakterisieren) oder kontinuierlich (z.B. die Energiewerte eines freien Teilchens). Ob die Beschreibung eines Zustands durch die Werte bestimmter Observabler zweckmäßig, ausreichend und eindeutig ist, kann man, wie schon angedeutet, a priori nie sagen. Man ist nie sicher, ob man ein wesentliches Merkmal vergessen hat oder nicht. Neue Ergebnisse können dazu führen, eine Klasseneinteilung zu verfeinern: nämlich dann, wenn es sich herausstellt, daß es zusätzliche Merkmale gibt, die es gestatten, bisher als ununterscheidbar betrachtete Objekte doch zu unterscheiden. Jahrzehntlang glaubte man z.B., daß es nur eine Sorte von Neutrinos gibt; später wurden zwei weitere Sorten gefunden. Es kann sich aber auch herausstellen, daß eine Unterteilung zu fein war, d.h. nach Gesichtspunkten erfolgte, die sich später empirisch als sinnlos herausstellen. So sah man einige Jahre lang die verschiedenen Zerfallsmodi des K -Mesons als Zerfälle verschiedener Teilchen an. Erst nach einiger Zeit stellte es sich heraus, daß es sich um dasselbe Teilchen handelt, das auf verschiedene Weisen zerfallen kann. Die beste Beschreibung resultiert oft erst nach einem langwierigen Denkprozeß, der sowohl durch formale, theoretische Argumente als auch durch Intuition, Vermutung, Inspiration bestimmt ist (“educated and inspired guess”). Entscheidendes Kriterium ist und bleibt aber die Prüfung durch das Experiment.

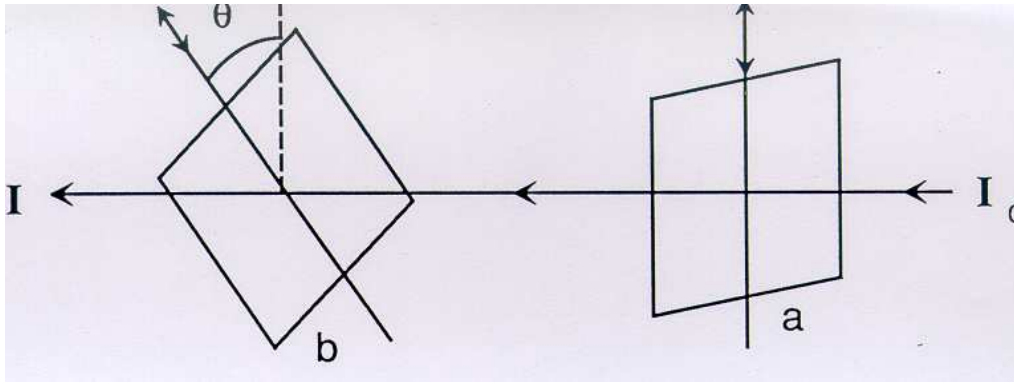
Die Quantentheorie stellt sich nicht nur die Aufgabe, solche Zustandsvariablen und ihre Werte aufzusuchen, sondern auch die Zustandsänderungen (Übergänge eines Systems aus einem Zustand in einen anderen) zu beschreiben, d.h. zu klären, welche Übergänge möglich sind und welche nicht bzw. mit welcher Häufigkeit Übergänge zustandekommen. Der quantenmechanische Formalismus wird daher prinzipiell ein Kalkül mit **Zuständen** und **Observablen** sein. Die Quantentheorie ist weder eine Wellen-, noch eine Teilchenmechanik, sondern eine Theorie von Zuständen.

2. Kinematik von Quantenzuständen

2.1 Ein Experiment mit polarisiertem Licht und seine Interpretation

Es geht nun darum, diesen quantenmechanischen Kalkül zu erarbeiten. Wie anfangs erwähnt, soll hier nicht der (vergebliche) Versuch gemacht werden, diesen Kalkül “herzuleiten”, er soll aber auch dem Studenten nicht einfach “an den Kopf geworfen” werden. Wir wollen vielmehr versuchen, ihn aus der Betrachtung einfacher Experimente zu abstrahieren. Zu diesem Zweck betrachten wir solche mit polarisiertem Licht und versuchen eine Interpretation im Rahmen der Korpuskulartheorie, also in Termen von Photonen. Alle experimentellen Befunde können in diesem Fall (solange die Intensität genügend groß ist) auch mit der klassischen Elektrodynamik (Wellentheorie des Lichtes) verstanden werden. Da es aber andere Experimente gibt, die nur in Termen von Photonen verstanden werden können, muß es auch möglich sein, die Polarisationsexperimente im Rahmen der Quantentheorie zu beschreiben, denn diese soll ja die klassische Theorie enthalten. Wir werden auf diese Weise Aufschluß über typisch quantenmechanische Verhaltensweisen erhalten, die auch für Systeme zutreffen, bei denen eine klassische Interpretation nicht möglich ist. Gegenüber anderen Objekten haben Photonen einige Vorteile. Sie haben untereinander (nahezu) keine Wechselwirkung, ein Experiment mit einem Photonstrahl gibt daher Aufschluß über das einzelne Photon; die Charakterisierung der Zustände ist einfach; die Experimente erfordern keine komplizierten und schwer verständlichen Apparate; die unserer Interpretation stets zugrundeliegende Annahme “idealer” Apparate (z.B. idealer Polarisatoren) stellt kein allzu großes Maß an Idealisierung dar, d.h. die Experimente sind zum größten Teil praktisch durchführbar.

Wir stellen einen linear polarisierten Lichtstrahl her, indem wir einen unpolarisierten Strahl durch einen Polarisator a (z.B. eine Polarisationsbrille aus Plastik) treten lassen. Ein solcher läßt nur den Anteil des Lichtes durch, der parallel zu einer bestimmten Richtung (Durchlaßrichtung) polarisiert ist. Den polarisierten Strahl lassen wir durch einen zweiten Polarisator b treten, dessen Durchlaßrichtung gegenüber der des ersten Polarisators um einen Winkel θ verdreht ist. Wir messen die durchgelassene Intensität als Funktion von θ :



Das Resultat ist $I = I_0 \cos^2 \theta$. Im Rahmen der klassischen Elektrodynamik ist es leicht zu interpretieren. Eine ebene, linear polarisierte elektromagnetische Welle, die in der z -Richtung läuft, wird durch einen elektrischen Feldvektor \mathbf{E} und einen magnetischen \mathbf{B} mit den Komponenten

$$E_y = -B_x = A \cos(kz - \omega t)$$

$$E_x = E_z = B_y = B_z = 0$$

$$\omega = 2\pi\nu, \quad k = \frac{\omega}{c}$$

beschrieben. Der zweite Polarisator läßt nur den Anteil des Lichtes durch, dessen \mathbf{E} -Vektor parallel zur Durchlaßrichtung ist, das ist die Projektion von E_y auf diese Richtung, also $E_y \cos \theta$. Die dazu senkrechte Komponente wird absorbiert. Die Intensität ist proportional \mathbf{E}^2 , also $\sim E_y^2 \cos^2 \theta$.

Im Sinn von Abschnitt 1.4 versuchen wir nun eine quantenmechanische Beschreibung. Wir fassen den Lichtstrahl als einen Strahl von Photonen auf. Den **Zustand** eines Photons können wir dann durch die Energie, die Bewegungsrichtung und die Polarisation charakterisieren. Wir denken uns Energie und Richtung fixiert und betrachten nur die Polarisation. Wir müssen uns zuerst davon überzeugen, ob durch Angabe der Polarisation wirklich eine Klasseneinteilung der vorne besprochenen Art gegeben ist. Es muß also einen eindeutigen Test geben, ob vorgegebene Teilchen in der betreffenden Klasse sind oder nicht. Ein solcher ist leicht durchzuführen. Stellen wir den Polarisator b parallel zu a ($\theta = 0$) und messen die Intensität, so können wir feststellen: Die Photonen eines gegebenen Strahls sind dann und nur dann im Zustand der y -Polarisation, wenn sie einen Polarisator mit der Durchlaßrichtung parallel zu y ungeschwächt passieren.

Als nächstes müssen wir untersuchen, ob eine weitere Unterteilung der Klasse möglich ist. Wenn wir außer der Polarisation noch Energie und Bewegungsrichtung vorgeben, ist dies nach allgemeinem physikalischem Wissen nicht der Fall, d.h. diese Angaben legen den Zustand fest. Das ist keineswegs evident, sondern das Resultat vieler Experimente, das geändert werden müßte, wenn uns neue Resultate dazu zwingen.

Es muß beachtet werden, daß wir zur Zustandsdefinition den Begriff des elektromagnetischen Feldes **nicht** verwendet haben. Es war für die Definition des Polarisationszustandes nicht notwendig, die klassische Aussage $E_y \neq 0, E_x = E_z = 0$ zu benutzen. Sie kann auch mit keinem der vorhin beschriebenen Experimente gemessen werden. Eine eingehende quantenmechanische Analyse zeigt, daß der Begriff "elektromagnetisches Feld eines Photons" physikalisch sinnlos ist. Ein solches kann erst realisiert werden, wenn viele Photonen vorhanden sind. Das Versagen dieses Begriffes beschränkt aber in keiner Weise unsere Möglichkeit, Polarisationszustände experimentell herzustellen und zu untersuchen. Daß wir einen **Meßapparat** (Polarisator) dazu verwendet haben, einen Zustand zu erklären, ist für die Quantentheorie typisch. Dieser Apparat ist alles, was man für die Beschreibung des Zustandes braucht und diese so gegebene Beschreibung funktioniert sowohl für wenig intensive Strahlen, für die man kein elektrisches Feld definieren kann, als auch für intensive, für die eine klassische Wellenbeschreibung möglich wäre.

Ein weiterer zu beachtender Punkt ist, daß unsere Zustandsdefinition die Registrierung **vieler identischer** Photonen enthält: Wenn das Vorliegen des Zustandes festgestellt werden soll, müssen Intensitätsmessungen vorgenommen, d.h. viele Teilchen gezählt werden. Das kann man auch bei intensitätsschwachen Strahlen tun, indem man als Nachweisgerät einen Photovervielfacher genügender Empfindlichkeit verwendet und über genügend lange Zeiten registriert. **Man bestimmt also den Zustand jedes Mitglieds einer Klasse von identisch präparierten Objekten.** Den Zustand eines einzelnen Photons kann man offenbar auf diese Weise nicht bestimmen: Registriert man hinter dem Polarisator einen Impuls, so sagt dieser nichts über die Polarisation des Teilchens **vor** dem Polarisator aus, denn es kann z.B. auch einem schräg polarisierten Strahl entstammen. Daß es nicht sinnvoll ist, den Zustandsbegriff anzuwenden, wenn es keine Gesamtheit identischer Objekte gibt, liegt also am Begriff selbst (bzw. an seiner Definition). Wir halten also fest: Ein Zustand **bezieht** sich auf ein **einzelnes Objekt** (y -Polarisation **eines**

Photons). Spricht man von einem Objekt **in** diesem Zustand, so impliziert das, daß das Objekt einer Gesamtheit von identisch präparierten Objekten angehört (daß es also ein Photon eines y -polarisierten Strahls ist).

Nun interpretieren wir das Experiment mit dem um den Winkel θ verdrehten zweiten Polarisator im Sinn der Quantentheorie. Es wäre naheliegend anzunehmen, daß der zweite Polarisator jedes Photon irgendwie in zwei neue spaltet, von denen eines parallel zur Durchlaßrichtung polarisiert ist und durchgelassen wird, das zweite hingegen senkrecht dazu polarisiert ist und absorbiert wird. Wenn das so wäre, müßte aber der durchgelassene Strahl aus genauso vielen Photonen wie der einfallende bestehen. Um die niedrigere Intensität zu erklären, müßte man annehmen, daß der durchgelassene Strahl im Mittel weniger Energie transportiert. Wegen $E = h\nu$ müßte sich dann die Frequenz ändern. Wie man experimentell bemerkt, ist das nicht der Fall. Jedes Photon hat nach Durchdringen des Polarisators genau dieselbe Energie wie vorher. Die Abnahme der Intensität bedeutet daher die Abnahme der **Anzahl** der Photonen pro Sekunde. Wir schließen, daß ein Bruchteil $\cos^2 \theta$ der auf den zweiten Polarisator fallenden Photonen durchgelassen und ein Bruchteil $\sin^2 \theta$ absorbiert wird. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß Photonen in dem durch den Polarisator a bestimmten Zustand den Polarisator b durchdringen, ist $\cos^2 \theta$, wobei θ der Winkel zwischen den Durchlaßrichtungen der Polarisatoren ist.

Man könnte gegen diese Interpretationen einwenden, daß sich die identisch präparierten Photonen in dem durch a hergestellten Zustand nicht gleich benehmen, wenn sie auf b treffen. Dies bedeutet aber nur, daß man mit dem Begriff "identisch" vorsichtig umgehen muß: Er ist so gemeint, daß sich die Teilchen dann identisch benehmen, wenn nach ihrer Identität gefragt wird, daß es also eine Anordnung gibt, gegenüber der sie sich identisch verhalten (nämlich die mit $\theta = 0$).

Die angeführte statistische Interpretation bezieht sich zunächst auf **viele** Photonen, es war von einem absorbierten bzw. durchgelassenen Bruchteil die Rede. Man kann aber auch für ein **einzelnes** Photon keine exakten, sondern nur statistische Aussagen machen: Die Wahrscheinlichkeit für Absorption ist $\sin^2 \theta$, die für Durchdringen $\cos^2 \theta$. Das kann man experimentell sehen, indem man das Experiment mit einem sehr intensitätsschwachen Strahl und einem Photovervielfacher durchführt. Dieser spricht nur gelegentlich an, die Impulse sind in der Zeit stati-

stisch verteilt, aber immer solche eines “ganzen” Photons (es kommen nie “halbe” Teilchen an). Wird die Gesamtzahl der Impulse groß, so nähert sich die Zählrate (Impulse pro Zeiteinheit) mit vorhandenem zweiten Polarisator dem $\cos^2 \theta$ -fachen derjenigen, die man ohne zweiten Polarisator feststellt. Registriert man über kürzere Zeiten, so schwankt die Zählrate genau in der Weise, wie das bei statistisch unabhängigen Ereignissen der Fall sein muß. Die $\cos^2 \theta$ -Verteilung ist nur näherungsweise erfüllt.

Die statistische Interpretation wird also durch das Experiment gestützt (mit Feynman müßte man sagen: “Yes! That’s the way photons go”). Die Teilchennatur der Photonen bleibt durch sie gesichert, es gibt keine “halben” Photonen. Sie stellt den auffallendsten Unterschied zwischen klassischer und Quantenphysik dar. Die klassische Beschreibung ist vollkommen deterministisch: Bei gegebenen Anfangsbedingungen kann (wenigstens im Prinzip) das Resultat jedes Experimentes genau berechnet werden. In der Quantentheorie ist das anders: Der Zustand enthält die maximale mögliche Information über ein Kollektiv identischer Objekte. Über die meisten Experimente können nur statistische Aussagen gemacht werden.

Dieser Zug der Quantentheorie wurde von vielen Physikern kritisiert, vor allem von solchen der älteren Generation, die noch mit der klassischen Physik aufgewachsen sind (z.B. Einstein). Es hat viele Versuche gegeben, nach “verborgenen” Variablen zu suchen, die eine deterministische Beschreibung ermöglichen sollten. Keiner von ihnen war in dem Sinn erfolgreich, daß man dabei auf Variablen mit besonderer physikalischer Bedeutung gestoßen ist. Es ist aber zu beachten, daß die **Wahrscheinlichkeit** für jedes Experiment **streng determiniert** ist: es ist Aufgabe der Quantentheorie, sie zu berechnen.

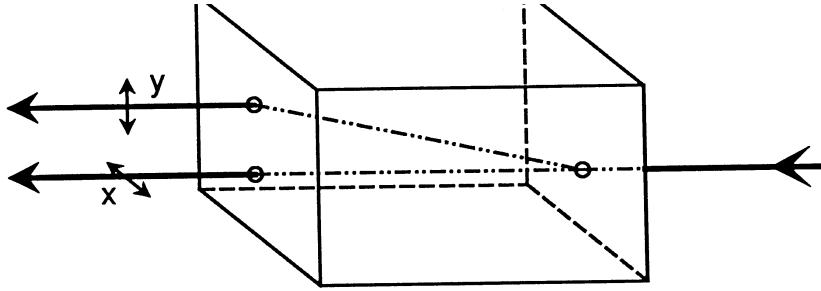
Ein weiterer, von der klassischen Physik her ungewohnter Aspekt der Quantentheorie kann an dem Experiment ebenfalls abgelesen werden. Die Photonen, die den zweiten Polarisator b durchquert haben, sind nicht mehr im selben Quantenzustand wie vorher. Wie man mit einem dritten Polarisator leicht nachmessen kann, sind sie in dem durch die Durchlaßrichtung von b bestimmten Zustand. Diese **Änderung des Zustandes durch eine Messung** ist ein wesentlicher Zug der Quantentheorie. Wenn wir feststellen wollen, ob ein gegebenes System von Teilchen in einem bestimmten Quantenzustand ist oder nicht, so müssen wir den entsprechenden “Filtertest” durchführen: Fällt er positiv aus,

so ändert sich der Zustand nicht. Ein zweiter Test gibt dasselbe Resultat. Fällt der erste Test aber negativ aus, so ändert er den Zustand, ein zweiter Test fällt positiv aus. Bei klassischen Systemen kann man die Störung des Systems durch die Messung vernachlässigen (d.h. als beliebig klein ansehen), da man es mit großen Objekten zu tun hat. Bei Quantensystemen ist diese Vernachlässigung nicht erlaubt: Der Zustand wird bei einer Messung immer verändert, wenn man nicht gerade nach dem Zustand testet, in dem das System vor der Messung war.

Auch diese Beeinflussung des Zustandes durch die Messung ist bereits in unserem Zustandsbegriff mitangelegt, denn wir hatten den Zustand mit Hilfe von Filtertests definiert. Diese Definition entspricht dem, was man von einer Messung physikalisch erwartet: Eine solche soll Aufschluß über die **gegenwärtige** Situation eines Systems geben, und zwar in einer solchen Weise, daß man mit Hilfe einer Theorie Aussagen über die **zukünftige** Entwicklung machen kann. Z.B. sollten zwei kurz nacheinander ausgeführte Messungen derselben Größe dasselbe Resultat geben, was bei unserer Definition von Polarisationsmessungen mit Hilfe von Filtertests offenbar der Fall ist. Aussagen über die **Vorgeschichte** gehören offenbar nicht notwendig zum Begriff der Messung. Um sie machen zu können, müßte man die Wirkung des Meßmittels auf das gemessene Objekt genau kennen und das ist im allgemeinen nicht der Fall.

2.2 Analytoren, Projektoren, Analytorkreise

Die Interpretation des Polarisationsversuchs hat einen ziemlich tiefen Einblick in die grundsätzliche Struktur der Quantentheorie gewährt, wir sind aber dem mathematischen Formalismus noch nicht nähergekommen. Um in dieser Richtung Fortschritte zu machen, betrachten wir zunächst einen Apparat, der zur Analyse von polarisiertem Licht besser geeignet ist, als ein Plastikpolarisator: nämlich einen doppelt brechenden Kristall (z.B. Kalkspat). Dieser hat die Eigenschaft, einen unpolarisierten Lichtstrahl in zwei senkrecht zueinander linear polarisierte Anteile aufzuspalten. Wir nennen die durch den ordentlichen Strahl definierte Polarisationsrichtung die x -Richtung und die durch den außerordentlichen Strahl definierte die y -Richtung und den ganzen Kristall einen xy -Analytator.

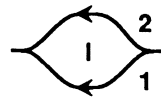


Wir werden den Apparat (und entsprechende analoge Verallgemeinerungen) oft verwenden und führen daher ein kurzes Schaltzeichen ein. Dazu bezeichnen wir die Polarisationsrichtung allgemein mit $l : l1$ entspricht x , $l2$ entspricht y . Als Schaltzeichen verwenden wir



l -Analysator

Schalten wir einen solchen Analysator und einen entsprechenden umgekehrten hintereinander, der so beschaffen ist, daß er den ursprünglichen Strahl voll rekonstruiert, so nennen wir die Anordnung einen **Analysatorkreis** und schreiben dafür



l -Analysatorkreis

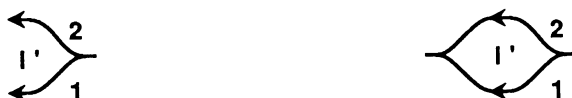
Per definitionem ändert eine solche Anordnung an einem Strahl nichts. Um sie praktisch herzustellen, muß man zwischen den Analysatoren in einen der Strahlengänge ein Stück durchsichtiges Material einbringen, damit die relative Phasenbeziehung bei der Rekombination der Strahlen dieselbe wie vor der Trennung ist.

Blockieren wir zwischen den Analysatoren einen der Strahlen, so erhalten wir einen Polarisator. Wir nennen ihn einen **Projektor** auf die entsprechende Polarisationsrichtung. Das Schaltzeichen dafür ist



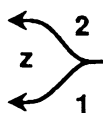
2- bzw. 1-Projektor

Statt nach den Richtungen x, y (bzw. 1,2) zu analysieren, können wir auch nach zwei anderen, zueinander und zur Strahlrichtung senkrechten Richtungen analysieren, indem wir z.B. den Analysator (bzw. die entsprechenden anderen Anordnungen) um die Strahlrichtung um einen festen Winkel drehen. Wir bezeichnen die entsprechenden Apparate mit



usw. Eigentlich müßte der Winkel, um den gedreht wurde, dazugeschrieben werden. Der Einfachheit halber lassen wir ihn weg.

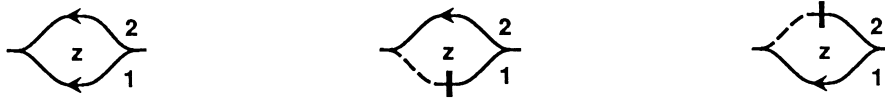
Statt mit linear polarisiertem Licht kann man auch mit zirkular polarisiertem arbeiten. Klassisch wird eine zirkular polarisierte ebene Welle, die in der z -Richtung läuft, durch einen \mathbf{E} -Vektor beschrieben, der mit konstanter Winkelgeschwindigkeit um die z -Achse rotiert (vgl. ED 3.4). Je nach dem Drehsinn kann man zwischen rechtszirkularer und linkszirkularer Polarisation unterscheiden. Eine zirkular polarisierte Welle kann man durch Überlagerung von zwei senkrecht zueinander linear polarisierten Wellen mit gleicher Amplitude und 90° Phasenverschiebung erzeugen. Um einen zirkular polarisierten Strahl im Teilchenbild interpretieren zu können, muß man entsprechend einen rechtszirkularen ($z1$), bzw. linkszirkularen ($z2$) Polarisationszustand für das Photon definieren. In apparativer Weise geschieht das mit Hilfe eines entsprechenden Analysators, den wir so bezeichnen:



z -Analysator

Praktisch kann ein solcher Analysator z.B. aus einem Quarzkristall bestehen: Quarz ist doppelbrechend, wobei die beiden gebrochenen Strahlen rechts- bzw. linkszirkular polarisiert sind. Bei Verdrehen um

die Strahlachse ändert sich wegen der Rotationssymmetrie an der Struktur der auslaufenden Strahlen nichts. Analog wie für lineare Polarisation kann man Analysatorkreise bzw. Projektoren für zirkuläre Polarisation konstruieren, die wir durch die Schaltzeichen

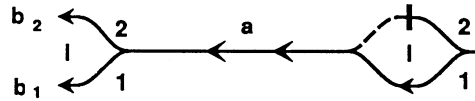


charakterisieren.

Die beschriebenen Apparate sind dazu geeignet, Polarisationszustände eines Strahls herzustellen und zu untersuchen. Offenbar stellt ein Projektor aus einem beliebigen Strahl einen solchen her, dessen Photonen alle in dem Polarisationszustand sind, den der Projektor durchläßt. Mit einem Analysator kann man untersuchen, ob ein Strahl polarisiert ist. Setzt man z.B. in den Strahl einen linearen l' -Analysator ein, so ist der Strahl $1'$ polarisiert, wenn man im $1'$ -Ausgangskanal die volle und im $2'$ -Ausgangskanal die Intensität 0 feststellt. Wird für keinen Winkel in einem Kanal die volle und im anderen die Intensität 0 gemessen, so war der Strahl nicht linear polarisiert. Zirkuläre Polarisationszustände können analog untersucht werden. Der Nutzen von Analysatorkreisen wird später klar werden. Alle durch unsere Schaltzeichen charakterisierten Apparate sind wirklich herstellbar, und zwar so, daß man der hier angenommenen Idealisierung "verlustfreier" Apparate (z.B. kein Intensitätsverlust beim Durchgang eines Lichtstrahls durch einen Analysatorkreis) sehr nahekommt. Natürlich sind die Analysatorkreise in der Praxis komplizierter aufgebaut, als hier angedeutet wurde. Die in diesem und den folgenden Abschnitten beschriebenen Versuche mit polarisiertem Licht sind jedoch ohne allzugroßen Aufwand sogar als Vorlesungsversuche vorführbar.

Wir führen nun mit diesen Apparaten einige Experimente durch, bei denen wir bestimmte Apparate hintereinander in einen Strahlengang einsetzen und an gewissen Stellen (a, b) die Intensität $(I(a), I(b))$ messen. Das Ergebnis kann im Rahmen der klassischen Wellenvorstellung hergeleitet werden. Für die Quantentheorie liefert uns die relative Intensität $I(b)/I(a)$ eine Aussage über eine Wahrscheinlichkeit, die wir als experimentelles Resultat hinnehmen müssen, solange wir den Formalismus zu ihrer Berechnung noch nicht kennen.

Das erste Experiment sieht so aus:



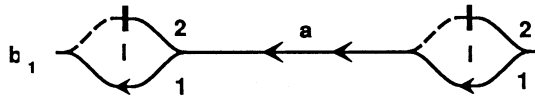
Experiment I

Ergebnis: $I(b_1) = I(a)$, $I(b_2) = 0$.

Das Experiment realisiert unsere Zustandsdefinition. Der Projektor stellt den Zustand $l1$ (= lineare Polarisation in $1 = x$ -Richtung) her (d.h. er läßt nur solche Photonen durch). Mit dem Analysator wird dann festgestellt, daß dieser Zustand vorliegt (s.o., $\theta = 0$). In Termen von Wahrscheinlichkeiten lautet das Resultat

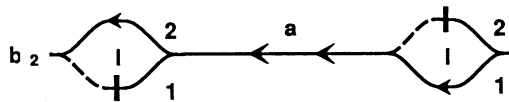
$$W(l1|l1) = 1, \quad W(l2|l1) = 0.$$

Statt dieses Experimentes kann man auch zwei Messungen vornehmen, bei denen nur Projektoren verwendet werden:



Experiment Ia

Ergebnis: $I(b_1) = I(a)$, $W(l1|l1) = 1$.



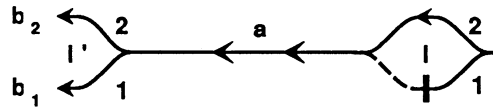
Experiment Ib

Ergebnis: $I(b_2) = 0$, $W(l2|l1) = 0$.

Version Ia zeigt, daß zwei hintereinandergeschaltete gleiche Projektoren so gut wie einer sind (Projektoren sind idempotent!). Version Ib zeigt, daß zwei hintereinandergeschaltete entgegengesetzte Projektoren so wirken, daß der Strahl blockiert wird (Intensität Null). Führt man das Experiment mit anderen Projektoren durch (z.B. für zirkulare Polarisation), so kommt evidenterweise dasselbe Resultat heraus, solange der Analysator (bzw. der zweite Projektor) und der erste Projektor auf denselben Polarisationstyp bezogen sind (beide auf l , beide auf z , beide auf l' mit gleichem Winkel θ). Wir werden einen solchen Typ eine

Basis nennen. Die entsprechenden Photonzustände (z.B. $l1 = \text{lin. Pol. parallel zu } x$, $l2 = \text{lin. Pol. parallel zu } y$) nennen wir **Basiszustände**.

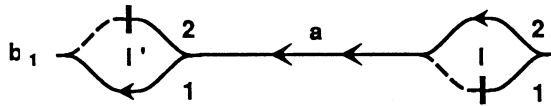
Nun betrachten wir ein weiteres Experiment:



Experiment II

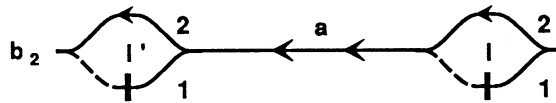
Ergebnis: $I(b_1) = I(a) \sin^2 \theta$, $I(b_2) = I(a) \cos^2 \theta$,
 $W(l'1|l2) = \sin^2 \theta$, $W(l'2|l2) = \cos^2 \theta$.

Dabei ist θ der Winkel, um den der Analysator gegenüber dem Projektor verdreht ist. Auch die Resultate dieses Experimentes kann man durch zwei Messungen erhalten, bei denen nur Projektoren verwendet werden:



Experiment IIa

Ergebnis $W(l'1|l2) = \sin^2 \theta$.



Experiment IIb

Ergebnis: $W(l'2|l2) = \cos^2 \theta$.

IIb entspricht offenbar dem früher mit den Plastikpolarisatoren durchgeführten Experiment. Mit anderen Projektoren bzw. Analysatoren erhält man andere Zahlen. Wird z.B. der Projektor durch einen für zirkuläre Polarisation ersetzt, so erhält man

$$W(l'1|z2) = W(l'2|z2) = \frac{1}{2} .$$

Das ist klassisch zu verstehen: Der Projektor stellt einen Strahl mit (links-) zirkularer Polarisation her; da eine zirkularpolarisierte Welle aus zwei senkrecht zueinander linear polarisierten Wellen mit gleicher Amplitude aufgebaut werden kann, filtert jeder der beiden zweiten Projektoren die halbe Intensität heraus.

Man kann diesen Versuch mit allen bisher untersuchten Projektoren durchführen und analysieren (vgl. Übungen). Dabei erhält man stets eine Zahl $W(B|A)$, die wir Projektionswahrscheinlichkeit vom Zustand A zum Zustand B nennen wollen. Zwei Resultate wollen wir aber festhalten, die in allen Fällen herauskommen:

- 1.) Die Projektionswahrscheinlichkeit von A zu B ist stets gleich der von B zu A :

$$W(B|A) = W(A|B) .$$

Ein Beispiel dafür kann man aus Exp. IIb durch Verdrehen der ganzen Anordnung um die Strahlachse sehen.

- 2.) Die Summe der Projektionswahrscheinlichkeiten von einem beliebigen Zustand zu den beiden Basiszuständen einer beliebigen Basis ist 1. Vgl. z.B. Exp. II:

$$W(l'1|l2) + W(l'2|l2) = \sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$$

$$W(l'1|z2) + W(l'2|z2) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 .$$

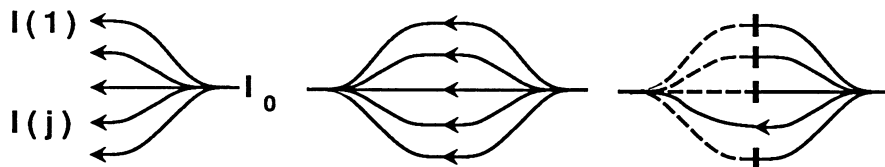
Übungen

- 1) Bestimme den elektrischen Feldvektor für eine monochromatische, ebene Welle, die in z -Richtung läuft und linear (bzw. zirkular bzw. elliptisch) polarisiert ist.
- 2) Zeichne für Experiment I und II die Richtung des Feldvektors nach jedem Schritt.
- 3) Bestimme $W(zi|lk)$, $W(lk|zi)$, $W(l'k|zi)$ aus dem klassischen Wellenbild ($i, k = 1, 2$).
- 4) Gib eine Basis für elliptische Polarisation an. Wann ist diese Basis "orthogonal" in dem Sinn, daß Projektionswahrscheinlichkeiten zwischen verschiedenen Basiszuständen verschwinden?

2.3 Verallgemeinerung auf Mehrzustandssysteme

Mit unseren Apparaten ist es gelungen, Polarisationszustände von Photonen zu definieren, ohne daß wir dabei den klassischen Begriff einer elektromagnetischen Welle benutzt haben. Die Begriffe, die wir verwendet haben (Analysator, Projektor, Ausgangskanäle, Intensität) sind aber von allgemeinerem Charakter. Wir abstrahieren daher von den nur für Photonen zutreffenden Aspekten und versuchen, die allgemeinen Eigenschaften eines Analysators etc. zu charakterisieren. Als **Analysator** wird man einen Apparat bezeichnen, der einen Strahl von Objekten (physikalischen Systemen) in Teilstrahlen zerlegt, der also einen Eingangs- und mehrere Ausgangskanäle hat (daß es bei der Polarisierung zwei waren, ist offenbar nicht typisch für den Analysator, sondern für die Polarisation). Der Analysator soll keine Objekte "schlucken" oder neu erzeugen: die Summe der Intensitäten in den Ausgangskanälen muß gleich der Eingangsintensität sein. Damit wir aber sicher sind, daß der Analysator wirklich analysiert und den Strahl nicht nur irgendwie aufteilt, müssen wir noch etwas verlangen: Analysiert man den aus einem (z.B. dem j -ten) Ausgangskanal austretenden Strahl mit einem gleichen zweiten Analysator, so muß dieser Strahl aus dem zweiten Analysator ungeschwächt durch den j -ten Kanal herauskommen und alle anderen Ausgangsintensitäten müssen verschwinden.

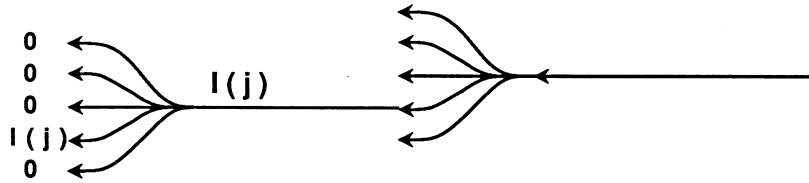
Aus zwei entgegengesetzt geschalteten Analysatoren können wir uns wieder einen **Analysatorkreis** hergestellt denken, der per definitionem einen Strahl, in den er eingesetzt wird, nicht verändert. Blockiert man alle Kanäle eines solchen Kreises bis auf einen (z.B. den j -ten), so erhält man einen **Projektor** auf den j -ten Kanal. In Schaltzeichen sehen unsere Apparate so aus:



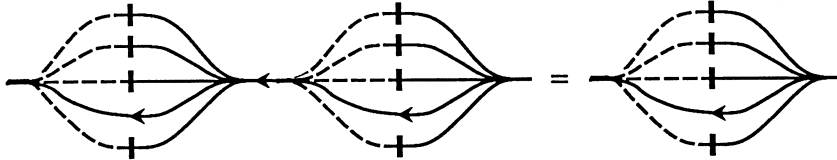
Die beiden Forderungen für den Analysator sind dann

$$\sum_j I(j) = I_0$$

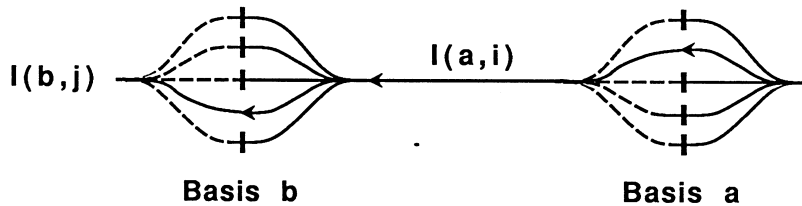
und



Für die Projektoren erhalten wir wieder die Idempotenzeigenschaft



Mit diesen Apparaten können wir wie bei der Polarisation (Basis-) Zustände der betrachteten Gesamtheit von Objekten definieren, wobei wir wieder die entsprechenden Intensitätsaussagen machen. Da es i.A. viele solcher Basen geben wird (vgl. Photonpolarisation: l, l', z), müssen wir die Variable, nach der analysiert wird, dazuschreiben, sofern verschiedene Basen verwendet werden. Aus Experimenten vom Typ



kann man durch

$$W(bj|ai) = \frac{I(b, j)}{I(a, i)}$$

eine Projektionswahrscheinlichkeit vom Zustand ai zum Zustand bj als experimentelles Resultat ablesen. Wir werden verlangen, daß diese stets symmetrisch sein soll

$$W(bj|ai) = W(ai|bj) .$$

Ist diese Wahrscheinlichkeit Null, so nennen wir die betreffenden Zustände **orthogonal**. Bei den Polarisationszuständen war das für zwei **verschiedene** Basiszustände **derselben** Basis stets der Fall. Für lineare Polarisation bedeutet die Orthogonalität das Senkrechtstehen der Polarisationsrichtungen. Für zirkulare Polarisation gibt es kein so einfaches Kriterium. Der Begriff der Orthogonalität ist also von allgemeiner Art.

Ein wichtiger Begriff, den man ebenfalls an der Photonpolarisation ablesen kann, ist der eines **vollständigen** Systems von Zuständen. Die Photonpolarisation kann man offenbar durch Analysatoren mit **zwei** Ausgangskanälen vollständig analysieren, d.h. durch **zwei** Basiszustände (z.B. l_1, l_2 oder z_1, z_2 etc.). Bei anderen Phänomenen wird man zur Analyse Apparate mit mehr Ausgangskanälen (evtl. sogar mit unendlich vielen) brauchen. Quantitativ wird die Vollständigkeit durch

$$\sum_j I(j) = I_0 \quad \text{oder} \quad \sum_i W(ai|\psi) = 1$$

ausgedrückt. Dabei bedeutet ψ einen **beliebigen** Zustand. Die Vollständigkeit bedeutet also, daß man bei der Analyse “nichts vergessen” hat.

Es ist i.a. nicht notwendig, daß die Basiszustände eines vollständigen Systems zueinander orthogonal sind. Ein Beispiel dafür läßt sich bei der Photonpolarisation angeben: Man kann vollständige Systeme von zwei elliptisch polarisierten Polarisationszuständen angeben, die zueinander nicht orthogonal sind. Es ist aber (auch im allgemeinen Fall) stets möglich, vollständige Basissysteme zu finden, die aus orthogonalen Zuständen bestehen. Es ist sehr zweckmäßig, nur solche Basissysteme zu benutzen und wir werden das stets tun. Die Zahl der Zustände eines solchen Systems (Dimensionszahl der Darstellung: Zahl der Kanäle eines Analysators, Zahl der entsprechenden Projektoren) ist dann gleich der maximalen Anzahl von orthogonalen Zuständen, die man finden kann.

Um den Überblick zu erleichtern, stellen wir die bisher eingeführten Begriffe in Form einer Tabelle dar.

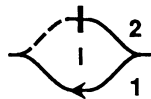
Begriff	Definition
Analysator	Ein Analysator für ein gegebenes qm. System ist eine Vorrichtung mit einem Eingangskanal und zwei oder mehreren Ausgangskanälen, die folgende Eigenschaften hat: Fällt irgendein Strahl von Objekten auf den Eingangskanal, so ist die Summe der auslaufenden Intensitäten gleich der einlaufenden Intensität. Fällt der aus dem j -ten Ausgangskanal auslaufende Strahl auf den Eingangskanal eines zum ersten gleichen zweiten Analysators, so erfolgt dessen gesamter output durch seinen j -ten Ausgangskanal.
Projektor	Ein j -Projektor entsteht aus einem Analysator durch Blockieren aller Ausgangskanäle mit Ausnahme des j -ten.
Zustand	Ist die Ausgangsintensität an einem j -Projektor gleich der Eingangsintensität, so sind die einlaufenden Systeme im Zustand j .
Projektionswahrscheinlichkeit	Die Projektionswahrscheinlichkeit von k zu j ist die relative Intensität (Ausgangsintensität/Eingangsintensität), die an einem j -Projektor gemessen wird, wenn er von einem Strahl im Zustand k durchquert wird. Die Projektionswahrscheinlichkeit von k zu j ist gleich der von j zu k .
Orthogonale Zustände	Zwei Zustände heißen orthogonal, wenn die Projektionswahrscheinlichkeit des einen zum anderen Zustand Null ist.
Vollständiges System von Zuständen	Ein System von Zuständen heißt vollständig, wenn die Summe der Projektionswahrscheinlichkeiten eines beliebigen Zustandes zu den Zuständen des betreffenden Systems eins ist. Die durch diese Ausgangskanäle eines Analysators erklärten Zustände haben diese Eigenschaft.

2.4 Algebraisierung

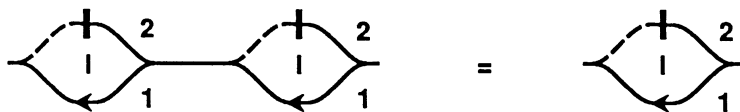
Nun beginnen wir damit, unser erworbenes Wissen in einen Kalkül umzusetzen. Die bisher untersuchten Apparate haben eine einfache Struktur und einfache algebraische Eigenschaften. Für die Struktur ist charakteristisch, daß es Eingangs- und Ausgangskanäle gibt und dazwischen **Wege**, die **offen** oder **geschlossen** (blockiert) sein können. Wir ordnen jedem Weg bzw. jedem Wegstück einen bestimmten algebraischen Ausdruck zu und "bauen" dann den Apparat aus diesen Ausdrücken durch algebraische Verknüpfungen (Addition, Multiplikation) zusammen. In unseren Apparaten bezieht sich das elementarste Stück, aus dem ein Weg besteht, stets auf einen Basiszustand eines vollständigen, orthogonalen Systems. Das Wegstück kann offen oder geschlossen sein. Wir ordnen versuchsweise jedem geschlossenen Wegstück eine Null zu. Für ein offenes Wegstück schreiben wir das "Meßsymbol"

$$|ai\rangle\langle ai| .$$

Dabei soll sich die rechte Hälfte auf den akzeptierten Zustand beziehen (auf das, was hineinfließt), die linke auf den, der "herauskommt" (der Strahl läuft immer von rechts nach links). Im betrachteten Fall sind diese Zustände identisch und die Schreibweise erscheint redundant; wir werden aber später allgemeinere Fälle brauchen, d.h. Wegstücke, auf denen sich der Zustand ändert (wie bereits bemerkt, kann eine Messung einen Zustand ändern!). Der Projektor



besteht nur aus einem offenen Weg. Wir können für ihn daher $|l1\rangle\langle l1|$ schreiben (die Null für den geschlossenen Kanal ignorieren wir). Wir untersuchen nun die Idempotenzeigenschaft



und schreiben die Symbole für den aus zwei Projektoren gebildeten Apparat nebeneinander, d.h. wir versuchen es mit der Multiplikation als Verknüpfungsvorschrift. Denkt man an Idempotenz im algebraischen

Sinn $P^2 = P$, so ist das naheliegend. Die in Schaltsymbolen gezeichnete Gleichung ist dann

$$|l1\rangle\langle l1| \cdot |l1\rangle\langle l1| = |l1\rangle\langle l1| .$$

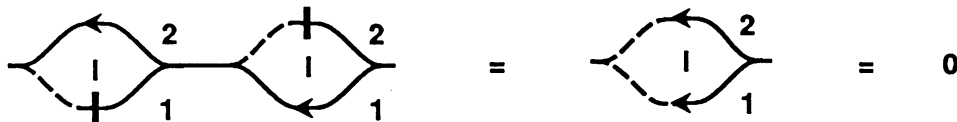
Daraus schließen wir, daß der mittlere Ausdruck die Zahl 1 sein muß:

$$\langle l1| \cdot |l1\rangle = : \langle l1|l1\rangle = 1 .$$

Derselbe Schluß gilt für jeden Projektor. Daher ist

$$|ai\rangle\langle ai|ai\rangle\langle ai| = |ai\rangle\langle ai| \quad \text{bzw.} \quad \langle ai|ai\rangle = 1$$

für einen beliebigen Zustand ($i = 1, 2, \dots$) einer beliebigen Basis a . Nun schalten wir zwei verschiedene Projektoren für lineare Polarisation hintereinander. Dadurch entsteht ein blockierter Weg, dem wir vereinbarungsgemäß 0 zuordnen:

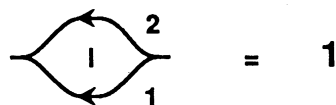


Der Schluß gilt für zwei beliebige Projektoren auf verschiedene Zustände derselben Basis (sofern wir orthogonale Basiszustände benützen, was wir stets tun können und wollen). Die entstehende Formel können wir mit der für zwei gleiche Projektoren zusammenfassen:

$$|ai\rangle\langle ai|aj\rangle\langle aj| = \delta_{ij}|ai\rangle\langle aj|$$

$$\langle ai|aj\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} .$$

Als nächstes untersuchen wir einen Analysatorkreis für lineare Polarisation. Was wir ihm als Ganzes zuordnen müssen, ist klar: Nach Definition ändert er an einem Strahl, in den er eingesetzt wird, nichts, d.h. er entspricht einem Faktor **1** (Einheitssymbol)



Wir müssen aber noch festlegen, was wir mit den Symbolen für die beiden Wegstücke, aus denen er besteht, tun müssen, wenn sie so zusammengesetzt werden, daß der gesamte Weg aus mehreren Ästen besteht

(verzweigt ist). Da wir die Multiplikation bereits für das Hintereinanderschalten verwendet haben, versuchen wir es mit der Addition:

$$|l1\rangle\langle l1| + |l2\rangle\langle l2| = \mathbf{1} .$$

Das ist konsequent und konsistent mit dem, was wir bereits getan haben: bei einem Projektor entspricht der blockierte zweite Weg einer addierten 0, die man weglassen darf; außerdem entspricht jeder der beiden Teilwege einem Projektor auf den entsprechenden Zustand.

Wieder können wir das verallgemeinern, denn ein Analysatorkreis hat auch für ein Mehrzustandssystem die Eigenschaft, nichts zu ändern. Daher muß gelten

$$\sum_{\text{alle } i} |ai\rangle\langle ai| = \mathbf{1} .$$

Wenn wir also **alle** Projektoren auf die Basiszustände eines vollständigen, orthogonalen Systems addieren, erhalten wir die Einheit, eine sehr wichtige Formel, welche die Vollständigkeit der Basis ausdrückt.

Unsere Vorschrift, bei Verzweigung die Teilwege zu addieren, ist aber “mächtiger”, als man meinen möchte. Betrachten wir ein System mit mehr als zwei Basiszuständen, so können wir nun auch einen Apparat vom folgenden Typ “bauen”:

$$|ai\rangle\langle ai| + |aj\rangle\langle aj|$$

(entsprechend für mehr als zwei offene Wege). Ein solcher Apparat realisiert eine **weniger** selektive Messung der durch a charakterisierten Variablen als ein Projektor.

Durch den Erfolg frech geworden, verallgemeinern wir unser Meßsymbol. Offenbar kann man sich Apparate vorstellen, die einen Zustand einer Basis akzeptieren und einen solchen einer anderen Basis heraustreten lassen. Bei der Photonpolarisation wäre ein Beispiel dafür eine Serienschaltung aus einem linearen und einem zirkularen Projektor. Wir versuchen als Verallgemeinerung des bereits untersuchten Symbols $|ai\rangle\langle aj|$ die Bildung $|B\rangle\langle A|$. B bzw. A charakterisieren dabei den Eingangs- bzw. Ausgangskanal unseres Apparates, können sich also auf verschiedene Basen **und** verschieden Zustände beziehen $A = ai, B = bj$. Wir untersuchen nun, welche algebraischen Eigenschaften ein solches Symbol haben könnte. In Termen von Apparaten soll der Multiplikation wieder das Hintereinanderschalten entsprechen. Wir zeigen an einem einfachen Beispiel, daß diese Meßsymbole **nicht vertauschbar** sind:

$$\begin{aligned} |z1\rangle\langle l2| \cdot |l2\rangle\langle z1| &= |z1\rangle\langle l2|l2\rangle\langle z1| = |z1\rangle\langle z1|, \\ |l2\rangle\langle z1| \cdot |z1\rangle\langle l2| &= |l2\rangle\langle z1|z1\rangle\langle l2| = |l2\rangle\langle l2|. \end{aligned}$$

Die resultierenden Apparate sind offenbar verschieden: Der eine stellt einen zirkular polarisierten Strahl her, der andere einen linear polarisierten. Die Nichtvertauschbarkeit ist bei Apparaten, die in einen Strahlengang eingesetzt werden, nicht verwunderlich, sondern der Normalfall.

Das untersuchte Beispiel war so beschaffen, daß der bei Multiplikation auftretende Ausdruck $\langle | \rangle$ bereits bekannt war. Wir betrachten jetzt die Multiplikation im allgemeinen Fall

$$|A\rangle\langle B| \cdot |C\rangle\langle D| = |A\rangle\langle B|C\rangle\langle D| = \div.$$

In den früher betrachteten Fällen war $\langle | \rangle$ eine Zahl. Wir sind “konservativ” und versuchen, diese Interpretation beizubehalten. Natürlich könnte man hier noch allgemeinere Formalismen erfinden; die “Kunst” besteht aber in der Physik stets darin, den einfachsten zu finden, mit dem man gerade noch durchkommt. Wenn wir $\langle B|C\rangle$ als Zahl interpretieren, ist

$$\div = \langle B|C\rangle \cdot |A\rangle\langle D|$$

d.h. das Produkt von zwei Meßsymbolen ist eine Zahl mal einem Meßsymbol: offenbar ein einfaches Kompositionsgesetz. Wir nennen die Zahl $\langle B|C\rangle$ die **Transformationsfunktion** (TF). Sie ist offenbar eine Funktion der beiden Zustände B und C . Die TF muß offenbar Information darüber enthalten, wie sich Zustände bei Abfolge von zwei Messungen ändern. Bevor wir untersuchen, wie sie physikalisch zu interpretieren ist, zeigen wir einige weitere algebraische Eigenschaften unseres Kalküls. Setzen wir an ein Meßsymbol rechts und links die $\mathbf{1}$ an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{1} \cdot |A\rangle\langle B| \cdot \mathbf{1} &= \sum_i \sum_j |ai\rangle\langle ai|A\rangle\langle B|bj\rangle\langle bj| = \\ &= \sum_i \sum_j \langle ai|A\rangle\langle B|bj\rangle|ai\rangle\langle bj|. \end{aligned}$$

Ein Meßsymbol ist also stets als Linearkombination von anderen darstellbar, wobei die Koeffizienten Produkte von zwei Transformationsfunktionen sind. Für die TF selbst erhält man durch “Dazwischenschalten” der $\mathbf{1}$ ebenfalls ein Kompositionsgesetz:

die Wahrscheinlichkeit dafür, in einem l_1 -polarisierten Strahl die Polarisation z_2 zu finden (das dritte Filter ändert daran nichts). Nach unserer Kompositionsvorschrift erhalten wir für den gesamten Apparat den Ausdruck

$$|l_1\rangle\langle l_1|z_2\rangle\langle z_2|l_1\rangle\langle l_1| = \langle l_1|z_2\rangle\langle z_2|l_1\rangle|l_1\rangle\langle l_1| .$$

Es erscheint daher sinnvoll, den hier auftretenden Ausdruck als Wahrscheinlichkeit zu interpretieren

$$W(z_2|l_1) = \langle l_1|z_2\rangle\langle z_2|l_1\rangle .$$

Für andere Folgen von Polarisationsfiltern kann man analog vorgehen. Die Wahrscheinlichkeit erscheint als ein Maß dafür, wie das mittlere Filter den Strahl verdünnt. Wir verallgemeinern das auf beliebige Zustände und definieren die Wahrscheinlichkeit als das Produkt von entgegengesetzten Transformationsfunktionen

$$W(A|B) = \langle B|A\rangle\langle A|B\rangle .$$

Offenbar fällt bei dieser Bildung λ heraus. Außerdem ist die vorne verlangte Symmetrieeigenschaft

$$W(A|B) = W(B|A)$$

erfüllt. Auch die Vollständigkeitseigenschaft

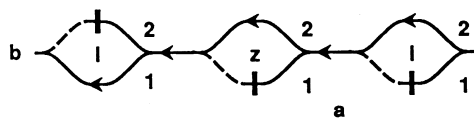
$$\sum_i W(ai|B) = 1$$

kann man mit Hilfe unseres Kompositionsgesetzes beweisen:

$$\sum_i W(ai|B) = \sum_i \langle B|ai\rangle\langle ai|B\rangle = \langle B|B\rangle = 1 .$$

Soweit wäre alles in Ordnung, wir wissen aber immer noch nicht, wie wir eine einzelne TF interpretieren sollen. Da Wahrscheinlichkeiten positiv sein müssen, wäre es naheliegend, für die Transformationsfunktionen nur positive Zahlen zuzulassen. Wir zeigen nun, daß das nicht geht. Dazu führen wir drei Messungen durch, die wir als Experiment III zusammenfassen. Dabei schalten wir zwischen zwei lineare Polarisationsfilter (Projektoren) einmal ein linkszirkulares, einmal ein rechtszirkulares Filter und einmal einen zirkularen Analysatorkreis. Man kann

das so durchführen, daß man in dem Analysatorkreis zuerst den einen Kanal blockiert, dann den zweiten und schließlich beide offen läßt.

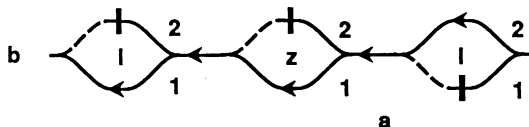


Experiment IIIa

Ergebnis: $I(b)/I(a) = 1/4$

Das Experiment zeigt besonders klar die Änderung des Zustandes bei der Messung. Hinter dem ersten Filter sind **alle** Photonen im Zustand $l2$, **keines** ist im Zustand $l1$; im Ausgangskanal sind **alle** Photonen im Zustand $l1$, **keines** im Zustand $l2$. Dafür ist das mittlere Filter verantwortlich, das auf linkszirkulare Polarisation testet (= diese mißt) und den Zustand **ändert**: es stellt einen Strahl von Photonen im Zustand $z2$ her, den man aus 50% $l2$ -polarisierten und 50% $l1$ -polarisierten Photonen bestehend auffassen kann. Das letzte Filter sondert die letzteren aus. Durch Messung kann also eine "Regeneration" erfolgen: Vor dem zirkularen Filter enthält der Strahl keine Photonen mit $l1$ -Polarisation, hinter dem Filter sind sie offenbar vorhanden.

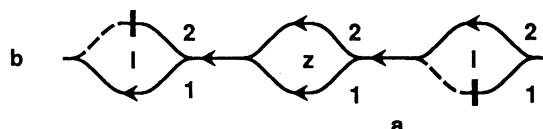
Bei Schließen des anderen Kanals im mittleren Kreis



Experiment IIIb

erhalten wir dasselbe Ergebnis $I(b)/I(a) = 1/4$.

Nun öffnen wir im mittleren Kreis beide Wege:



Experiment IIIc

Naiv würde man erwarten, daß jetzt doppelt so viele Photonen durchgehen $I(b)/I(a) = 1/2$. Das ist aber **nicht** der Fall, sondern es geht **gar nichts** durch:

Ergebnis $\frac{I(b)}{I(a)} = 0$.

Dieses Resultat ist sofort klar, wenn man bedenkt, daß der Analysatorkreis einen beliebigen Strahl nicht ändert. Das erste Filter stellt einen l_2 -polarisierten Strahl her, der durch das zweite Filter blockiert wird. Aus unserem Formalismus folgt das Resultat ebenfalls: Der ganzen Schaltung entspricht

$$|l_1\rangle\langle l_1|z_1\rangle\langle z_1|l_2\rangle\langle l_2| + |l_1\rangle\langle l_1|z_2\rangle\langle z_2|l_2\rangle\langle l_2| = \sum_i |l_1\rangle\langle l_1|z_i\rangle\langle z_i|l_2\rangle\langle l_2| = |l_1\rangle\langle l_1|l_2\rangle\langle l_2| = 0 .$$

Für die Amplituden geschrieben, bedeutet das

$$\sum_i \langle l_1|z_i\rangle\langle z_i|l_2\rangle = 0 .$$

Man kann das z.B. aus

$$\langle l_1|l_2\rangle = 0$$

durch Einschieben der **1** erhalten. Wir haben die Versuchsfolge angegeben, um deutlich zu machen, daß es sich um einen experimentellen Sachverhalt handelt. Er zeigt, daß man bei mehreren offenen Wegen die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten **nicht** addieren darf und daß man mit positiven Zahlen für die TF nicht auskommt.

Im Rahmen der klassischen Wellentheorie läßt sich das Phänomen leicht verstehen. Es handelt sich um einen Spezialfall der allgemeinen Welleneigenschaft **Interferenz**, zu der es immer kommt, wenn mehrere Strahlen aus derselben Quelle überlagert werden. Kann Licht auf mehreren Wegen an eine bestimmte Stelle gelangen, so ist das gesamte elektrische Feld an dieser Stelle die Vektorsumme der Felder, die den entlang der einzelnen Wege laufenden Wellen entsprechen. Die gesamte Intensität ist das Quadrat des **resultierenden** elektrischen Vektors, der länger oder kürzer sein kann, als jeder der Summanden, aus denen er sich zusammensetzt; er kann auch die Länge Null haben. Der wesentliche Zug, daß man die Vektoren **erst addieren** und **dann quadrieren** muß, ist eine Folge der Wellentheorie des Lichtes.

In der quantentheoretischen Beschreibung, um die es hier geht, dürfen wir das klassische Wellenbild nicht benützen, da es für intensitätsschwache Strahlen nicht funktioniert. Wir versuchen es aber mit den angedeuteten mathematischen Ideen (Vektoren statt Zahlen, erst addieren, dann quadrieren), mit denen wir auf die einfachste mögliche

Weise auszukommen versuchen. Die einfachsten Vektoren im Sinn einer Verallgemeinerung von Zahlen sind ebene Vektoren oder, was auf das gleiche hinausläuft, komplexe Zahlen. Der Betrag der Summe von zwei komplexen Zahlen kann kleiner sein als der Betrag jedes Summanden. Wir versuchen es daher mit komplexen Zahlen als TF. Daß die Wahrscheinlichkeiten positiv sind, erreicht man am einfachsten durch die Forderung

$$\langle B|A \rangle = \langle A|B \rangle^* .$$

Dann ist

$$W(A|B) = \langle A|B \rangle^* \langle A|B \rangle = |\langle A|B \rangle|^2 \geq 0 .$$

Die am Anfang dieses Abschnittes betrachtete Ersetzung

$$\langle A|B \rangle \rightarrow \frac{\lambda(A)}{\lambda(B)} \langle A|B \rangle$$

ändert am Zusammenhang zwischen $\langle A|B \rangle$ und $\langle B|A \rangle$ nichts, wenn

$$\lambda^* = \frac{1}{\lambda}$$

ist. Daraus folgt, daß λ ein Phasenfaktor ist:

$$\lambda = e^{i\alpha} .$$

Eine TF ist daher durch Vorgabe der entsprechenden Wahrscheinlichkeit nur bis auf einen Phasenfaktor festgelegt.

Insgesamt erhalten wir aus unserem Kalkül folgende Regeln:

- (1) Die Projektionswahrscheinlichkeit von einem Zustand B zu einem Zustand A ist das Absolutquadrat der komplexen TF von B zu A , die wir daher auch Wahrscheinlichkeitsamplitude nennen können:

$$W(A|B) = |\langle A|B \rangle|^2$$

- (2) Kann A aus B auf mehreren **Wegen** erreicht werden, so ist die gesamte TF die **Summe** der TF für die einzelnen Wege.
- (3) Besteht ein Weg aus mehreren **Schritten**, so ist die TF für den gesamten Weg das **Produkt** der TF für die einzelnen Schritte. Als elementarsten Schritt kann man sich einen Projektionsvorgang vorstellen.

Allgemein ist also die Wahrscheinlichkeit das Betragsquadrat einer Summe von (Produkten von) komplexen Zahlen. Man muß also **erst addieren, dann quadrieren**. Damit erfaßt man das quantenmechanische Analogon zur Interferenz, bei dem es sich um eine Interferenz von Wahrscheinlichkeiten handelt.

2.6 Transformationsmatrizen

Nun wollen wir die TF zwischen Zuständen verschiedener Basen bestimmen. Wir betrachten zunächst wieder die Photonpolarisation und untersuchen die TF $\langle l'i|lk\rangle$. Das sind 4 komplexe Zahlen, die wir als 2×2 -Matrix schreiben können:

$$U(l'|l) = \begin{pmatrix} \langle l'1|l1\rangle & \langle l'1|l2\rangle \\ \langle l'2|l1\rangle & \langle l'2|l2\rangle \end{pmatrix} .$$

Aus Intensitätsmessungen (vgl. Experiment II) wissen wir:

$$W(l'1|l1) = W(l'2|l2) = \cos^2 \theta , \quad W(l'1|l2) = W(l'2|l1) = \sin^2 \theta .$$

Diese Wahrscheinlichkeiten werden nach unseren Regeln erhalten, wenn wir folgenden Ansatz machen:

$$U(l'|l) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \theta & e^{i\gamma} \sin \theta \\ e^{i\delta} \sin \theta & e^{i\beta} \cos \theta \end{pmatrix} .$$

Außerdem wissen wir aber auch, daß $\langle l1|l2\rangle = 0$ ist. Einschalten der **1** (d.h. Benützung des Kompositionsgesetzes von TF) gibt

$$\begin{aligned} 0 = \langle l1|l2\rangle &= \langle l1|l'1\rangle \langle l'1|l2\rangle + \langle l1|l'2\rangle \langle l'2|l2\rangle = \\ &= \sin \theta \cos \theta (e^{i(\gamma-\alpha)} + e^{i(\beta-\delta)}) . \end{aligned}$$

Daher ist

$$e^{i(\gamma-\alpha)} = -e^{i(\beta-\delta)} .$$

Daraus kann man die Phasen nicht bestimmen, sie werden aber eingeschränkt: Wir erhalten eine Beziehung zwischen **relativen** Phasen (das ist für die Quantentheorie typisch). Weitere Beziehungen dieser Art geben nichts Neues, d.h. diese Einschränkung ist die maximale Information, die man aus dem Experiment erhalten kann. Wir dürfen daher die Phasen im Rahmen dieser Einschränkung frei wählen. Eine zweckmäßige Wahl ist

$$\alpha = \beta = \gamma = 0, \quad \delta = \pi.$$

Damit erhalten wir

$$U(l'|l) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = : U(\theta).$$

Das ist die Matrix, die das Verhalten der Komponenten eines Vektors in der Ebene bei Drehung des Koordinatensystems beschreibt.

Durch Nachrechnen kann man zeigen, daß

$$U(l|l') = U^{-1}(l'|l) = U^\dagger(l'|l)$$

ist. Dabei bedeutet U^\dagger die Matrix, die aus U durch Transposition (Spiegelung an der Hauptdiagonalen) und komplexe Konjugation hervorgeht. Durch analoge Überlegungen kann man die Transformationsmatrizen zu anderen Basen (z.B. $U(z|l), U(z|l')$ etc.) finden (vgl. Übungen). Dabei ist es nicht immer möglich, alle Phasen so zu wählen, daß reelle TF herauskommen. Die angegebenen Eigenschaften (z.B. $U^\dagger = U^{-1}$) gelten aber auch für diese Matrizen.

Wir zeigen nun, daß sie als Folge unseres Kalküls für ein n -Zustandssystem gelten. Die Transformationsmatrix

$$U(a|b)_{ik} = \langle ai|bk \rangle \quad i, k = 1, 2, \dots, n$$

ist dann eine $n \times n$ -Matrix. Sie hat folgende Eigenschaften:

$$(1) \quad U(b|a) = U^{-1}(a|b) \quad \text{bzw.} \quad U(a|b) \cdot U(b|a) = \mathbf{1}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} (U(a|b) \cdot U(b|a))_{ik} &= \sum_{j=1}^n \langle ai|bj \rangle \langle bj|ak \rangle = \\ &= \langle ai|ak \rangle = \delta_{ik} \end{aligned}$$

$$(2) \quad U^\dagger(a|b) = U^{-1}(a|b) \quad \text{bzw.} \quad U^\dagger U = \mathbf{1} \quad (\text{Unitarität})$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 U^{-1}(a|b)_{ik} &= U(b|a)_{ik} = \langle bi|ak \rangle = \langle ak|bi \rangle^* = \\
 &= (U(a|b)_{ki})^* = U^\dagger(a|b)_{ik}
 \end{aligned}$$

$$(3) \quad U(a|b) \cdot U(b|c) = U(a|c) \quad (\mathbf{Gruppeneigenschaft})$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 (U(a|b) \cdot U(b|c))_{ik} &= \sum_j \langle ai|bj \rangle \langle bj|ck \rangle \\
 &= \langle ai|ck \rangle = U(a|c)_{ik}
 \end{aligned}$$

Verschiedene Basen hängen daher stets durch **unitäre** Matrizen zusammen, die eine **Gruppe** bilden.

Übungen

5) Beweise die Gruppeneigenschaft

$$U(\theta_2) \cdot U(\theta_1) = U(\theta_2 + \theta_1)$$

6) Berechne die ersten drei Koeffizienten der Potenzreihe

$$U(\theta) = V_0 + \theta V_1 + \theta^2 V_2 + \dots$$

7) Beweise die Formel

$$U(\theta) = \exp(\theta V_1)$$

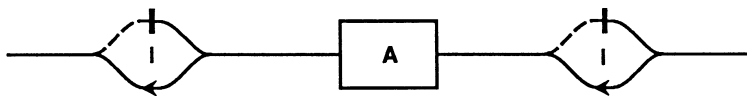
8) Außer $U(l'|l)$ seien die Amplituden

$$\langle z1|l'1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-i\theta), \quad \langle z1|l'2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(i\theta)$$

gegeben. Berechne $U(z|l), U(l|z), U(z|l'), U(l'|z)$.

2.7 Allgemeine Apparate und Matrizen

Bisher haben wir gelernt, wie man gewisse Apparate (Projektoren, Analysatorkreise und daraus aufgebaute "Schaltungen") algebraisch darstellt. Wir interessieren uns nun für die Verallgemeinerung auf beliebige Apparate. Zunächst betrachten wir wieder die Photonpolarisation. Jeder Apparat, der nur auf die Polarisation wirkt, kann als Kasten mit einer Eingangs- und einer Ausgangsöffnung gedacht werden, der die Energie der Photonen sowie die Strahlrichtung nicht ändert, wohl aber die Polarisation und die Intensität beeinflusst. Wir bestrahlen nun einen solchen Apparat der Reihe nach mit $l1$ - und $l2$ -polarisiertem Licht und messen die relative Intensität des auslaufenden Strahls nach Passieren eines $l1$ - bzw. $l2$ -Projektors. Die Schaltung ist also z.B.



Auf diese Weise messen wir 4 positive Zahlen (Wahrscheinlichkeiten). Diese reichen aber **nicht** aus, um den Apparat eindeutig zu charakterisieren. Das sieht man an folgendem Beispiel: Nehmen wir für A einen $z1$ -Projektor, so sind alle vier Wahrscheinlichkeiten $1/4$. Für einen $z2$ -Projektor ist das aber auch der Fall; der Apparat ist daher nicht eindeutig bestimmt. Nach der vorhergehenden Untersuchung ist das nicht verwunderlich, denn wir wissen bereits, daß wir jede Messung durch eine komplexe TF charakterisieren müssen. Daher sollten 4 komplexe (bzw. 8 reelle) Zahlen zur Charakterisierung ausreichen.

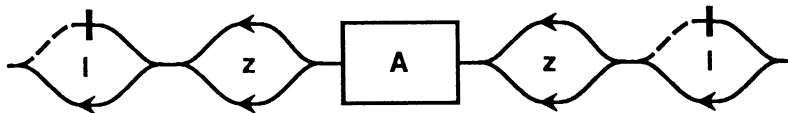
Algebraisieren wir unser Schaltbild nach unseren bisherigen Regeln, wobei wir für den Apparat einfach A schreiben, so erhalten wir für das gezeichnete Bild den Ausdruck

$$|l1\rangle\langle l1|A|l1\rangle\langle l1| .$$

Werden für A bekannte Apparate eingesetzt, so resultiert für $\langle l1|A|l1\rangle$ stets eine komplexe Zahl. Wir versuchen daher, das für einen beliebigen Apparat durchzuhalten: wir fordern, daß $\langle l1|A|l1\rangle$ für jeden Apparat eine komplexe Zahl sein soll, deren Betragsquadrat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeit hat. Algebraisieren wir die vier angedeuteten Meßexperimente, so erhalten wir vier komplexe Zahlen, die wir als 2×2 -Matrix schreiben:

$$A(l|l) := \begin{pmatrix} \langle l1|A|l1\rangle, & \langle l1|A|l2\rangle \\ \langle l2|A|l1\rangle, & \langle l2|A|l2\rangle \end{pmatrix}.$$

Wir nennen sie die Matrix von A in der l -Darstellung. Die Matrix von A in einer anderen Darstellung kann man bereits aus unseren Regeln ablesen. Setzen wir im vorhin gezeichneten Experiment zwei Analysator-
torkreise ein



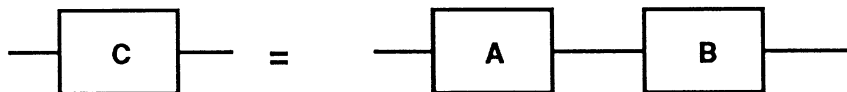
und algebraisieren, so erhalten wir

$$|l1\rangle(\langle l1|z1\rangle\langle z1|A|z1\rangle\langle z1|l1\rangle + \langle l1|z2\rangle\langle z2|A|z1\rangle\langle z1|l1\rangle + \langle l1|z1\rangle\langle z1|A|z2\rangle\langle z2|l1\rangle + \langle l1|z2\rangle\langle z2|A|z2\rangle\langle z2|l2\rangle)\langle l1|.$$

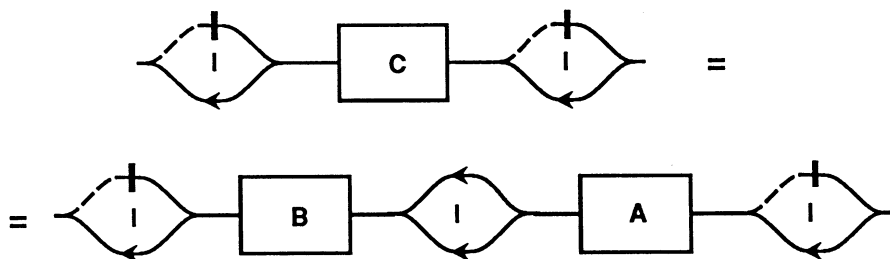
Betrachtet man für die Filter am Anfang und am Ende alle vier Möglichkeiten, so sieht man, daß

$$A(l|l) = U(l|z) \cdot A(z|z) \cdot U(z|l) = U(l|z) \cdot A(z|z) \cdot U^\dagger(l|z)$$

ist. Dabei ist U die vorhin betrachtete Transformationsmatrix und der Punkt bedeutet Matrixmultiplikation. Mit der gleichen Schlußweise sieht man, daß ein aus zwei seriengeschalteten Teilen bestehender Apparat

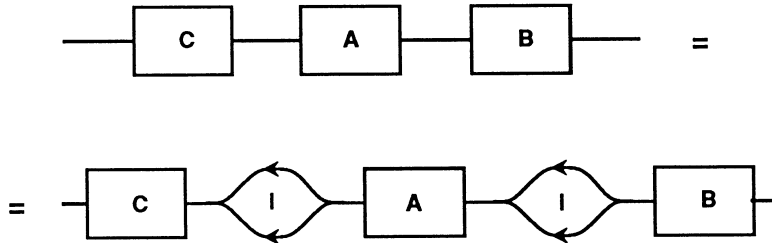


durch das Matrixprodukt von B und A dargestellt wird. Dazu braucht man nur



in Formeln zu übersetzen. Daß die Multiplikation nicht vertauschbar ist, ist mathematisch evident und physikalisch ebenso wenig verwunderlich, wie bei den früher untersuchten speziellen Apparaten.

Betrachten wir eine Serienschaltung von drei Apparaten



so können wir uns davon überzeugen, daß die Matrizen A und $A \exp(i\alpha)$ mit beliebigem reellem α physikalisch äquivalent sind. In der algebraischen Übersetzung des rechts gezeichneten Schaltbildes ist über die 4 Wege der beiden Analysatorkreise zu summieren. Jeder Summand enthält ein Matrixelement von $A(l|l)$ als Faktor. Ersetzen wir A durch $A \exp(i\alpha)$, so kann $\exp(i\alpha)$ herausgehoben werden und fällt bei Bildung des Betragsquadrates heraus. Daher ist ein gemeinsamer Phasenfaktor aller Matrixelemente eines Apparates irrelevant. Das bedeutet, daß man nicht acht, sondern nur sieben reelle Zahlen (vier Beträge, drei Phasen) bestimmen muß, wenn man einen Polarisationsapparat festlegen will. Man kann dazu z.B. die relativen Intensitäten messen, die bei Durchgang eines linear polarisierten Strahls durch den Apparat und ein lineares Filter auftreten und dann die Messung mit einem zirkular polarisierten Strahl und einem zirkularen Filter durchführen. Damit kennt man die Beträge der acht Matrixelemente von $A(l|l)$ und $A(z|z)$. Einsetzen in die Beziehung zwischen $A(l|l)$ und $A(z|z)$ gibt, da die Transformationsmatrizen bekannt sind, Gleichungen für die Phasen, aus denen diese (bis auf einen gemeinsamen Phasenfaktor) bestimmt werden können. In der Praxis ist das zwar etwas umständlich, aber durchführbar (vgl. Übungen).

Die Verallgemeinerung auf Mehrzustandssysteme ist evident. Nicht jede Matrix entspricht aber einem sinnvollen Apparat. Die Frage, welchen mathematischen Einschränkungen eine Matrix unterworfen werden muß, damit das der Fall ist, wird noch zu untersuchen sein. Ein Kriterium können wir leicht angeben: wir haben stets Apparate betrachtet, in denen keine Objekte erzeugt werden. Für solche darf die Summe

der Ausgangsintensitäten höchstens gleich der Eingangsintensität sein, d.h. es muß für ein vollständiges System (ai) von Basiszuständen und irgendeinen Zustand (b)

$$\sum_i |\langle ai|A|b\rangle|^2 \leq 1$$

gelten. Die analoge Beziehung für Matrixelemente in einer Zeile

$$\sum_i |\langle b|A|ai\rangle|^2 \leq 1$$

ist ebenfalls erfüllt. Man kann sich davon am leichtesten überzeugen, indem man von der Vollständigkeitsrelation ausgeht

$$\sum_i |\langle b|ai\rangle|^2 = \sum_i |\langle ai|b\rangle|^2 = 1$$

und sich diese anschaulich als Beziehung für Intensitäten von Strahlen vorstellt. Setzt man in den Strahlengang einen Apparat A ein, der keine Objekte produziert, so kann die Ausgangsintensität nicht zu-, sondern nur abnehmen.

Übungen

- 9) Welche Matrix beschreibt einen $l1$ -Projektor
 - a.) in der z -Darstellung
 - b.) in der l' -Darstellung ?
- 10) Welche Matrix beschreibt einen $z1$ -Projektor in der l -Darstellung?
- 11) Für einen Apparat A seien folgende Wahrscheinlichkeiten gemessen worden:

$$\begin{aligned} |\langle l1|A|l1\rangle|^2 &= |\langle l2|A|l2\rangle|^2 = 1 \\ |\langle l1|A|l2\rangle|^2 &= |\langle l2|A|l1\rangle|^2 = 0 \\ |\langle z1|A|z1\rangle|^2 &= 1 . \end{aligned}$$

Wie wirkt der Apparat bezüglich linearer Polarisationszustände $|li\rangle$?

- 12) Die letzte Messung habe statt 1 den Wert $1/2$ ergeben. Wie wirkt dieser Apparat auf einen Strahl $|l'1\rangle$ mit $\theta = 45^\circ$?

2.8 Zustandsvektoren und Operatoren

Wir abstrahieren nun von den in den letzten beiden Kapiteln verwendeten Begriffen “Wahrscheinlichkeitsamplitude” und “Matrix eines Apparates” zwei wichtige Konzepte, die für den mathematischen Formalismus der Quantentheorie fundamental sind. Wir betrachten noch einmal die Anordnung für das Einschleusen von Zwischenzuständen (Einsetzen eines Analysatorkreises) bei einem Strahl in einem **beliebigen** Polarisationszustand



$$\langle z1|\psi\rangle = \langle z1|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle z1|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle .$$

Offenbar erhält man dieselbe Formel, wenn man den Projektor durch einen anderen ersetzt, z.B.

$$\langle l'1|\psi\rangle = \langle l'1|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle l'1|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle .$$

Symbolisch kann man das so schreiben

$$\langle |\psi\rangle = \langle |l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle |l2\rangle\langle l2|\psi\rangle ,$$

wobei in den leeren Raum **irgendein** Polarisationszustand eingesetzt werden kann (nur muß es an allen Stellen derselbe sein). Noch kürzer ausgedrückt

$$|\psi\rangle = |l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + |l2\rangle\langle l2|\psi\rangle .$$

Die Formel ist so gemeint, daß sie für alle Projektionsamplituden richtig ist, unabhängig davon, welchen Zustand (= welchen Projektor) man links ansetzt. Das Symbol $|\psi\rangle$ heißt **Zustandsvektor** oder auch **ket-Vektor** des Zustandes ψ (es ist die rechte Hälfte der Diracschen Klammer $\langle| \rangle =$ bracket). Wenn wir nach einer anderen Basis analysieren, erhalten wir eine analoge Formel: Kein Analysatorkreis verändert einen Strahl. Ganz abstrakt geschrieben, lautet die Analyse eines Zustandes

$$|\psi\rangle = \sum_i |ai\rangle\langle ai|\psi\rangle$$

wobei die ai ein vollständiges Basissystem bilden.

Man kann denselben Vektor auf verschiedene Basissysteme aufspannen, z.B. bei Polarisationszuständen

$$|\psi\rangle = |l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + |l2\rangle\langle l2|\psi\rangle = |l'1\rangle\langle l'1|\psi\rangle + |l'2\rangle\langle l'2|\psi\rangle .$$

Diese Formeln sind analog zu den entsprechenden für die Darstellung eines Vektors in der Ebene durch zwei zueinander senkrechte Einheitsvektoren

$$\mathbf{a} = \mathbf{e}_x a_x + \mathbf{e}_y a_y = \mathbf{e}'_x a'_x + \mathbf{e}'_y a'_y .$$

In beiden Fällen wird **derselbe** Vektor \mathbf{a} dargestellt, aber durch **verschiedene** Komponenten $a_x \neq a'_x, a_y \neq a'_y$. So wie \mathbf{a} ein abstraktes Symbol für einen Vektor darstellt, das von der speziellen Wahl des Grundvektorsystems $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ bzw. $\mathbf{e}'_x, \mathbf{e}'_y$ unabhängig ist, so ist auch $|\psi\rangle$ ein abstraktes Symbol für den Zustand. Den Komponenten (Projektionen) des Vektors (a_x, a_y) entsprechen die Projektionsamplituden in bezug auf eine Basis, z.B. $\langle l1|\psi\rangle, \langle l2|\psi\rangle$. Wie in der Vektorrechnung bestimmen diese Projektionen den Vektor $|\psi\rangle$ (abgesehen von der Phase) vollständig, wenn die Basiszustände ein vollständiges System bilden. Zum Unterschied von der gewöhnlichen Vektorrechnung sind die Projektionsamplituden aber **komplex**. Weiterhin ist zu bemerken, daß die Summe der Projektionswahrscheinlichkeiten zu den Basiszuständen eines vollständigen Systems eins ist (Vollständigkeitsrelation)

$$\sum_i |\langle ai|\psi\rangle|^2 = 1 ,$$

d.h. die Zustandsvektoren entsprechen (komplexen) Einheitsvektoren

$$\mathbf{a}^2 = a_x^2 + a_y^2 = 1 .$$

Die Analogie zu den Komponenten eines Vektors kann noch weiter verfolgt werden. Mathematisch ist ein Vektor durch sein Transformationsverhalten bei Änderung des Koordinatensystems definiert: Ein Vektor im 2-dms. Raum ist eine Größe, deren beide Komponenten sich bei Rotation des Koordinatensystems um θ gemäß

$$\begin{aligned} a'_x &= \cos \theta \cdot a_x + \sin \theta \cdot a_y \\ a'_y &= -\sin \theta \cdot a_x + \cos \theta \cdot a_y \end{aligned}$$

transformieren. Da sich **alle** Vektoren in derselben Weise transformieren, ist ein physikalisches Gesetz, das als Beziehung zwischen Vektoren

geschrieben werden kann, **invariant** bei Rotationen des Koordinatensystems. Die Zustandsvektoren weisen bei Änderung des “Koordinatensystems”, d.h. der Basis, ebenfalls ein wohldefiniertes Transformationsverhalten auf. Wir können mit Hilfe von Analysatorkreisen und unseren Regeln z.B. die Formeln

$$\begin{aligned}\langle l'1|\psi\rangle &= \langle l'1|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle l'1|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle = \cos\theta\langle l1|\psi\rangle + \sin\theta\langle l2|\psi\rangle \\ \langle l'2|\psi\rangle &= \langle l'2|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle l'2|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle = -\sin\theta\langle l1|\psi\rangle + \cos\theta\langle l2|\psi\rangle\end{aligned}$$

für die Transformation auf verdrehte lineare Polarisationszustände bzw.

$$\begin{aligned}\langle z1|\psi\rangle &= \langle z1|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle z1|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\langle l1|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle l2|\psi\rangle \\ \langle z2|\psi\rangle &= \langle z2|l1\rangle\langle l1|\psi\rangle + \langle z2|l2\rangle\langle l2|\psi\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}\langle l1|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle l2|\psi\rangle\end{aligned}$$

für eine solche auf Zustände zirkularer Polarisation finden. Die erste Formel ist (mit unserer Wahl der Phasen) sogar genau dieselbe wie in der Vektorrechnung. Es gibt aber in dieser kein Analogon zur letzten Formel: Zustandsvektoren sind allgemeinere Gebilde als reelle Einheitsvektoren. Wichtig ist, daß für jeden Basiswechsel ein definiertes Transformationsverhalten vorliegt. Beziehungen zwischen Zustandsvektoren sind daher **invariant** bei Wechsel der Basis.

Man sieht, daß die obigen Beziehungen ebenfalls mit Hilfe des Matrixkalküls geschrieben werden können, wenn wir den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ durch eine Matrix mit einer Spalte und 2 Zeilen (Spaltenvektor, Spalte) darstellen, wobei die Elemente die Projektionsamplituden sind, z.B.

$$\begin{pmatrix} \langle l1|\psi\rangle \\ \langle l2|\psi\rangle \end{pmatrix} \quad l\text{-Darstellung}$$

$$\begin{pmatrix} \langle z1|\psi\rangle \\ \langle z2|\psi\rangle \end{pmatrix} \quad z\text{-Darstellung .}$$

Die Transformationsformeln haben dann Matrixform, z.B.

$$\begin{pmatrix} \langle z1|\psi\rangle \\ \langle z2|\psi\rangle \end{pmatrix} = U(z|l) \cdot \begin{pmatrix} \langle l1|\psi\rangle \\ \langle l2|\psi\rangle \end{pmatrix} .$$

Wir betrachten nun die umgekehrte Anordnung zu der bisher untersuchten, nämlich



Damit finden wir wie früher

$$\langle \psi | z2 \rangle = \langle \psi | l1 \rangle \langle l1 | z2 \rangle + \langle \psi | l2 \rangle \langle l2 | z2 \rangle .$$

Wieder kann man statt $z2$ einen beliebig polarisierten Strahl einsetzen, ohne daß die Gleichung falsch wird. Wir können sie abgekürzt so schreiben

$$\langle \psi | = \langle \psi | l1 \rangle \langle l1 | + \langle \psi | l2 \rangle \langle l2 |$$

wobei rechts ein beliebiger Zustand angesetzt werden darf. Für n -Zustandssysteme lautet das

$$\langle \psi | = \sum_i \langle \psi | ai \rangle \langle ai | .$$

Der Zustandsvektor $\langle \psi |$ heißt der zu $|\psi\rangle$ duale Zustandsvektor oder bra-Vektor des Zustandes ψ (**br**acket). Seine Komponenten in einer gegebenen Darstellung sind nicht identisch mit denen von $|\psi\rangle$. Wegen

$$\langle \psi | ai \rangle = \langle ai | \psi \rangle^*$$

sind sie vielmehr dazu konjugiert komplex. Auch hier kann man das Verhalten bei Basiswechsel in Matrixform schreiben, z.B.

$$(\langle \psi | z1 \rangle, \langle \psi | z2 \rangle) = (\langle \psi | l1 \rangle, \langle \psi | l2 \rangle) \cdot U(l|z) .$$

Wegen $U(l|z) = U^\dagger(z|l)$ transformieren sich die Komponenten des dualen Vektors mit der adjungierten Transformationsmatrix.

Der bra-Vektor $\langle \psi |$ und der ket-Vektor $|\psi\rangle$ beschreiben **denselben** Zustand ψ , sie sind aber voneinander verschieden, wie wir durch die Bezeichnungsweise angedeutet haben (dies ist anders als in der gewöhnlichen, reellen Vektorrechnung). Wie in dieser sind die Komponenten, d.h. die Koeffizienten, die beim Aufspannen des Vektors (z.B. $|\psi\rangle$ oder $\langle \psi |$) auf eine Basis (z.B. $|l1\rangle, |l2\rangle$ oder $\langle l1|, \langle l2|$) aufgetreten, gewöhnliche Zahlen. Die Vektoren selbst sind natürlich keine Zahlen, sondern ganz andere mathematische Größen.

In der Vektoralgebra kann man aus zwei Vektoren a, b eine Zahl erhalten, indem man das **Skalarprodukt** bildet, das z.B. in 2 Dimensionen die Form hat

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = a_x b_x + a_y b_y .$$

Es ist invariant gegen Basiswechsel, d.h.

$$a_x b_x + a_y b_y = a'_x b'_x + a'_y b'_y$$

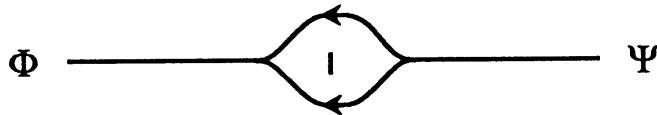
wie man mit den Transformationsformeln leicht nachrechnet. Die Komponenten können als Skalarprodukte mit Einheitsvektoren geschrieben werden, z.B.

$$a_x = (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{a}) .$$

Das Skalarprodukt kann man daher auch in der folgenden Form schreiben:

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_x)(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{b}) + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_y)(\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{b}) .$$

Analoge Formeln können wir für unsere quantentheoretischen Zustände auch angeben. Wenn wir z.B. die Anordnung



analysieren, finden wir

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | l1 \rangle \langle l1 | \psi \rangle + \langle \phi | l2 \rangle \langle l2 | \psi \rangle .$$

Das ist genau das Analogon der obigen Formel für das Skalarprodukt.

Die Verallgemeinerung auf Mehrzustandssysteme ist evident. Die Dimensionszahl des Vektorraumes ist die Zahl der Basiszustände und kann daher sehr groß (sogar unendlich) sein. Da im allgemeinen $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \neq \langle \psi | \phi \rangle$ ist, muß (im Gegensatz zur gewöhnlichen Vektorrechnung) die Reihenfolge der Faktoren beim Skalarprodukt beachtet werden.

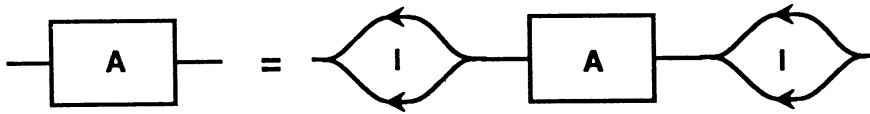
Die Invarianz des Skalarproduktes gegen Basiswechsel ist in der Zustandsschreibweise evident:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_i \langle \phi | ai \rangle \langle ai | \psi \rangle = \sum_i \langle \phi | bi \rangle \langle bi | \psi \rangle .$$

In der Matrixschreibweise bedeutet sie

$$(\langle\phi|a\rangle) \cdot (\langle a|\psi\rangle) = (\langle\phi|b\rangle) \cdot U^\dagger(a|b) \cdot U(a|b) \cdot (\langle b|\psi\rangle) = (\langle\phi|b\rangle) \cdot (\langle b|\psi\rangle) .$$

Wir haben gesehen, daß ein Zustandsvektor einen Zustand in **abstrakter Weise** beschreibt, während dies eine Zeile bzw. Spalte von Projektionsamplituden in einer **speziellen** Darstellung tut. Wir haben ferner gesehen, daß man einen Apparat in einer **speziellen** Darstellung durch eine **Matrix** von Amplituden darstellen kann. Nun wollen wir überlegen, wie man einen Apparat **abstrakt** (darstellungsunabhängig) beschreiben kann. Dazu brauchen wir bloß auf unsere Algebraisierung von Schalt-symbolen (vgl. Abschnitt 1.11) zurückgreifen. Führen wir die Prozedur für



“blind” durch, so erhalten wir

$$A = \sum_{i,k} |li\rangle\langle li|A|lk\rangle\langle lk|$$

und diese Gleichung liefert für beliebige rechts bzw. links angesetzte Zustände $|\psi\rangle, \langle\phi|$ gültige Formeln für TF. Setzen wir nur auf einer Seite einen Zustand an (z.B. rechts)

$$A|\psi\rangle = \sum_{ik} |li\rangle\langle li|A|lk\rangle\langle lk|\psi\rangle = \sum_i |li\rangle\langle li|A|\psi\rangle ,$$

so sehen wir, daß $A|\psi\rangle$ als Linearkombination von Basiszuständen mit komplexen Koeffizienten $\langle li|A|\psi\rangle$ wieder ein Zustand ist. A macht daher aus einem Zustand einen (i.a. anderen) Zustand. Wir müssen daher A als (abstrakten) **Operator** interpretieren.

Die Verallgemeinerung auf n -Zustandssysteme ist wieder evident. Die entsprechende Darstellungsformel lautet

$$A = \sum_{i,k} |ai\rangle\langle ai|A|bk\rangle\langle bk| .$$

Dadurch wird der Operator A durch seine Matrixelemente $\langle ai|A|bk\rangle$ in einer i.a. gemischten Darstellung charakterisiert. Die Basiszustände sind dabei beliebig, sie müssen lediglich vollständig sein. Natürlich muß

eine Festlegung erfolgen, wenn konkret gerechnet werden soll. Ein Operator ist also weder eine Zahl, noch ein Zustandsvektor. Er ist eine Größe, die auf einen Zustandsvektor (bra oder ket) angewendet werden kann und daraus wieder einen Zustandsvektor macht (im allgemeinen einen anderen). In der Darstellung von A stehen **Zahlen**, d.h. geschlossene Klammern $\langle ai|A|bk\rangle$ (bra-ket) und offene Klammern $|\rangle\langle|$ (ket-bra). Diese letzteren sind offenbar Operatoren: z.B. gibt der Operator $|\alpha\rangle\langle\phi|$ in Anwendung auf den ket $|\psi\rangle$ den Zustand $|\alpha\rangle$ mal der Zahl $\langle\phi|\psi\rangle$; in Anwendung auf den bra $\langle\gamma|$ gibt er den bra $\langle\phi|$ mal der Zahl $\langle\gamma|\alpha\rangle$. Wie man sieht, ist diese Schreibweise diejenige, die dem **direkten Produkt** der Matrizenrechnung entspricht (Spalte \times Zeile = Matrix, man erhält auf diese Weise die Matrixform in jeder speziellen Darstellung). In der gewöhnlichen Vektorrechnung entspricht ihr das Tensorprodukt.

Wir betrachten nun zwei spezielle Beispiele. Der **Projektor** auf irgendeinen Zustand $|\psi\rangle$ hat in der $|\psi\rangle$ -Darstellung die Form

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| .$$

Man zeigt leicht, daß er die gewünschten Eigenschaften hat: auf $|\psi\rangle$ oder $\langle\psi|$ angewandt, reproduziert er diese Vektoren; auf einen zu $|\psi\rangle$ orthogonalen Zustand angewandt, gibt er Null; auf einen beliebigen Zustand angewandt, gibt er $|\psi\rangle$ mal der betreffenden Projektionsamplitude. In einer anderen Darstellung kann ein Projektor natürlich weniger "verdächtig" aussehen, vgl. z.B. das Beispiel 9. Der einzige Apparat, der in jeder Darstellung gleich aussieht, ist der **Analysatorkreis**. Er wird (in jeder Darstellung) durch die Einheit dargestellt

$$\mathbf{1} = \sum_i |ai\rangle\langle ai| .$$

Das ist die abstrakte Formel für das Einschleiben von Zwischenzuständen: Der Einheitsoperator darf überall dazwischen gesetzt werden. Man sieht, daß der Einheitsoperator die Summe von Projektionsoperatoren auf orthogonale Basiszustände ist. Umgekehrt gibt aber eine solche Summe nur dann die Einheit, wenn es zwischen den einzelnen Summanden keine relativen Phasenfaktoren gibt.

2.9 Der Zustandsraum (Hilbertraum)

Wir wollen nun die mathematische Struktur des bisher entwickelten Kalküls und seine physikalische Interpretation in knapper Form zusammenstellen, um den Überblick zu behalten. (Es ist nützlich, sich jede der folgenden Definitionen und Aussagen am Beispiel der Photonpolarisation zu vergegenwärtigen!).

Ein **Zustand** ψ wird durch einen **Zustandsvektor** $|\psi\rangle$ bzw. den dazu dualen $\langle\psi|$ **abstrakt** charakterisiert. Die Zuordnung von $|\psi\rangle$ zu $\langle\psi|$ ist umkehrbar eindeutig. Diese Zustandsvektoren bilden einen **linearen Vektorraum**: Eine Linearkombination von Zuständen ist wieder ein möglicher Zustand

$$c_1|\psi\rangle + c_2|\phi\rangle = |\chi\rangle$$

(c_1, c_2 beliebige komplexe Zahlen). Wenn eine solche Zuordnung besteht, heißt $|\chi\rangle$ linear abhängig von $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$. Dieses **Superpositionsprinzip** unterscheidet die Quantentheorie in charakteristischer Weise von der klassischen Physik. Dadurch ist die Interferenz zwischen verschiedenen Zuständen möglich.

In dem Vektorraum der Zustände ist ein **Skalarprodukt** erklärt: zwei beliebigen Zuständen $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ ist eine komplexe Zahl $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$ zugeordnet, die Projektionsamplitude von ϕ zu ψ heißt. Sie wird physikalisch als Wahrscheinlichkeitsamplitude interpretiert. Ihr Quadrat $|\langle\psi|\phi\rangle|^2 = W(\psi|\phi) = W(\phi|\psi)$ heißt die Projektionswahrscheinlichkeit von ϕ zu ψ , das ist die relative Intensität, die an einem ψ -Projektor gemessen wird, der von einem Strahl von Objekten im Zustand ϕ durchquert wird. Zustände, deren Skalarprodukt verschwindet, nennt man orthogonal zueinander. In dem Raum ist damit eine **Norm** definiert, die im wesentlichen positiv definit ist:

$$\langle\psi|\psi\rangle > 0 \quad \text{außer für} \quad |\psi\rangle = 0 .$$

Durch Angabe des Zustandes ist nur die Richtung des Zustandsvektors, nicht aber seine Länge $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ festgelegt. Diese wird zweckmäßigerweise als 1 gewählt (Normierung). Es bleibt dann noch ein Phasenfaktor $\exp(i\alpha)$ mit $\alpha = \alpha^*$ unbestimmt.

Bei Überlagerung eines Zustandes mit sich selbst

$$c_1|\psi\rangle + c_2|\psi\rangle = (c_1 + c_2)|\psi\rangle$$

erhält man für $c_1 + c_2 = 0$ **keinen** Zustand, d.h. der Nullvektor entspricht keinem Zustand. Anschaulich: Bei totaler Interferenz “kommt nichts heraus”. Für $c_1 + c_2 \neq 0$ erhält man **denselben** Zustand, da die Länge des Vektors physikalisch irrelevant ist. Der entstehende Zustand wird allerdings i.a. nicht normiert sein.

Jeder Zustandsvektor $|\psi\rangle$ kann auf ein orthogonales, normiertes, vollständiges System von Basisvektoren $|ai\rangle$

$$\langle ai|ak\rangle = \delta_{ik} \quad \text{Orthogonalität, Normierung}$$

$$\sum_i |ai\rangle\langle ai| = \mathbf{1} \quad \text{Vollständigkeit}$$

aufgespannt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_i |ai\rangle\langle ai|\psi\rangle, \quad \langle\psi| = \sum_i \langle\psi|ai\rangle\langle ai|.$$

Die Spalte ($\langle ai|\psi\rangle$) bzw. Zeile ($\langle\psi|ai\rangle$) der Projektionsamplituden zu den Basiszuständen gibt dann eine **konkrete** Charakterisierung (Darstellung) des Zustandes. Bei Wechsel der Basis transformieren sich die Projektionsamplituden unitär. Jede Beziehung zwischen Zustandsvektoren ist unabhängig von der Wahl der Basis. Das Skalarprodukt ist bei Basiswechsel invariant.

Die Wirkung eines physikalischen Apparates A auf einen Zustand wird **abstrakt** durch die Wirkung eines **Operators** A auf den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ beschrieben, die im allgemeinen einen anderen Zustand liefert:

$$A|\psi\rangle = |\chi\rangle.$$

Ist $|\psi\rangle$ normiert, so wird das für $|\chi\rangle$ i.a. nicht der Fall sein. Man muß daher bei solchen Bildungen meist neu normieren. Die Matrixelemente $\langle\phi|A|\psi\rangle$ haben dann ebenfalls die Bedeutung von Wahrscheinlichkeitsamplituden: $|\langle\phi|A|\psi\rangle|^2$ ist die relative Intensität, die gemessen wird, wenn ein Strahl von Objekten im Zustand $|\psi\rangle$ erst den Apparat A und dann einen ϕ -Projektor durchquert. Ein Phasenfaktor $\exp(i\alpha)$ ist daher irrelevant: A und $A \exp(i\alpha)$ sind physikalisch äquivalent.

Die physikalischen Operatoren wirken linear

$$\begin{aligned} A(|\phi\rangle + |\psi\rangle) &= A|\phi\rangle + A|\psi\rangle \\ A(c \cdot |\psi\rangle) &= cA|\psi\rangle \end{aligned}$$

(mit einer beliebigen komplexen Zahl c) und können addiert werden:

$$(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle = (B + A)|\psi\rangle .$$

Ihr Produkt ist im allgemeinen nicht kommutativ

$$AB \neq BA .$$

Der zu $|\chi\rangle = A|\psi\rangle$ duale Zustandsvektor $\langle\chi|$ entsteht durch Wirkung des **adjungierten** Operators

$$\langle\chi| = \langle\psi|A^\dagger$$

wobei

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle := \langle\psi|A|\phi\rangle^* .$$

Nicht alle Operatoren entsprechen physikalisch sinnvollen Apparaten. Später wird sich zeigen, daß physikalische Operatoren selbstadjungiert sein müssen

$$A = A^\dagger$$

(das ist nur bei Zustandsräumen mit endlich vielen Dimensionen gleichbedeutend mit “hermetisch”).

Eine **konkrete** Charakterisierung (Darstellung) eines Operators bezüglich einer vollständigen, orthogonalen Basis wird durch die Formel

$$A = \sum_{i,k} |ai\rangle\langle ai|A|ak\rangle\langle ak|$$

gegeben. Die aus den Matrixelementen $\langle ai|A|ak\rangle$ gebildete Matrix transformiert sich bei Basiswechsel unitär.

Jede geschlossene Klammer (bra-ket) $\langle\dots|\dots|\dots\rangle$ ist eine Zahl, jede halbe Klammer (bra oder ket) $\dots|\dots\rangle$ oder $\langle\dots|\dots$ ist ein Zustandsvektor, jede offene Klammer (ket-bra) $|\dots\rangle\dots\langle\dots|$ ist ein Operator.

Ein Problem, auf das hier hingewiesen werden soll, ist die Wahl der Basiszustände, von denen man ausgehen soll. Wir haben bisher diese Zustände durch die Angabe von konkreten Apparaten erklärt, mit denen man sie präpariert (nämlich Polarisatoren). Abstrakt hatten wir einen Zustand durch eine Klasseneinteilung definiert, die so beschaffen ist, daß Objekte in der Klasse, die den Zustand definiert, voneinander **un**unterscheidbar, hingegen von Objekten in anderen Klassen unterscheidbar sind. Dabei war wesentlich, daß diese Zustände ein

vollständiges System bilden. Durch die Angabe der Projektoren als konkrete physikalische Apparate hatten wir diese Eigenschaften bis jetzt sicherstellen können, und in manchen Fällen wird dies auch weiterhin der Fall sein. Das soll aber nicht den Eindruck erwecken, als ob solche Projektoren als konkrete, physikalische Apparate **stets** angegeben und gebaut werden können. Die Projektoren als mathematische Objekte sind stets angebar und ihre Eigenschaften sind wohldefiniert. Ob sie physikalisch realisierbar sind, hängt sehr von der physikalischen Situation ab, die man betrachtet. In relativ wenigen Fällen ist dies möglich, in etwas mehr Fällen bedarf es einer Idealisierung (z.B. bei den Kontinuumszuständen, siehe später) und in den meisten Fällen kann man die entsprechenden Apparate nicht bauen. Schon ganz am Anfang war darauf hingewiesen worden, daß das Auffinden der “richtigen” Zustände meistens ein langwieriger Prozeß ist, bei dem Inspiration und Vermutung eine wesentliche Rolle spielen. Die Verwendung anschaulicher Vorstellungen aus der klassischen Physik stellt dabei eine wesentliche Hilfe dar. Das ganze logische Problem ist (wie oft in der Physik) ein Konsistenzproblem: Man geht von einer durch Intuition gefundenen Basis aus, deren Wahl man mehr oder weniger gut begründen kann, wobei anschauliche Vorstellungen (sehr oft Symmetriebetrachtungen) eine Rolle spielen. Durch Anwendung des quantenmechanischen Formalismus kommt man zu Resultaten, die man experimentell prüfen kann. Findet man Übereinstimmung mit der Erfahrung, so ist man zufrieden. Findet man Widersprüche, so wird man sie in erster Linie auf eine falsche, nicht widerspruchsfreie Basiswahl zurückführen und nicht auf Widersprüche im Formalismus der Quantentheorie, der sich in so vielen Fällen bewährt hat. Diese “Politik” hat sich jedenfalls bis jetzt immer als ausreichend erwiesen und das Gewicht solcher Konsistenzargumente darf nicht unterschätzt werden.

Übungen

- 13) Beweise, daß die Eigenschaften
- (a) $A^\dagger A = \mathbf{1}$
 - (b) $A^\dagger = A$ darstellungsunabhängig sind.

- 14) Ein Operator besitzt eine Reihenentwicklung nach Potenzen einer kleinen, reellen Zahl ϵ

$$A = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n A_n .$$

Zeige, daß der selbstadjungierte Teil des n -ten Koeffizienten $A_n^\dagger + A_n$ durch die niedrigeren Koeffizienten bestimmt ist, wenn A unitär ist.

- 15) Zwei Operatoren A, B sollen durch $A = \exp(iB)$ zusammenhängen, wobei die Exponentialfunktion durch ihre Reihenentwicklung definiert ist. Welche Eigenschaft muß B haben, damit A unitär ist ?

2.10 Ergänzung: Paulialgebra und Paulimatrizen

Es gibt viele quantenmechanische Systeme, die in guter Näherung als Zweizustandssysteme betrachtet werden können. Der zugehörige mathematische Kalkül wird besonders einfach, wenn man dabei die algebraischen Eigenschaften unitärer Transformationen in zwei Dimensionen ausnützt. Die von W. Pauli eingeführten Operatoren ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) (bzw. zugehörige Darstellungen durch 2×2 -Matrizen) sind dafür besonders zweckmäßig. Es ist vorteilhaft, über einige Fertigkeit im Umgang mit diesen Größen zu verfügen. Die an die folgende kurze Darstellung anschließenden Übungsaufgaben sind als "Gymnastik" in dieser Richtung gedacht. In den folgenden Kapiteln wird die Algebra verwendet.

Wir verwenden für Vektorkomponenten (in drei Dimensionen) das Summationsübereinkommen für doppelt vorkommende Indizes

$$a_k b_k \quad \text{bedeutet} \quad \sum_{k=1}^3 a_k b_k .$$

Die Paulioperatoren σ_k können als Komponenten eines Vektoroperators

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

aufgefaßt werden. Sie sind durch die Regeln

$$\begin{aligned} \sigma_k &= \sigma_k^\dagger , \\ \sigma_k \sigma_l &= \delta_{kl} \mathbf{1} + i \epsilon_{klm} \sigma_m \end{aligned}$$

definiert. Dabei ist ϵ_{klm} das aus der Vektorrechnung vertraute Symbol (vgl. M Anhang A1). Das bedeutet insbesondere, daß zwei verschiedene Paulioperatoren **antik**kommutieren

$$\sigma_k \sigma_l = -\sigma_l \sigma_k \quad k \neq l .$$

Zusammen mit der Einheit $\mathbf{1}$ bilden die σ_k eine vollständige Operatorbasis im Hilbertraum jedes Zweizustandsystems, d.h. jeder Operator A in diesem Raum kann durch $\mathbf{1}, \boldsymbol{\sigma}$ ausgedrückt werden

$$A = a_0 \mathbf{1} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

wobei a_0 und die Komponenten a_k des Vektors \mathbf{a} Zahlen sind.

Die Paulioperatoren können durch 2×2 -Matrizen dargestellt werden. Jede solche Matrixdarstellung entspricht nach unseren Regeln der Wahl einer Basis ($|1\rangle, |2\rangle$) im Hilbertraum des betrachteten Zweizustandssystems. Eine viel verwendete Darstellung (Standarddarstellung) ist

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

Jede daraus durch Transformation mit einer unitären Matrix (U) hervorgehende neue Darstellung

$$(\sigma)' = (U) \cdot (\sigma) \cdot (U)^\dagger$$

ist aber “genauso gut”. Man kann daher z.B. auch Darstellungen verwenden, in denen statt (σ_3) eine andere Matrix diagonal ist. Benützt man für Rechnungen nur die algebraischen Eigenschaften der Paulioperatoren, so sind alle Resultate darstellungsunabhängig. In der Standarddarstellung verschwindet die Spur aller drei Paulimatrizen

$$\text{Sp } \sigma_k = 0.$$

Diese Eigenschaft ist aber darstellungsunabhängig. Definiert man die Spur von Operatoren im Zweizustandsraum durch

$$\text{Sp } \mathbf{1} = 2, \quad \text{Sp } (A \cdot B) = \text{Sp } (B \cdot A), \quad \text{Sp } (A + B) = \text{Sp } A + \text{Sp } B$$

so kann man die Eigenschaft als solche der Paulioperatoren erkennen.

Die folgenden Übungsaufgaben können entweder mit einer Matrixdarstellung oder mit Hilfe der Algebra gelöst werden (die letztere Methode ist vorzuziehen). Die engen Beziehungen zwischen dem Vektorkalkül für Vektoren in drei Dimensionen und dem Kalkül mit Paulioperatoren sind kein Zufall.

Übungen

16) Betrachte die vier Kombinationen

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm i\sigma_2), P_{\pm} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} \pm \sigma_3)$$

- (a) Untersuche die algebraischen Beziehungen zwischen ihnen und fasse sie in Form einer Multiplikationstafel zusammen.
- (b) Welche der vier Operatoren sind Projektoren ?
- (c) Welche Matrizen entsprechen den vier Operatoren in der Standarddarstellung ?

17) Berechne mit Hilfe der oben angegebenen Regeln folgende Spuren:

$$\text{Sp } \sigma_k \sigma_l, \text{Sp } \sigma_k \sigma_l \sigma_m, \text{Sp } \sigma_k \sigma_l \sigma_m \sigma_n$$

18) Betrachte den Operator $M(\mathbf{a}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ mit einem gegebenen Vektor \mathbf{a} . Bestimme mit Hilfe der Spuroperation

- (a) \mathbf{a} aus $M(\mathbf{a})$
- (b) $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ aus $M(\mathbf{a}) \cdot M(\mathbf{b})$
- (c) $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ aus $M(\mathbf{a}) \cdot M(\mathbf{b})$

19) Schreibe die folgenden Ausdrücke als Linearkombination von $\mathbf{1}$ und σ_k und bestimme die Koeffizienten:

- (a) $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})^2$
- (b) $\sigma_k (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \sigma_k$
- (c) $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \sigma_k (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})$
- (d) $\mathbf{b} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma})$

Für die folgenden Beispiele bedeutet $A(\mathbf{a}) = \mathbf{1}a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ einen beliebigen Zweizustandsoperator. Die Koeffizienten $a_0, \mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ sind gegeben bzw. zu bestimmen.

- 20) Bestimme die Koeffizienten aus $A(\mathbf{a})$ durch Spurbildung.
- 21) Beweise die Beziehung

$$2 \text{Sp } A \cdot B = \text{Sp } A \text{Sp } B + \text{Sp } (\boldsymbol{\sigma} A) \cdot \text{Sp } (\boldsymbol{\sigma} B)$$

- 22) Wie kann $\text{Det } A$ darstellungsunabhängig definiert werden ?
Drücke $\text{Det } A$ durch $\text{Sp } A$ und $\text{Sp } A^2$ aus.
- 23) Wie lauten die Koeffizienten von $A^{-1}(\mathbf{b})$?

- 24) Welche Eigenschaften haben die Koeffizienten eines hermiteschen Operators

$$A(a) = A^\dagger(a) ?$$

- 25) Wie lauten die Koeffizienten von

$$\exp(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})$$

mit einem reellen Vektor \mathbf{b} ?

- 26) Welche Eigenschaften haben die Koeffizienten eines unitären Operators $A(a)A^\dagger(a) = \mathbf{1}$? Welcher Zusammenhang besteht zu dem in Beispiel 25 betrachteten Operator ?

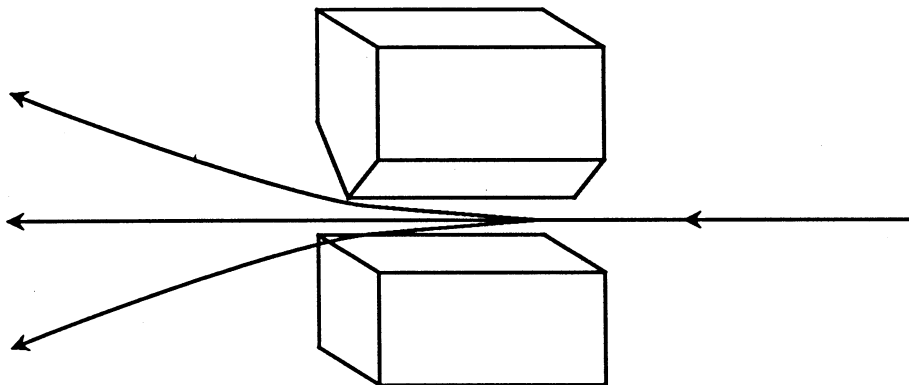
3. Dynamik von Quantenzuständen

3.1 Spinzustände

Als einziges konkretes Beispiel für Quantenzustände haben wir bisher die Polarisationszustände von Lichtquanten betrachtet. Eine Analyse einfacher Experimente im Teilchenbild führte zu quantenmechanischen Begriffsbildungen und ermöglichte einen ersten Einblick in die Quantenmechanik als “Meßalgebra”. Die untersuchten Polarisationsexperimente konnten aber (zumindest für nicht zu intensitätsschwache Lichtstrahlen) auch rein klassisch mit Hilfe der Wellentheorie des Lichtes verstanden werden.

Wir wollen nun eine andere Klasse von Phänomenen untersuchen, bei denen eine klassische Interpretation nicht möglich ist. Der quantenmechanische Kalkül ist daher für diese Phänomene unvermeidbar. Das grundlegende Experiment von Stern und Gerlach (1922) war für die Entwicklung der Quantentheorie von großer Bedeutung. In diesem Abschnitt verwenden wir das Experiment und sein Resultat zur Definition eines Mehrzustandssystems (wobei wir von den nicht ganz einfachen experimentellen Details absehen). Später werden die Eigenschaften des Systems zu einer Betrachtung verwendet, mit der die Beschreibung zeitabhängiger Phänomene in der Quantentheorie plausibel wird.

Um die experimentellen Züge des Stern-Gerlach-Experiments zu erfassen, betrachten wir einen Strahl elektrisch neutraler, gleicher Teilchen (z.B. Atome der gleichen Sorte, Neutronen, Moleküle usw.). Der Strahl soll genügend intensitätsschwach sein, sodaß Wechselwirkungen der Strahlteilchen untereinander (z.B. Stöße) vernachlässigt werden können. Die Teilchen sollen alle die gleiche kinetische Energie haben. Im Strahlengang ist ein genügend langer Magnet angebracht, der ein Magnetfeld mit relativ hoher Feldstärke hervorruft. Die Polschuhe sind so geformt, daß das Feld in Ebenen senkrecht zur Strahlrichtung inhomogen ist. Als experimentelles Resultat ergibt sich, daß der Strahl in eine Anzahl von Teilstrahlen aufgefächert wird, die deutlich voneinander getrennt sind. Die Zahl der Teilstrahlen (im unten gezeichneten Bild sind es drei) hängt von der Sorte der Strahlteilchen ab. Das Originalexperiment wurde mit Silberatomen durchgeführt und ergab eine Zweifachaufspaltung.



Die Aufspaltung kann aber auch bei anderen Teilchensorten beobachtet werden. Etwa 10% der Atomsorten des periodischen Systems zeigen keine Aufspaltung. Bei allen anderen Sorten erfolgt eine Aufspaltung in zwei, drei oder mehr Teilstrahlen. Auch für Strahlen aus angeregten Atomen oder Molekularstrahlen kann bei genügender experimenteller Sorgfalt eine Aufspaltung in diskrete Teilstrahlen beobachtet werden. Neutronenstrahlen werden in zwei Teilstrahlen aufgespalten. Die Aufspaltung ist allerdings um mehr als drei Größenordnungen kleiner und könnte daher mit der gezeichneten Anordnung nicht festgestellt werden. Um sie zu beobachten, muß man ein Interferometer für Neutronen verwenden.

Neutrale Teilchen werden in einem inhomogenen Magnetfeld abgelenkt, wenn sie ein magnetisches Moment μ haben. Für die oben angegebene Anordnung ist die ablenkende Kraft

$$K = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

und führt zu einer Ablenkung, die umso größer ist, je länger der Magnet und je leichter und langsamer die Teilchen sind. Daß neutrale Atome als Folge der Bahnbewegung der Elektronen um den Kern ein magnetisches Moment haben, ist zu erwarten. Aus klassischen Überlegungen (vgl. ED 4.7) folgt, daß dieses Moment dem gesamten Drehimpuls \mathbf{J} proportional ist

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2mc} g \mathbf{J} .$$

Dabei ist m die Elektronenmasse und g ein empirischer Faktor, welcher der komplizierten Lage der Bahnebenen der Elektronen relativ zuein-

ander Rechnung trägt. In einem Teilchenstrahl sollten die Drehimpulsrichtungen der einzelnen Teilchen statistisch verteilt sein; man würde daher erwarten, daß der Strahl in z -Richtung fächerförmig breiter wird. Das steht in krassem Gegensatz zur experimentell beobachteten Aufspaltung in diskrete Teilchen. Wollte man dieses Resultat in Termen des klassischen Modells interpretieren, so müßte man schließen, daß die magnetischen Momente (bzw. die Drehimpulse) der Strahlteilchen nicht statistisch verteilt sind, sondern daß es einige Teilchengruppen gibt, die bestimmten Richtungen entsprechen. Bei Zweifachaufspaltung hätten z.B. die Teilchen alle den gleichen Betrag von μ_z , aber die Teilchen im einen Teilstrahl würden sich von denen im anderen durch das Vorzeichen von μ_z unterscheiden. Die Vektoren $\boldsymbol{\mu}$ der Teilchen würden also einen Doppelkegel bilden, dessen Achse die z -Achse ist. Man müßte schließen, daß es in der Quelle, aus der die Teilchen stammen, einen Mechanismus gibt, der eine Richtung für das magnetische Moment oder den Drehimpuls auszeichnet. Diese Interpretation enthält aber eine wesentliche Schwierigkeit: Die Quelle "weiß" nichts von der Richtung des Magnetfeldes. Führt man das Experiment mit einem Magneten durch, der um die Strahlrichtung um einen bestimmten Winkel verdreht ist, so erfolgt die Aufspaltung in Teilstrahlen in der neuen z -Richtung. Eine korrekte Beschreibung des experimentellen Befundes muß der Tatsache Rechnung tragen, daß die Richtung der Aufspaltung durch den Magneten bestimmt wird und nicht durch die Richtung des Moments $\boldsymbol{\mu}$ eines Strahlteilchens. Offenbar dürfen wir dem magnetischen Moment eines einzelnen Teilchens (oder seinem Drehimpuls) keine bestimmte Richtung zuschreiben.

Wir versuchen nun eine quantentheoretische Beschreibung. Die Aufspaltung des Strahls in diskrete Teilstrahlen legt die Verwendung des quantenmechanischen Zustandsbegriffs nahe. Dazu fassen wir den Magneten des Experiments als Analysator auf. Um sicherzustellen, daß er diese Funktion erfüllt, müßte man zwei Stern-Gerlach-Apparate hintereinanderschalten und sich davon überzeugen, daß sie die entsprechenden Eigenschaften (vgl. Abschnitt 2.3 f) aufweisen. Ein solches Experiment ist aufwendig, aber nicht unmöglich. Ein Projektor entsteht durch Blockieren aller Ausgangskanäle bis auf einen. Um einen Analysatorkreis herzustellen, müßte man zwei entgegengesetzt gepolte Stern-Gerlach-Magneten hintereinanderschalten: Der zweite muß die im ersten erfolgte Aufspaltung rückgängig machen. Eine solche Anordnung ist ein Gedankenexperiment, das technisch nicht realisierbar ist. Un-

abhängig davon definiert aber ein Stern-Gerlach-Analysator ein Mehrzustandssystem. Die Zahl der Zustände ist durch die Zahl der Teilstrahlen gegeben, in die der Eingangsstrahl aufgespalten wird. Sie ist für die Teilchensorte charakteristisch, die analysiert wird. Der problematische Begriff “Richtung des magnetischen Moments eines Teilchens” wird bei dieser Zustandsdefinition nicht verwendet. Da die Zustände mit Hilfe eines Meßapparats definiert werden, ist es evident, daß die Richtung der Aufspaltung durch den Apparat bewirkt wird. Wir wollen diese Richtung die **Quantisierungsrichtung** nennen. Um einen einfachen Namen zu haben, nennen wir das System ein solches mit “Spin j ”, wenn die Aufspaltung in $2j + 1$ Teilstrahlen erfolgt ($j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$). Das ist **zunächst** nur ein Name. Die Zahl j müssen wir aber als Charakteristikum der Teilchen auffassen, aus denen der Strahl aufgebaut war: Jedes Strahlteilchen hat den gleichen Zahlenwert, denn der Strahl besteht voraussetzungsgemäß aus identischen Teilchen. Für die $2j + 1$ Zustände des Systems dürfen wir annehmen, daß sie orthogonal zueinander sind (Eigenschaft des Analysators!) Wir können sie als normiert und vollständig annehmen (die experimentelle Kontrolle der letzteren Eigenschaft würde einen Analysatorkreis erfordern).

3.2 Spindrehungen für Spin 1/2

Als einfachstes Beispiel betrachten wir nun die Zweifachaufspaltung, d.h. Spin 1/2. Den bereits in Abschnitt 2.10 vorgestellten Kalkül mit Paulioperatoren können wir auch hier benützen: Er gilt für jedes Zweizustandssystem (ursprünglich war er sogar im Zusammenhang mit Spin 1/2 entwickelt worden). Was wir jedoch dem Experiment entnehmen müssen, solange wir die volle Quantentheorie noch nicht kennen, das sind Aussagen über relative Intensitäten (d.h. Wahrscheinlichkeiten). Diese Aussagen hängen vom betrachteten System ab; selbstverständlich dürfen wir die zahlenmäßigen Ergebnisse für Polarisationszustände von Licht (Abschnitt 2.2) **nicht** übernehmen. Wir werden in der Folge die Meßresultate für Spin 1/2 angeben, ohne auf experimentelle Details oder technische Schwierigkeiten einzugehen, die bei einer Messung mit Stern-Gerlach-Apparaten auftreten können. Spin 1/2 entspricht dem ursprünglichen Experiment mit Silberatomen, das qualitativer Natur ist: es zeigt die Zweifachaufspaltung in **einem** Analysator. Wie aber bereits erwähnt wurde, tritt diese Aufspaltung (und damit Spin 1/2) auch bei vielen anderen Teilchensorten auf, z.B bei Neutronen. Dieser

Fall ist sogar besonders exemplarisch für die Quantentheorie: Neutronen enthalten keine Elektronen, die sich um einen Kern bewegen, ein klassisches Modell wie das oben für Atome betrachtete gibt es hier nicht. Es ist interessant, daß alle in der Folge als “experimentell” angeführten Resultate (und die daraus gezogenen Schlüsse für Drehungen im Spinraum) für Neutronen besonders genau und vollständig überprüft werden konnten. Dabei wurde allerdings nicht ein Stern-Gerlach-Magnet verwendet, sondern ein wesentlich komplizierteres Gerät (Neutroneninterferometer). Das ändert aber nichts daran, daß die Resultate wirklich solche von Experimenten sind. Für Details vgl.

G. Badurek et al., Phys.Rev. **D14**, 1177 (1976)

J. Summhammer et al., Phys.Rev. **A27**, 2523 (1983)

G. Badurek et al., Phys.Rev.Lett. **51**, 1015 (1983)

und dort angegebene Literatur.

Nach unseren allgemeinen Vorschriften müssen wir jedem der beiden Teilstrahlen einen Zustand zuordnen. Wir bezeichnen die beiden Zustände mit $|\pm z\rangle$, wobei $+z$ bedeutet, daß der zugehörige Teilstrahl in der (durch den Analysator definierten) z -Richtung nach oben (+) abgelenkt wird (analog für $-z$). Mit Hilfe eines Analysators, der gegenüber dem zunächst betrachteten um die Strahlachse (y -Achse) verdreht ist, können wir Zustände $|\pm z'\rangle$ definieren. Durch Experimente, wie sie früher bei der Photonpolarisation besprochen wurden (vgl. 2.2, Experiment II) können wir die vier Projektionswahrscheinlichkeiten $|\langle \pm z' | \pm z \rangle|^2$ als Funktion des Winkels θ ausmessen, um den der zweite Analysator verdreht wurde. Das experimentelle Ergebnis ist

$$|\langle +z' | +z \rangle|^2 = |\langle -z' | -z \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$|\langle +z' | -z \rangle|^2 = |\langle -z' | +z \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Im Unterschied zur Photonpolarisation tritt hier der **halbe** Drehwinkel auf. Das Ergebnis ist nur für $\theta = \pi$ selbstverständlich: in diesem Fall ist der $(\mp z')$ -Projektor ein $(\pm z)$ -Projektor und es resultieren Eigenschaften von Projektoren auf gleiche bzw. verschiedene Basiszustände. Für alle anderen Winkel ist man auf Experimente angewiesen. Daß die klassische Interpretation von orientierten magnetischen Dipolen falsch ist, sieht man durch Betrachtung von $\theta = \pi/2$. In diesem Fall ist die neue z -Richtung die Richtung der x -Achse $\pm z \equiv \pm x$ und wir erhalten

$$|\langle +x | +z \rangle|^2 = |\langle -x | +z \rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Für einen Strahl im Zustand $|+z\rangle$ ist also die Wahrscheinlichkeit dafür, daß er einen $(+x)$ -Projektor passiert, gleich der, einen $(-x)$ -Projektor zu passieren, nämlich $1/2$. Ein Dipol, der “in $+z$ -Richtung zeigt”, kann nicht zwei diskrete Komponenten $\neq 0$ haben, die “in entgegengesetzte Richtungen zur x -Achse” zeigen. In der quantenmechanischen Beschreibung gibt es keinen Widerspruch. Wir beschreiben die Spin-Phänomene mit Hilfe von Basiszuständen, die durch Projektoren bzw. Analysatoren erklärt sind. Der Zustand $|+z\rangle$ ist hier eine lineare Überlagerung der Zustände $|\pm x\rangle$. Auch in anderen Fällen ist es das Superpositionsprinzip, das einer klassischen Interpretation im Wege steht.

Der Übergang von der Basis $|\pm z\rangle$ zur Basis $|\pm z'\rangle$ wird (wie jeder Basiswechsel in der Quantentheorie) durch eine unitäre Transformation bewirkt, die sich (bei zweckmäßiger Phasenwahl) von der in 2.6 für die Photonpolarisation betrachteten nur durch das Auftreten des **halben** Drehwinkels unterscheidet. Die zugehörige Matrix ist daher

$$U_2(\theta) := U(z'|z) = \mathbf{1} \cos \frac{\theta}{2} + i\sigma_2 \sin \frac{\theta}{2}.$$

Bisher haben wir nur Strahlen betrachtet, bei denen die Quantisierungsrichtung senkrecht zur Strahlrichtung verlief. Man kann sich aber auch Strahlen vorstellen, bei denen die Quantisierungsrichtung eine andere Lage hat. Solche Strahlen kann man aus den bisher untersuchten mit Hilfe einer Apparatur herstellen, welche die Strahlrichtung dreht, ohne den Spin zu beeinflussen. Ein Strahl mit der Quantisierungsrichtung in der Bewegungsrichtung entsteht z.B. durch Drehung der Strahlrichtung um $\pi/2$. Für geladene Teilchen kann man eine solche Anordnung mit Hilfe von elektrischen Feldern erreichen, deren Wechselwirkung mit dem magnetischen Dipolmoment jedenfalls sehr klein gegen die elektrische Kraft ist. Für neutrale Atome kann man den Strahl durch elastische Stöße mit Teilchen ablenken, die keinen Drehimpuls übernehmen. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Ausnützung der Präzessionsbewegung des magnetischen Moments in einem homogenen Magnetfeld. Wir wollen uns um die technischen Details nicht kümmern, sondern uns für den unitären Operator interessieren, durch den Basiszustände $|\pm'\rangle$ einer beliebig verdrehten Basis aus einer Anfangsbasis $|\pm\rangle$ entstehen. Man kann sich dabei vorstellen, daß die Quantisierungsrichtung des Analysators mit den drei zueinander senkrechten Achsen

eines Koordinatensystems fest verbunden ist. Wählt man sie z.B. als 3-Achse, so bedeutet $|\pm\rangle \equiv |\pm z\rangle$. Die Achsen, auf welche die neue Basis $|\pm'\rangle$ bezogen ist, sollen aus den ursprünglichen durch eine Drehung hervorgehen. Jede solche Drehung läßt sich als Eulersche Drehung darstellen und durch die entsprechenden Winkel parametrisieren (vgl. M 3.6):

$$D(\gamma, \beta, \alpha) = D_3(\gamma) \cdot D_1(\beta) \cdot D_3(\alpha) .$$

Der Index bezeichnet dabei die Achse, um die gedreht wird, das Argument bedeutet den Drehwinkel. Zu jeder der drei Eulerdrehungen muß ein unitärer Operator gehören, der die entsprechende Drehung des Zweizustandssystems hervorbringt. Wir setzen daher

$$U(\gamma, \beta, \alpha) = U_3(\gamma) \cdot U_1(\beta) \cdot U_3(\alpha)$$

und berechnen die Faktoren einzeln. Dabei nützen wir die Gruppeneigenschaft

$$U_3(\alpha_1 + \alpha_2) = U_3(\alpha_2) \cdot U_3(\alpha_1)$$

und $U_3(0) = \mathbf{1}$ aus (analog für U_1). Die Drehung um die 3-Achse entspricht nur einer Änderung der Strahlrichtung ohne Änderung der Quantisierungsrichtung. Die Amplituden dürfen sich dabei nur um einen Phasenfaktor ändern. Das erreichen wir mit

$$U_3(\alpha) = \begin{pmatrix} \exp(ia(\alpha)) & , & 0 \\ 0 & , & \exp(ib(\alpha)) \end{pmatrix} .$$

Aus der Gruppeneigenschaft folgt

$$a(\alpha_1 + \alpha_2) = a(\alpha_1) + a(\alpha_2), \quad \text{analog für } b .$$

Daher ist

$$a(\alpha) = \alpha a , \quad b(\alpha) = \alpha b$$

mit zwei Konstanten a, b . Durch geeignete Wahl eines gemeinsamen Phasenfaktors können wir $a = -b$ erreichen. Es ist daher nur mehr die reelle Zahl a zu bestimmen. Dazu beachten wir, daß eine Drehung um $\alpha = 2\pi$ dasselbe wie keine Drehung bedeutet. Naiv würde man auf $\exp(2\pi ia) = 1, a = 1$ schließen. Dann würde aber eine Drehung um $\alpha = \pi$ nur einen Phasenfaktor -1 liefern und das wäre **falsch**. Um das einzusehen, betrachten wir als Ausgangsbasis $|\pm\rangle = |\pm x\rangle$. Die um $\alpha = \pi$ verdrehte Basis ist dann $|\pm'\rangle = |\mp x\rangle$ und das ist physikalisch sicher eine **andere** Basis. Verlangen wir hingegen, daß für $\alpha = 2\pi$ **und**

für **keinen kleineren Winkel** dieselben physikalischen Aussagen (Wahrscheinlichkeiten) resultieren sollen, wie ohne Drehung, so erhalten wir $a = 1/2$. Damit wird

$$U_3(\alpha) = \begin{pmatrix} \exp(i\alpha/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha/2) \end{pmatrix} = \exp\left(i\frac{\alpha}{2}\sigma_3\right).$$

Als nächsten Schritt betrachten wir den mittleren Faktor $U_1(\beta)$. Wir können ihn aus bereits bekannten Faktoren bestimmen, wenn wir beachten, daß sich eine Drehung um die 1-Achse aus den folgenden drei Schritten zusammensetzen läßt:

$$U_1(\beta) = U_2\left(-\frac{\pi}{2}\right) \cdot U_3(\beta) \cdot U_2\left(\frac{\pi}{2}\right).$$

Der erste Schritt macht die (alte) 1-Achse zur (neuen) 3-Achse, im zweiten Schritt wird um diese gedreht, im dritten Schritt wird der erste so kompensiert, daß insgesamt eine Drehung um die 1-Achse erfolgt ist. Die in der Formel auftretende Größe $U_2(\pm\pi/2)$ entspricht aber einer Drehung um die Strahlachse um den Winkel $\pm\pi/2$. Die entsprechende Matrix $U_2(\theta) = U(z'|z)$ wurde für einen beliebigen Drehwinkel bereits bestimmt. Für $\theta = \pi/2$ erhält man daraus

$$U_2\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} \pm i\sigma_2).$$

Mit der oben gefundenen Form für U_3 erhält man durch Multiplikation

$$U_1(\beta) = \mathbf{1} \cos \frac{\beta}{2} + i\sigma_1 \sin \frac{\beta}{2} = \exp\left(i\frac{\beta}{2}\sigma_1\right).$$

Die Matrix bzw. den Operator für eine allgemeine Eulerdrehung erhält man durch Multiplikation der drei Faktoren (vgl. Übungen). Wie bei den Drehungen in der Mechanik ist es in vielen Anwendungen einfacher, die Produktform zu verwenden. Damit beherrschen wir beliebige Drehungen im Hilbertraum des Zweizustandssystems für Spin 1/2. Die Operatoren U_1, U_2, U_3 entsprechen dabei Drehungen um die drei Koordinatenachsen.

Als Anwendung betrachten wir eine Transformation von einer Ausgangsbasis $|\pm\rangle = |\pm z\rangle$ zu einer neuen Basis $|\pm'\rangle = |\pm e\rangle$, deren Quantisierungsrichtung durch einen Einheitsvektor $\mathbf{e}(\mathbf{e}^2 = 1)$ bestimmt ist. Wir charakterisieren diesen Vektor durch seine Komponenten bezüglich des Ausgangssystems:

$$\mathbf{e} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) .$$

Dabei ist θ die Poldistanz (Winkel von \mathbf{e} mit der z -Achse) und φ das Azimut. Die zugehörige Transformation $U(\theta, \varphi)$

$$\begin{pmatrix} \langle + | \psi \rangle \\ \langle - | \psi \rangle \end{pmatrix} = U(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} \langle + | \psi \rangle \\ \langle - | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

erhält man durch zwei Drehungen um Koordinatenachsen oder eine Eulerdrehung mit einem festen Winkel:

$$U(\theta, \varphi) = U_2(\theta) \cdot U_3(\varphi) = U\left(-\frac{\pi}{2}, \theta, \varphi + \frac{\pi}{2}\right) .$$

Die erste Form ist anschaulich zu verstehen: Die erste Drehung bewirkt, daß die neue y -Achse senkrecht zu der von \mathbf{e} und der z -Achse gebildeten Ebene liegt, durch die zweite Drehung wird die z -Achse in die Richtung von \mathbf{e} gedreht. Die Eulerform findet man daraus mit

$$U_2(\theta) = U_3\left(-\frac{\pi}{2}\right) \cdot U_1(\theta) \cdot U_3\left(\frac{\pi}{2}\right) .$$

Aus $U(\theta, \phi)$ können wir die Transformation $U(\mathbf{e}, \psi)$ finden, die eine Koordinatendrehung um die Achse \mathbf{e} mit dem Drehwinkel ψ bewirkt (sog. Gibbsdrehung). Diese Drehung kann zur Definition des Verhaltens von Vektoren im dreidimensionalen Raum bei Drehungen verwendet werden (vgl. M A1). Die Transformation im Spinraum erhalten wir, wenn wir zuerst die z -Achse mit $U(\theta, \phi)$ in Richtung \mathbf{e} drehen, dann um diese neue z -Achse um ψ drehen und dann die erste Drehung mit $U^\dagger(\theta, \varphi)$ wieder rückgängig machen:

$$U(\mathbf{e}, \psi) = U^\dagger(\theta, \varphi) \cdot U_3(\psi) \cdot U(\theta, \varphi) .$$

Mit dieser Transformation kann man Drehungen von Vektoren im dreidimensionalen Raum mit Hilfe der Paulialgebra (also mit 2×2 -Matrizen) untersuchen (vgl. Übungen).

Übungen

1) Beweise die Unitarität von $U(\gamma, \beta, \alpha)$.

2) Wie lauten die Koeffizienten b_0, b_k in der Form

$$U(\gamma, \beta, \alpha) = b_0 \mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} ?$$

3) Wie lauten die entsprechenden Koeffizienten für $U(\mathbf{e}, \psi)$?

4) Bestimme den Exponenten in der Form

$$U(\mathbf{e}, \psi) = \exp B .$$

5) Bestimme die Koeffizienten D_{kl} in der Form

$$U(\mathbf{e}, \psi) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} U^\dagger(\mathbf{e}, \psi) = D_{kl} \sigma_k a_l$$

und interpretiere ihre geometrische Bedeutung.

In den folgenden drei Beispielen ist die Matrix $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ (\mathbf{a} reeller Vektor) mit einer Matrix M zu diagonalisieren

$$M \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} M^{-1} = \text{diag.}$$

Zu bestimmen sind die Eigenwerte und die Parameter, von denen M abhängt.

6) $M = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}$, \mathbf{e} reell, $\mathbf{e}^2 = 1$, $\mathbf{e} = ?$

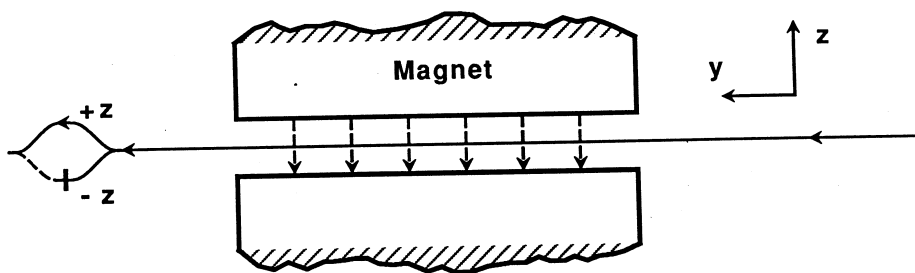
7) $M = U(\mathbf{e}, \psi)$, $\mathbf{e} = ?$ $\psi = ?$

8) $M = U(\gamma, \beta, \alpha)$, $(\gamma, \beta, \alpha) = ?$

Wie resultiert die Lösung von 6) bzw. 7) als Spezialfall ?

3.3 Dynamik von Spindrehungen

Um die Beschreibung zeitlicher Veränderungen in der Quantentheorie plausibel zu machen, betrachten wir nun ein Experiment mit einem Strahl von Teilchen mit Spin $1/2$, der so präpariert sein soll, daß die Quantisierungsrichtung e durch Winkel θ, φ mit den Achsen unseres Koordinatensystems bestimmt ist. Die Strahlteilchen sollen sich in einem bestimmten Zustand befinden, den wir mit $|\theta, \varphi_0\rangle$ bezeichnen (er könnte z.B. durch Anwendung von $U(\theta, \varphi_0)$ auf Basiszustände $|\pm z\rangle$ hergestellt werden). Der Strahl soll in y -Richtung zwischen den Polschuhen eines Magneten laufen, der ein homogenes Feld in z -Richtung erzeugt. Nach Passieren des Feldes analysieren wir den Strahl mit einem Stern-Gerlach-Analysator in z -Richtung (bzw. zwei entsprechenden Projektoren):



Wir machen mehrere Versuche, bei denen die Feldstärke des homogenen Feldes und die kinetische Energie der Strahlteilchen festgehalten wird, aber die Länge der Polschuhe in y -Richtung geändert wird (eine Alternative wären mehrere Versuche mit demselben Magneten, aber mit Strahlen unterschiedlicher kinetischer Energie). Als Resultat des Experiments befindet sich der Strahl nach Passieren des Feldes in einem Zustand $|\theta, \varphi_0 + \Delta\varphi\rangle$, wobei $\Delta\varphi$ proportional zur Feldstärke und zur Länge der Polschuhe ist. In Termen einer quasiklassischen Modellbeschreibung der Strahlteilchen (vgl. ED 4.7) wäre das evident. In dieser hat jedes Teilchen ein magnetisches Moment, das seinem Eigendrehimpuls proportional ist. Das homogene Feld trachtet, die magnetischen Momente auszurichten. Über den Drehimpuls und entsprechende Kreiseffekte führt das zu einer Präzessionsbewegung der magnetischen Momente um die Feldrichtung, die mit einer bestimmten Frequenz ω_P erfolgt, die zur Feldstärke proportional ist. Verbringen die Teilchen die Zeit t im Feld, so ist $\Delta\varphi = t\omega_P$ und das gibt den oben erwähnten experimentellen Befund. Im Rahmen der Quantentheorie ist zwar plausibel, daß

sich in dem Experiment höchstens φ ändern kann: Das homogene Feld kann keine Aufspaltung bewirken und ändert daher nichts an der Quantisierungsrichtung des Strahls, bezüglich der θ definiert ist. Daß aber $\Delta\varphi$ auch in der Quantentheorie proportional zu der im Feld verbrachten Zeit und (über die Präzessionsfrequenz) zur Feldstärke ist, muß als experimentelles Resultat betrachtet werden: Wir haben bei der Betrachtung des Stern-Gerlach-Experiments bereits darauf hingewiesen, daß nicht alle Züge des quasiklassischen Modells vertrauenswürdig sind. Daß die entsprechende Vorstellung einer Präzessionsbewegung trotzdem verwendet werden darf, muß (und kann) durch entsprechende Versuche gezeigt werden. So kann man sich z.B. davon überzeugen, daß für $\theta = 0$ oder π keine Präzession stattfindet: Die Zustände $|\pm z\rangle$ werden also nicht verändert. Befinden sich die Teilchen anfangs im Zustand $|\pm x\rangle$ (d.h. $\theta = \pi/2, \varphi_0 = 0$), so muß am anderen Ende des Magneten der Zustand $|\mp x\rangle$ festgestellt werden, wenn die Zeit t so gewählt wird, daß $\Delta\varphi = \pi$ ist. Das ist tatsächlich der Fall; man kann daher ein homogenes Magnetfeld zur Realisierung von Spindrehungen benützen.

Nun suchen wir den Operator, der den Apparat "homogenes Magnetfeld" beschreibt, also eine Matrixdarstellung für eine Größe A , die

$$|\theta, \varphi_0 + \Delta\varphi\rangle = A|\theta, \varphi_0\rangle$$

bewirkt. Am einfachsten ist das in der $|\pm z\rangle$ -Darstellung:

$$\begin{aligned} \langle \pm z | \theta, \varphi_0 + \Delta\varphi \rangle &= \langle \pm z | A | \theta, \varphi_0 \rangle = \\ &= \langle \pm z | A | + z \rangle \langle + z | \theta, \varphi_0 \rangle + \langle \pm z | A | - z \rangle \langle - z | \theta, \varphi_0 \rangle . \end{aligned}$$

Die Matrixelemente $\langle \pm z | \theta, \varphi_0 \rangle$ sind aus der im vorhergehenden Abschnitt bestimmten Matrix $U(\theta, \varphi_0)$ abzulesen, die aus den Elementen $\langle + ' | + \rangle = \langle \theta, \varphi_0 | + z \rangle, \langle + ' | - \rangle$ etc. besteht. In der Standarddarstellung der Paulimatrizen ist

$$\begin{aligned} \langle + z | \theta, \varphi_0 \rangle &= \langle + ' | + \rangle^* = \cos \frac{\theta}{2} \exp \left(-i \frac{\varphi_0}{2} \right) \\ \langle - z | \theta, \varphi_0 \rangle &= \langle + ' | - \rangle^* = \sin \frac{\theta}{2} \exp \left(i \frac{\varphi_0}{2} \right) . \end{aligned}$$

Die entsprechenden Formeln für die linke Seite der Gleichung entstehen durch $\varphi_0 \rightarrow \varphi_0 + \Delta\varphi$. Für $\theta = 0$ darf keine Präzession erfolgen, d.h. der Zustand $|+z\rangle$ darf sich nur um einen Phasenfaktor ändern; es darf

daher auf der rechten Seite keine Beimischung von $| - z \rangle$ auftreten. Daher muß

$$\langle +z|A| - z \rangle = 0$$

sein. Analog findet man durch Betrachtung von $\theta = \pi$

$$\langle -z|A| + z \rangle = 0 .$$

In der betrachteten Darstellung ist daher A diagonal. Die Diagonalelemente sind nun direkt abzulesen:

$$\langle +z|A| + z \rangle = \exp\left(\frac{-i}{2}\Delta\varphi\right) , \quad \langle -z|A| - z \rangle = \exp\left(\frac{i}{2}\Delta\varphi\right) .$$

In dieser Darstellung ist also A mit $U^\dagger(0, \Delta\varphi) = U_3^\dagger(\Delta\varphi)$ identisch. In anderen Darstellungen (vgl. Übungen) ist A nicht diagonal. Jedenfalls ist aber A unitär, denn diese Eigenschaft geht bei Transformation in andere Darstellungen nicht verloren. Daß A (in allen Darstellungen) nur von $\Delta\varphi$ und nicht von φ_0 abhängt, ist wegen der Rotationssymmetrie des Feldes um die z -Achse plausibel. Identifizieren wir nun $\Delta\varphi$ mit $\omega_P t$, so bedeutet das lediglich eine andere Parametrisierung. Der Zustand an verschiedenen Stellen im homogenen Magnetfeld wird dann durch einen zeitabhängigen Zustandsvektor

$$|\Psi(t)\rangle = |\theta, \varphi(t)\rangle = |\theta, \varphi_0 + \omega_P t\rangle$$

beschrieben. Der Zusammenhang zwischen Zuständen zu verschiedenen Zeiten wird durch einen **unitären** Operator $U(t) = A(\theta, \omega_P t)$ beschrieben, der hier wegen der oben erwähnten Symmetrie nur von der verstrichenen Zeit t abhängt:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(t_0)\rangle = A(\theta, \Delta\varphi)|\theta, \varphi_0\rangle .$$

Die Zeit $t = \Delta\varphi/\omega_P$ bzw. $t_0 = \varphi_0/\omega_P$ ist dabei ein typisches Zustandscharakteristikum: Sie bezieht sich auf **ein** Objekt (Teilchen), das aber Mitglied einer Gesamtheit von identisch präparierten Objekten (Teilchenstrahl) ist.

Als Folge sind alle Transformationsfunktionen zu festen Basiszuständen, wie z.B.

$$\langle \pm|\Psi(t)\rangle = \langle \pm z|\theta, \varphi(t)\rangle , \quad \langle \pm'|\theta, \varphi(t)\rangle \quad \text{usw.}$$

zeitabhängig und damit auch die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten (z.B. die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t den Zustand $|+z\rangle$ zu finden, wenn der Strahl vorher im Zustand $|+x\rangle$ war, vgl. Übungen). Es gibt aber bestimmte Wahrscheinlichkeiten, die nicht von der Zeit abhängen. Dieser Fall liegt vor, wenn die Zeitabhängigkeit in der betreffenden Amplitude ein Phasenfaktor ist. Beispiele dafür sind:

$$\begin{aligned}\langle +z|\theta, \varphi(t)\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} \exp\left(-\frac{i}{2}(\varphi_0 + \omega_P t)\right) \\ \langle -z|\theta, \varphi(t)\rangle &= \sin \frac{\theta}{2} \exp\left(\frac{i}{2}(\varphi_0 + \omega_P t)\right).\end{aligned}$$

Als Folge davon gibt es zwei Zustände

$$|\Psi_{\pm}(t)\rangle := |\pm z\rangle \exp(\mp i\omega t),$$

für die **alle** Wahrscheinlichkeiten zu festen Basiszuständen zeitunabhängig sind, weil der entsprechende Phasenfaktor bei Bildung des Absolutquadrates wegfällt. Zustände mit dieser Eigenschaft (Zeitabhängigkeit nur ein Phasenfaktor, Wahrscheinlichkeiten **zeitunabhängig**) nennen wir **stationäre** Zustände. Im hier betrachteten Fall (Spin 1/2) gibt es zwei solche Zustände. Die im Phasenfaktor auftretende Frequenz ω ist die halbe Präzessionsfrequenz $\omega = \omega_P/2$.

Nun versuchen wir, die Zeitabhängigkeit so zu schreiben, daß wir allgemeine Züge erkennen können. Für Photonen hing die Frequenz mit der Energie durch $E = \hbar\omega$ zusammen. Verwenden wir diesen Zusammenhang (ohne nachzudenken, ob wir das tun dürfen) auch hier, so erhalten wir

$$|\Psi_{\pm}(t)\rangle = |\pm z\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{\pm}t\right) \quad \text{mit} \quad E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2}\omega_P.$$

Die beiden stationären Zustände müssen wir dann als Zustände mit den Energien E_{\pm} ansehen. Dieses Resultat muß jedoch physikalisch begründet werden; schließlich sind Photonen ganz andere Systeme als Atome oder Neutronen; der angeführte Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz ist zunächst rein formal. Um zu einer besseren Begründung zu kommen, betrachten wir zunächst Atome und benützen den in 3.1 angegebenen Zusammenhang zwischen dem magnetischen Moment und dem Drehimpuls. Ist das magnetische Moment entgegengesetzt zum Feld gerichtet (bzw. der Drehimpuls parallel zum Feld), so ist die Wechselwirkungsenergie

$$E_w = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = g\mu_B B j_z .$$

Dabei ist

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 5.788382 \cdot 10^{-5} \text{ eV/Tesla}$$

das Bohrsche Magneton und $j_z = J_z/\hbar$. Aus der klassischen Formel für die Präzessionsfrequenz (Larmorpräzession, vgl. ED 4.7) finden wir andererseits

$$E_+ = \frac{\hbar}{2}\omega_P = \frac{\hbar}{2} \frac{geB}{2mc} = \frac{1}{2}g\mu_B B .$$

Die beiden Energien E_w und E_+ stimmen daher für $j_z = 1/2$ (also Drehimpuls $\hbar/2$) überein. Dem anderen Energiewert E_- entspricht ein in Feldrichtung orientiertes magnetisches Moment. Die Formel $E = \hbar\omega$ ist also auch hier in konsistenter Weise anwendbar, wenn wir den Spin (der zunächst nur eine Nomenklatur für die Zahl der Sekundärstrahlen beim Stern-Gerlach-Versuch war) als Drehimpuls identifizieren. Damit ergibt sich aber auch, daß die Zeitabhängigkeit der beiden stationären Zustände in einem Phasenfaktor der Form

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

enthalten ist, wobei E als Energie des betreffenden Zustandes aufzufassen ist. Die kinetische Energie E_{kin} der Teilchen ist in E_{\pm} nicht enthalten; sie ist aber in dem Experiment, das wir analysiert haben, voraussetzungsgemäß für alle Teilchen gleich groß; addiert man sie zu E_{\pm} , so bedeutet das einen zusätzlichen gemeinsamen Phasenfaktor, der keine physikalischen Konsequenzen hat; läßt man ihn weg, so bedeutet das, daß man die Energie von E_{kin} an zählt.

Konsistenzbetrachtungen sind zwar gut und notwendig, aber nicht ausreichend, wenn sie nicht durch direkte Experimente gestützt werden können. Im hier betrachteten Fall wird man aus unserer Interpretation der stationären Zustände schließen, daß Übergänge zwischen den beiden Zuständen unter Absorption bzw. Emission einer bestimmten Frequenz

$$\omega_P = \frac{1}{\hbar}(E_+ - E_-) = \frac{1}{\hbar}g\mu_B B$$

erfolgen sollten. Bei einer Feldstärke von 0.1 Tesla und $g = 2$ entspricht das einer Frequenz von 17.59 GHz. Solche Übergänge werden in magnetischen Resonanzexperimenten tatsächlich beobachtet. Unsere

Betrachtung ist daher experimentell abgesichert. Offen bleibt dabei nur der Faktor g . Zu seiner Bestimmung müßte man den “inneren” (d.h. atomaren) Mechanismus der Strahlteilchen kennen. Für Atome werden wir g in einem späteren Abschnitt berechnen.

Eine Reihe von Elementarteilchen benehmen sich in Magnetfeldern so, daß ihnen ein magnetisches Moment zugeordnet werden muß. Der Spin und sein Zusammenhang mit dem magnetischen Moment ist dabei der Teilchenphysik zu entnehmen. In der relativistischen Diracschen Theorie für Teilchen mit Spin $1/2$ erhält man

$$\boldsymbol{\mu} = \pm \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}$$

wobei $\pm e$ die Ladung und m die Masse des Teilchens ist. Für das Elektron entspricht das **einem** Bohrschen Magneton und somit $g = 2$. Für das Proton ist die natürliche Einheit das Kernmagneton

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_P c} = 3.152451 \cdot 10^{-8} \text{ eV/Tesla}$$

und der g -Faktor sollte ebenfalls 2 betragen. Neutronen sollten als neutrale Teilchen kein magnetisches Moment haben. Als Folge quantenfeldtheoretischer Effekte stimmen diese Aussagen nicht mit der Wirklichkeit überein. Für Elektronen und Muonen ist die Abweichung vom Diracschen Wert jedoch klein. Die Anomalie $a = (|g| - 2)/2$ ist von der Größenordnung 10^{-3} . Die Anomalie wurde sowohl experimentell als auch theoretisch (Quantenelektrodynamik) mit hoher Genauigkeit bestimmt. Für das magnetische Moment des Elektrons sind neun Dezimalstellen gesichert (es gehört damit zu den am besten bekannten Größen der ganzen Physik), für das Muon ist die Situation fast ebenso gut. Für die Nukleonen ist die Abweichung vom Diracschen Wert wesentlich größer. Das ist eine Folge der durch die starke Wechselwirkung bedingten Struktur dieser Teilchen. Für das Proton entspricht der gemessene Wert

$$\frac{g_P}{2} = 2.792847 \quad (\text{also } a = 1.792847) .$$

Für das Neutron ist das Moment zur Gänze anomal

$$\frac{g_N}{2} = -1.913043 = -a .$$

Übungen

- 9) Zeige, daß der im Text verwendete Operator A in einer Darstellung, die durch die Winkel θ, φ_0 charakterisiert ist, die Form

$$A = U(\theta, \varphi_0)U^{-1}(\theta, \varphi_0 + \Delta\varphi)$$

hat und nicht von φ_0 abhängt.

- 10) Bestimme die Matrix A in der $|\pm x\rangle$ -Darstellung.
- 11) Die Teilchen eines Strahls mit Spin $1/2$ sollen sich anfangs im Zustand $|+x\rangle$ befinden. Finde den Zustand $|\Psi(t)\rangle$, in dem sie sich nach Passieren eines homogenen Magnetfeldes befinden. Zeige, daß der Zustand kein stationärer Zustand ist. Welche Konsequenzen ergeben sich für die Energie bei der Analyse von $|\Psi(t)\rangle$ mit einem $|\pm z\rangle$ -Analysator? Vergleiche mit der klassischen Energie eines entsprechenden magnetischen Dipols im homogenen Magnetfeld.

3.4 Die Zeitentwicklung von Zuständen

Die Verallgemeinerung der im vorigen Abschnitt durchgeführten Untersuchungen auf Teilchen mit höherem Spin (mehr als 2 Teilstrahlen im Stern-Gerlach-Versuch) bereitet keine prinzipiellen Schwierigkeiten. Wir halten uns damit nicht auf und versuchen, durch “freche” Verallgemeinerung zu einer allgemeinen Erfassung zeitlicher Änderungen in der Quantentheorie zu kommen. Wir versuchen eine Beschreibung in Form eines zeitabhängigen Zustandsvektors $|\Psi(t)\rangle$ und betrachten den Operator, der Zustandsvektoren zu verschiedenen Zeiten verknüpft, d.h. also die zeitliche Entwicklung des Systems beschreibt:

$$|\Psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle, \quad \langle\Psi(t_2)| = \langle\Psi(t_1)|U^\dagger(t_2, t_1).$$

Dieser Operator ist offenbar die Verallgemeinerung von A aus dem vorhergehenden Abschnitt. Er ist von fundamentaler Bedeutung, denn er enthält die ganze Dynamik: Wenn man weiß, wie sich der Zustand im Lauf der Zeit ändert, so versteht man das betrachtete System offenbar vollständig. Der zu U gehörige “Apparat” besteht offenbar aus dem ganzen System; man überläßt es zur Zeit t_1 sich selbst, wartet dann (unbeteiligt) bis t_2 und sieht nach, was daraus geworden ist.

Bei dem im vorhergehenden Abschnitt betrachteten Beispiel hing U als Folge einer Symmetrieeigenschaft nur von der seit t_0 verstrichenen Zeit $t_2 - t_1$ ab. Allgemein dürfen wir das nicht annehmen, deswegen haben wir beide Zeitargumente in U aufgenommen. Wir wollen aber voraussetzen, daß U unitär ist:

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}$$

Diese Eigenschaft ist schon deshalb plausibel, weil es möglich sein sollte, die zeitliche Entwicklung als Basiswechsel aufzufassen – man muß zu jeder Zeit eine geeignete Basis finden können. Mathematisch bedeutet die Unitarität, daß die Norm von $|\Psi(t)\rangle$ nicht von der Zeit abhängt:

$$\langle\Psi(t_2)|\Psi(t_2)\rangle = \langle\Psi(t_1)|U^\dagger(t_2, t_1)U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle = \langle\Psi(t_1)|\Psi(t_1)\rangle.$$

Physikalisch heißt das, daß die Gesamtwahrscheinlichkeit zeitunabhängig ist. Haben wir sie einmal mit 1 festgesetzt, so bleibt sie 1.

Eine weitere plausible Eigenschaft von U ist die Gruppeneigenschaft. Warten wir erst von t_1 bis t_2 und dann von t_2 bis t_3 , so ist das offenbar gleichbedeutend damit, daß wir von t_1 bis t_3 warten:

$$U(t_3, t_2) \cdot U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1) .$$

Wenn wir garnicht warten, so ändert sich das System nicht:

$$U(t, t) = \mathbf{1} .$$

Nun betrachten wir $U(t + \delta t, t)$ mit sehr kleinem δt (wir warten also nur eine sehr kurze Zeit). Für $\delta t = 0$ muß $\mathbf{1}$ herauskommen. In linearer Näherung ist

$$U(t + \delta t, t) = \mathbf{1} + K(t)\delta t + \dots .$$

Aus der Unitarität folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= U^\dagger(t + \delta t, t)U(t + \delta t, t) = (\mathbf{1} + K^\dagger\delta t + \dots)(\mathbf{1} + K\delta t + \dots) \\ &= \mathbf{1} + (K^\dagger + K)\delta t + \dots . \end{aligned}$$

Daher muß für den Operator K

$$K + K^\dagger = 0 , \quad K^\dagger = -K$$

gelten. Ziehen wir aus K einen Faktor i heraus, so ist der Rest selbstadjungiert. Ein zweckmäßiger Ansatz ist

$$K(t) = -\frac{i}{\hbar}H(t)$$

Der Operator H ist selbstadjungiert

$$H = H^\dagger$$

und heißt **Hamiltonoperator**. Offenbar beschreibt er das Verhalten des Systems bei kleinen, zeitlichen Änderungen:

$$|\Psi(t + \delta t)\rangle = U(t + \delta t, t)|\Psi(t)\rangle = \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}H(t)\delta t \right) |\Psi(t)\rangle$$

und ist das quantentheoretische Gegenstück zur Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik (vgl. M 4.9, 4.10). Daraus erhalten wir mit den Methoden der Differentialrechnung

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

Diese Differentialgleichung heißt (zeitabhängige) **Schrödingergleichung** und ist als ‘‘Bewegungsgleichung’’ für den Zustandsvektor, also als dynamisches Grundgesetz (oder Evolutionsgleichung) der Quantentheorie

aufzufassen. Der Zustand wird durch die Gleichung in Termen eines Anfangszustandes $|\Psi(t_0)\rangle$ festgelegt, wenn der Operator $H(t)$ bekannt ist.

Durch Multiplikation mit (festen, d.h. zeitunabhängigen) Basiszuständen $\langle ai|$ erhalten wir ein System von linearen Differentialgleichungen

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle ai|\Psi(t)\rangle = \sum_k \langle ai|H(t)|ak\rangle \langle ak|\Psi(t)\rangle .$$

Die Matrixelemente von H bilden die Koeffizienten des Gleichungssystems und müssen bekannt sein, wenn man es lösen will. Wir werden später Methoden entwickeln, mit denen man den Hamiltonoperator für ein vorgegebenes Problem finden kann. Es gibt jedoch eine Reihe von Problemstellungen, bei denen es günstiger ist, die Matrixelemente aus physikalischen Überlegungen zu “erraten” (d.h. einen entsprechenden Ansatz zu machen). Das ist insbesondere der Fall, wenn die Zahl der Basiszustände klein ist, weil man dann nur relativ wenige Matrixelemente erraten muß. Selbst wenn die Zahl der Basiszustände in Wirklichkeit groß ist, kann die Beschränkung auf einen Teil von ihnen eine vernünftige Näherung darstellen. Dieser Fall wird dann vorliegen, wenn die Kopplung an den Rest schwach ist (d.h. die entsprechenden Matrixelemente von H relativ klein sind). Ob es möglich ist, auf diese Weise einen “wichtigen” Teil des Zustandsraumes zu isolieren, hängt nicht nur vom betrachteten Problem, sondern auch von der gewählten Basis ab.

Untersuchen wir nun, wie stationäre Zustände in den betrachteten Rahmen passen. Für einen stationären Zustand $|\Psi_{stat}(t)\rangle$ ist die Zeitabhängigkeit (definitionsgemäß) ein Phasenfaktor

$$|\Psi_{stat}(t)\rangle = |E\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) .$$

Durch Einsetzen in die Schrödingergleichung erhalten wir nach Kürzen des Phasenfaktors die Gleichung

$$H|E\rangle = |E\rangle E$$

(stationäre oder zeitfreie Schrödingergleichung). Aus der Form dieser Gleichung kann man zunächst entnehmen, daß H nicht (explizit) von t abhängen darf, wenn es stationäre Zustände geben soll, denn E ist zeitlich konstant. Der Name “stationär” erscheint dadurch gerechtfertigt.

Der Hamiltonoperator ist in diesem Fall der Operator der Energie (und ein zugehöriger Apparat ist im Prinzip jeder, mit dem man Energiewerte mißt). Daß H nur dann die Bedeutung einer Energie hat, wenn es die Zeit nicht explizit enthält, entspricht der analogen Situation in der klassischen Mechanik.

Die stationäre Schrödingergleichung hat die Form einer Eigenwertgleichung. Die Anwendung des Operators H auf den Zustand $|E\rangle$ reproduziert den Zustand bis auf einen Zahlfaktor, den Eigenwert E . Im allgemeinen hat diese Gleichung mehr als eine Lösung, d.h. es gibt ein ganzes Spektrum von Eigenwerten $E = E_{(n)}$, $n = 1, 2, \dots$ und Eigenzuständen $|E_{(n)}\rangle$, aus denen man durch Multiplikation mit dem entsprechenden Phasenfaktor stationäre Zustände erhält. Als Folge von $H = H^\dagger$ sind die Eigenwerte stets reell. In einer festen Basis $|ai\rangle$ erhält man aus der stationären Gleichung ein homogenes lineares Gleichungssystem:

$$\sum_k (\langle ai|H|ak\rangle - E_{(n)}\delta_{ik})\langle ak|E_{(n)}\rangle = 0.$$

Die Eigenwerte können mit den Methoden der linearen Algebra bestimmt werden. Dazu muß man die Matrix

$$(H) = (\langle ai|H|ak\rangle)$$

diagonalisieren, d.h. eine Matrix M suchen, mit der

$$M \cdot (H) \cdot M^{-1} = \text{diag.} (E_{(1)}, E_{(2)}, \dots)$$

wird. Die Matrixelemente von M sind die zugehörigen Transformationsfunktionen:

$$(M) = (\langle E_{(i)}|ak\rangle).$$

Nach unserer allgemeinen Interpretation von Zuständen und Transformationsfunktionen kann man bei einer Messung der Energie eines quantenmechanischen Systems als Meßwerte nur die Eigenwerte erhalten. Eine Energiemessung impliziert, daß man einen Analysator konstruiert, dessen Ausgangskanäle den Eigenzuständen $|E_{(n)}\rangle$ entsprechen. Durch entsprechende Intensitätsmessungen kann man die Wahrscheinlichkeiten bestimmen, mit denen die Eigenzustände im Eingangszustand (dessen Energie man messen will) enthalten sind. Für einen stationären Zustand zur Energie $E_{(n)}$ geht "alles" durch den entsprechenden Kanal, die Wahrscheinlichkeit für $E_{(n)}$ ist zeitunabhängig (der Phasenfaktor

fällt heraus) und gleich 1, alle anderen Wahrscheinlichkeiten bzw. Intensitäten verschwinden. Für einen nichtstationären Zustand erhält man in mehreren Ausgangskanälen eine von Null verschiedene Intensität und die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind i.a. zeitabhängig. Es ist daher nicht möglich, einem solchen Zustand eine bestimmte Energie zuzuordnen.

Aus der Schrödingergleichung für $|\Psi(t)\rangle$ folgt, daß auch U eine analoge Gleichung erfüllt:

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

Aus dieser Gleichung und der Anfangsbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ erhält man die Integralgleichung

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) U(\tau, t_0) d\tau .$$

In diesen Gleichungen bedeutet t_0 einen Anfangszeitpunkt, in dem man die Zeitentwicklung zu betrachten beginnt. Man kann ihn z.B. als Anfangszeitpunkt der Zeitzählung wählen ($t_0 = 0$).

Hängt H **nicht** (explizit) von der Zeit ab, so kann die Differentialgleichung für U durch eine Exponentialfunktion gelöst werden:

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H\right) .$$

Man sieht, daß U in diesem Fall nur von der verstrichenen Zeit ($t - t_0$) abhängt. Für **zeitabhängiges** H ist keine einfache explizite Lösung angebar. Wie schon bemerkt, gibt es in diesem Fall keine stationären Zustände. In einem praktisch relevanten Sonderfall kann das Konzept von Zuständen mit bestimmter Energie wenigstens in einem eingeschränkten Sinn aufrechterhalten werden, und zwar dann, wenn $H(t)$ **periodisch** von der Zeit abhängt

$$H(t + T) = H(t) \quad \text{mit festem} \quad T = \frac{2\pi}{\omega} .$$

In diesem Fall kann man zeigen (vgl. Übungen), daß es Lösungen der Schrödingergleichung

$$|\epsilon_k, t\rangle = U(t)|\epsilon_k\rangle$$

mit der Eigenschaft

$$|\epsilon_k, t + T\rangle = |\epsilon_k, t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k T\right)$$

gibt. Diese Zustände heißen **quasiperiodische** Zustände. Die zugehörigen Energiewerte ϵ_k ($k = 1, 2, \dots$) heißen **Quasienergien** und sind durch die Schrödingergleichung nur bis auf ganzzahlige Vielfache der Frequenz

$$m\hbar\omega = m\hbar\frac{2\pi}{T} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

festgelegt. Die quasiperiodischen Zustände spielen für periodisch zeitabhängiges $H(t)$ die gleiche Rolle wie die stationären Zustände für konstantes H .

Ein interessantes quantenmechanisches Phänomen bei periodischer Zeitabhängigkeit ist das Auftreten von **Resonanzen**. Um zu verstehen, was damit gemeint ist, betrachten wir ein System, dessen Hamiltonoperator aus zwei Teilen besteht:

$$H = H_0 + gH_1(t)$$

(dabei ist g ein numerischer Parameter). Der erste Term soll zeitkonstant sein, der zweite periodisch mit einer festen Frequenz ω . Für $g = 0$ hat das System daher stationäre Zustände zu bestimmten Energiewerten $E_{(n)}$. Am Anfang soll das "gestörte" System ($g \neq 0$) in einem dieser Zustände sein:

$$|\Psi(0)\rangle = |E_{(n)}\rangle .$$

Wir interessieren uns für die Wahrscheinlichkeit, mit der es zur Zeit t in einem anderen stationären Zustand von H_0 angetroffen wird:

$$W_{mn}(t) = |\langle E_{(m)}|\Psi(t)\rangle|^2 .$$

In Analogie zu Schwingungsphänomenen in anderen Gebieten der Physik spricht man von Resonanz, wenn die Übergangswahrscheinlichkeit als Funktion von ω bei bestimmten Werten deutliche Maxima hat. Das ist i.A. dann der Fall, wenn $\hbar\omega$ mit dem Energieunterschied der beiden Zustände vergleichbar ist

$$\hbar\omega \sim E_{(m)} - E_{(n)} .$$

Die Form der Maxima und ihre Lage ist von Interesse. Resonanzphänomene werden in vielen Anwendungen ausgenützt.

Übungen

- 12) Betrachte ein stationäres quantenmechanisches Problem. Der Hamiltonoperator $H(\lambda)$, seine (normierten) Eigenzustände $|\psi(\lambda)\rangle$ und die zugehörigen Eigenwerte $E(\lambda)$ sollen differenzierbare Funktionen eines Parameters λ sein. Beweise die Beziehung

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \langle \psi(\lambda) | \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} | \psi(\lambda) \rangle .$$

Die Formel heißt Hellmann-Feynman-Theorem und hat viele Anwendungen in verschiedenen Gebieten der Quantentheorie. Publiziert wurde die Formel zuerst in einem Buch (H.Hellmann, Einführung in die Quantenchemie, Deuticke Leipzig 1937). Ohne Kenntnis davon hat sie R.P.Feynman als 21-jähriger Student 1939 gefunden (Phys.Rev.**56**, 340(1939)).

- 13) Der Hamiltonoperator eines stationären Problems soll aus zwei Beiträgen bestehen $H = H_0 + gH_1$, wobei die Eigenzustände $|\psi_0\rangle$ und Eigenwerte E_0 von H_0 bekannt sind. Berechne den Eigenwert von H für kleine Werte des Parameters g .
- 14) Der Hamiltonoperator eines n -Zustandssystems soll periodisch von der Zeit abhängen

$$H(t) = H(t + T) \text{ mit festem } T = \frac{2\pi}{\omega} .$$

Versuche, die folgenden Aussagen zu beweisen:

- a) Es gibt quasiperiodische Lösungen der Schrödingergleichung

$$|\epsilon_j, t + T\rangle = |\epsilon_j, t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_j T\right) .$$

Die Quasienergien ϵ_j sind nur bis auf ganzzahlige Vielfache der Frequenz $m\hbar\omega$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) bestimmt.

- b) Die quasiperiodischen Zustände sind für jeden festen Wert von t orthogonal und vollständig.
- c) Die Zeitentwicklung ist in der Form (sogenannte Floquetform)

$$U(t) = P(t) \exp(-itG)$$

darstellbar. Dabei ist P periodisch mit T und unitär

$$P(t + T) = P(t) , \quad P(t)P^\dagger(t) = \mathbf{1} .$$

Der (konstante) Operator G ist selbstadjungiert $G = G^\dagger$. Seine Eigenwerte sind die Quasienergien.

3.5 Dynamik von Zweizustandssystemen

Das Zweizustandssystem bildet das einfachste nichttriviale Beispiel für den bisher entwickelten Formalismus. Als konkrete physikalische Anwendungen haben wir bisher (außer den Polarisationszuständen von Licht) nur Spin 1/2-Teilchen in einem Magnetfeld betrachtet. Es gibt aber viele andere Phänomene aus einem weiten Bereich der Physik, die mit Hilfe von Zweizustandssystemen verstanden werden können. Wir untersuchen daher in diesem Abschnitt einige allgemeine Züge, wobei wir von der Algebra der Paulimatrizen ausgiebig Gebrauch machen (weitere Details vgl. die Übungen). Ausgangspunkt ist eine beliebige feste Basis von zwei Zuständen, die wir $|a1\rangle =: |1\rangle, |a2\rangle =: |2\rangle$ nennen. In dieser Basis sollen die vier Matrixelemente $\langle i|H|k\rangle (i, k = 1, 2)$ vorgegeben sein. Physikalisch bedeutet das, daß sich das betrachtete System in dieser Basis (exakt oder in guter Näherung) als Zweizustandssystem beschreiben läßt. **Wäre** H in dieser Basis diagonal und zeitunabhängig, so hätte das System zwei stationäre Zustände mit festen Energieeigenwerten. Wir wollen dieses System als das "ungekoppelte System" bezeichnen und als Vergleichssystem heranziehen. Die Bezeichnungweise der Zustände $|1\rangle, |2\rangle$ soll dabei so gewählt sein, daß $|1\rangle$ dem energetisch tiefer liegenden Zustand des ungekoppelten Systems entspricht. Für das in 3.2 betrachtete Beispiel ist $|2\rangle = | + z\rangle, |1\rangle = | - z\rangle$.

Die Matrix von H in der Ausgangsdarstellung läßt sich allgemein als Linearkombination der Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ und der drei Paulimatrizen σ_k mit reellen Koeffizienten darstellen (vgl. 2.10, insbesondere die Übungsbeispiele 2.16, 2.20 und 2.24). Eine Vereinfachung kann erzielt werden, indem man sich daran erinnert, daß ein gemeinsamer Phasenfaktor an allen Zuständen (oder an allen Elementen der Matrix $U(t, t_0)$) physikalisch irrelevant ist, weil er bei Berechnung von Wahrscheinlichkeiten herausfällt. Ist a_0 der Koeffizient von $\mathbf{1}$ in H , so kann dieser Anteil durch Abspalten des Phasenfaktors

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t a_0(\tau) d\tau\right)$$

von $|\Psi(t)\rangle$ oder $U(t, t_0)$ weggebracht werden. Wir können uns daher von Anfang an auf die Form

$$H = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}, \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}^*$$

beschränken. Ist a_0 zeitunabhängig, so bedeutet das, daß wir die Energie von a_0 an zählen. Als weitere Vereinfachung wählen wir die Anfangszeit t_0 als Nullpunkt der Zeitzählung ($t_0 = 0$) und schreiben für $U(t, t_0) = U(t, 0) =: U(t)$. Ferner ziehen wir aus H einen Faktor \hbar heraus:

$$H =: \hbar \mathcal{H} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{a} = \hbar \mathbf{w} \quad , \quad \mathcal{H} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w} \quad .$$

\mathcal{H} bzw. \mathbf{w} hat die Dimension einer Frequenz. Die zu lösenden Gleichungen sind also

$$i \frac{d}{dt} U(t) = \mathcal{H} \cdot U(t) \quad , \quad U^\dagger(t) U(t) = U(0) = \mathbf{1} \quad .$$

Wir betrachten zunächst einen **zeitunabhängigen** Hamiltonoperator, also einen konstanten Vektor \mathbf{w} . Diagonalisiert man \mathcal{H} mit einem der in den Übungsaufgaben 6–8 betrachteten Verfahren, so findet man als Eigenwerte

$$\epsilon_{1,2} = \pm w = \pm \sqrt{w_1^2 + w_2^2 + w_3^2} \quad .$$

Das System hat also zwei stationäre Zustände

$$|\Psi_{j,stat}(t)\rangle = |\epsilon_j\rangle \exp(-i\epsilon_j \cdot t) \quad j = 1, 2 \quad .$$

Die zugehörigen Energiewerte $E_j = \hbar \epsilon_j$ liegen wegen $w > w_3$ weiter auseinander als für das ungekoppelte System. Durch die Kopplung wird also ihr Abstand vergrößert; selbst wenn die Energiewerte des ungekoppelten Systems gleich sind ($w_3 = 0$), tritt durch die Kopplung eine Aufspaltung auf. Die Zustände $|\epsilon_j\rangle$ sind Linearkombinationen von $|1\rangle, |2\rangle$, deren Koeffizienten aus der Matrix abgelesen werden können, die \mathcal{H} diagonalisiert. Das Zeitverhalten des Systems ist aus der Matrix von U in der Ausgangsdarstellung abzulesen, die mit Hilfe der Paulialgebra leicht auszurechnen ist. Mit dem Einheitsvektor $\mathbf{n} = \mathbf{w}/w$ erhalten wir

$$U(t) = \exp(-it\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}) = \exp(-itw\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{1} \cos wt - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin wt \quad .$$

Damit kann man die Amplituden

$$\begin{pmatrix} \langle 2 | \Psi(t) \rangle \\ \langle 1 | \Psi(t) \rangle \end{pmatrix} = U(t) \cdot \begin{pmatrix} \langle 2 | \Psi(0) \rangle \\ \langle 1 | \Psi(0) \rangle \end{pmatrix}$$

und die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten berechnen. Befindet sich das System anfangs im unteren Zustand des ungekoppelten Systems $|\Psi(0)\rangle = |1\rangle$, so erhalten wir

$$|\langle 2|\Psi(t)\rangle|^2 = 1 - |\langle 1|\Psi(t)\rangle|^2 = \frac{w_1^2 + w_2^2}{w^2} (\sin wt)^2 .$$

Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang in den anderen Zustand schwankt daher im Lauf der Zeit zwischen Null und einem Maximalwert, der von der Kopplung abhängt. Die Zeitskala für diese Schwankung ist durch die Frequenz w bestimmt, d.h. durch den (halben) Energie**unterschied** der beiden stationären Zustände. Es gibt viele Anwendungen, in denen diese “Zustandsoszillation” eine Rolle spielt.

Für **zeitabhängiges** H ist die Bestimmung der Zeitentwicklung schwierig. Es gibt Analogien zur klassischen Bewegung eines starren Körpers, die aber die praktische Lösung der Bewegungsgleichungen nicht wesentlich vereinfachen. Von besonderem praktischen Interesse sind Hamiltonoperatoren mit periodischer Zeitabhängigkeit, vor allem wegen der dabei auftretenden Resonanzphänomene.

Übungen

- 15) Zwei in ihren physikalischen Eigenschaften verschiedene Atome, bei denen jedoch der erste Anregungszustand zufällig nahezu gleich hoch liegt, sollen miteinander in Wechselwirkung treten. Die Stärke der Wechselwirkung soll mit der Differenz der beiden ersten Anregungsenergien vergleichbar oder größer als diese sein. Das Zeitverhalten des Systems ist in Abhängigkeit von der Stärke der Wechselwirkung zu diskutieren.
- 16) Ein Zweizustandssystem mit zeitunabhängigem Hamiltonoperator soll in Zustände zerfallen, die nicht zum System gehören, sodaß die Norm $N = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$ nicht konstant ist, sondern abnimmt ($dN/dt < 0$).
- Zeige, daß H nicht selbstadjungiert sein kann.
 - Untersuche den Ansatz

$$H = \hbar \left(M - \frac{i}{2} \Gamma \right) \text{ mit } M = M^\dagger, \Gamma = \Gamma^\dagger .$$

Welche Eigenschaft muß Γ haben, damit die Norm abnimmt?

- M und Γ sollen nur Anteile proportional $\mathbf{1}$ und σ_1 enthalten. Bestimme die Zeitentwicklung.
- Am Anfang befinde sich das System im Zustand $|2\rangle$. Bestimme die Wahrscheinlichkeit dafür, es zur Zeit t im Zustand $|1\rangle$ anzutreffen (und zwar in Termen der Eigenwerte).
- Untersuche das Resultat für den Fall, daß ein Eigenwert von Γ groß gegen den anderen ist.

Dieses Beispiel ist unter anderem auf den Zerfall neutraler K -Mesonen anzuwenden. Durch Beobachtung der Zustandsoszillation konnte der extrem kleine Massenunterschied der Teilchen genau gemessen werden (Masse $mc^2 = 498$ MeV, Unterschied $3 \cdot 10^{-6}$ eV).

- 17) Eine Drehung $U(\gamma, \beta, \alpha)$ um zeitabhängige Eulersche Winkel $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $\gamma(t)$ soll als Zeitentwicklung $U(t)$ interpretiert werden. Bestimme den zugehörigen Hamiltonoperator in Termen von Paulimatrizen. Welche Analogie besteht zur klassischen Drehbewegung eines starren Körpers?

18) Ein Zweizustandssystem soll durch den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(t)$$

beschrieben werden. Betrachte einen Operator $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}(t)$. Welche Bewegungsgleichung muß $\mathbf{S}(t)$ erfüllen, damit $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}$ erhalten bleibt? Welche Analogie besteht zur klassischen Drehbewegung eines starren Körpers?

Beispiele für magnetische Resonanz.

In den folgenden Beispielen ist ein Zweizustandssystem zu untersuchen, das einer in der Zeit periodischen Störung unterliegt

$$H = \frac{\hbar}{2} (\omega_0 \sigma_3 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}(t)), \quad \mathbf{b}\left(t + \frac{2\pi}{\omega}\right) = \mathbf{b}(t).$$

ω_0 und ω sind dabei gegebene, feste Frequenzen. Das System soll sich anfangs ($t = 0$) im Zustand $|1\rangle$ mit $\sigma_3|1\rangle = -|1\rangle$ befinden. Gesucht ist die Zeitentwicklung $U(t)$ sowie die Übergangswahrscheinlichkeit

$$W_{21}(t) = |\langle 2|\psi(t)\rangle|^2, \quad \sigma_3|2\rangle = |2\rangle$$

für eine feste Zeit t in Abhängigkeit von ω und der Stärke von \mathbf{b} . Dabei ist besonders auf die Umgebung von $\omega = \omega_0$ zu achten, in der es zu einem Resonanzverhalten kommen kann.

19) $\mathbf{b} = \lambda\omega_0(0, 0, \cos \omega t)$ (exakt lösbar)

20) $\mathbf{b} = \lambda\omega_0(\cos \omega t, \sin \omega t, 0)$ (exakt lösbar)

Wann gibt es ein Resonanzverhalten? Welche Situation ergibt sich bei entgegengesetztem Umlauf von \mathbf{b} (d.h. für $\omega \rightarrow -\omega$)?

21) $\mathbf{b} = 2\lambda\omega_0(\cos \omega t, 0, 0)$ (praktisch relevant, aber schwierig)

Von Interesse ist die Verschiebung der Resonanzstelle gegenüber Beispiel 20 (sog. Bloch-Siegert-Verschiebung).

4. Der Formalismus der Quantentheorie

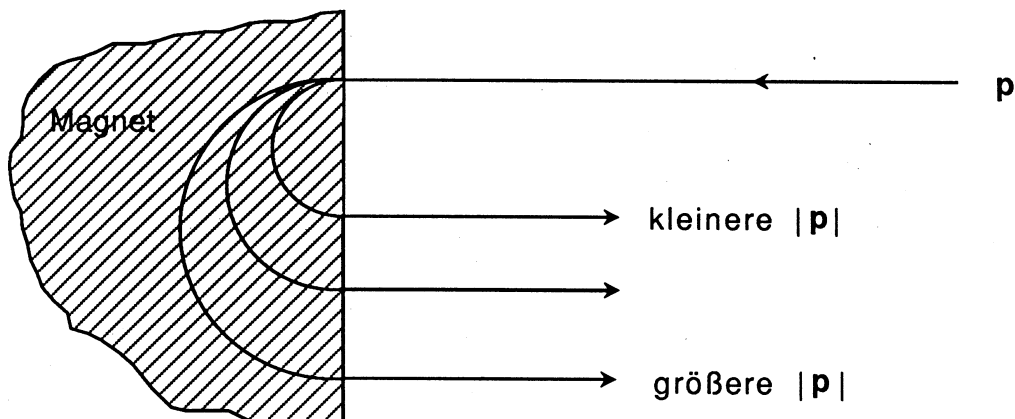
Die bisher erarbeiteten Methoden haben zwar einen Einblick in die Struktur der Quantentheorie ermöglicht, wir sind aber noch nicht in der Lage, die Dynamik konkreter physikalischer Systeme formulieren zu können. Dazu fehlt uns vor allem ein Kalkül, aus dem man algebraische Eigenschaften von Operatoren gewinnen kann, die zu physikalischen Größen gehören. Ohne Kenntnis der Operatoralgebra können weder Eigenwerte noch Eigenzustände (die als Basis geeignet sind) bestimmt werden. Bei dynamischen Untersuchungen muß erst einmal der Hamiltonoperator gefunden werden, dessen algebraische Eigenschaften die Form der Schrödingergleichung bestimmen. Um plausibel zu machen, wie die quantenmechanische Operatoralgebra aussieht, beginnen wir wieder mit der Analyse von einfachen Situationen und verallgemeinern die erhaltenen Ergebnisse.

4.1 Impuls- und Ortszustände eines Teilchens

Als Objekt, dessen Zustände wir untersuchen, betrachten wir nun ein bestimmtes freies Teilchen (z.B. ein Elektron oder ein Neutron). Im Rahmen der klassischen Mechanik könnte ein solches Teilchen durch Angabe seines Impulsvektors \mathbf{p} und seines Ortsvektors \mathbf{x} beschrieben werden. Wir untersuchen nun, in welchem Ausmaß wir diese Variablen für den quantenmechanischen Zustand eines Teilchens heranziehen können. Dazu versuchen wir, eine entsprechende Basis im Zustandsraum zu konstruieren. Wir beginnen mit Impulszuständen

$$|\mathbf{p}\rangle \equiv |p_1, p_2, p_3\rangle .$$

Um die Möglichkeit einer solchen Beschreibung zu sichern, muß man einen Analysator angeben, mit dem man einen aus identischen Teilchen aufgebauten Strahl nach deren Impulsen analysieren kann. Für geladene Teilchen kann dazu ein homogenes Magnetfeld verwendet werden, in dem die Teilchen je nach dem Betrag ihres Impulses verschieden stark gekrümmte Kreisbögen beschreiben, vgl. die folgende Abbildung. Das Magnetfeld ist dabei senkrecht zur Zeichenebene gerichtet. Die Analyse bezieht sich auf eine Komponente von \mathbf{p} .



Ein Projektor könnte daraus durch Blockieren unerwünschter Kanäle entstehen. Da der Impuls eines Teilchens kontinuierlich verändert werden kann (auch in der Quantentheorie!), müßte man bei einem Projektor eine unendlich schmale Öffnung unblockiert lassen. In der Praxis kann man daher nur einen Projektor auf ein endlich breites Band von Impulsen herstellen. Die erzielbare Genauigkeit ist jedoch beträchtlich, vor allem dann, wenn man technisch anspruchsvollere Anordnungen benützt. Moderne Beschleuniger sind z.B. so konstruiert, daß sie Teilchenstrahlen mit definiertem Impuls liefern, wobei die Abweichung vom Sollwert möglichst klein gehalten wird. Sie wirken daher als "gute" Projektoren. Auch bei der Auswertung von Experimenten der Kern- und Teilchenphysik analysiert man nach Impulsen. Das Sortieren in einem Magnetfeld wird dabei benützt, stellt jedoch nur eines aus einem großen Angebot von verfügbaren Verfahren dar. Auch für neutrale Teilchen (die in einem Magnetfeld nicht abgelenkt werden) existieren Verfahren zur Impulsanalyse, z.B. über die Messung der bis zum Erreichen eines Detektors benötigten Flugzeit. Insgesamt sind die Impulszustände von Teilchen ein besonders viel verwendetes und praktisch brauchbares Konzept, das die Grundlage eines großen Anwendungsbereiches bildet. Die Annahme der entsprechenden Orthogonalitätseigenschaft

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = 0 \quad \mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$$

ist daher nicht besonders schwerwiegend. Daß die Impulszustände ein vollständiges System bilden, erscheint vom Standpunkt einer direkten Überprüfung mit einem konstruierbaren Analysator problematisch (er müßte alle Beträge und Richtungen von \mathbf{p} erfassen). Für die Konsistenz des Formalismus erscheint die Annahme aber erforderlich.

Für die Realisierung von Ortszuständen

$$|\mathbf{x}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$$

ist die Konstruktion von Analysatoren bzw. Projektoren wesentlich problematischer. Zwar kann man jeden Apparat, der einen Teilchenstrahl auf eine Stelle konzentriert (z.B. eine Blende) als eine Art "Projektor" auf den entsprechenden Ortszustand auffassen. Relativ zu den geringen Abmessungen von Teilchen erscheint die damit erreichbare Genauigkeit für die Definition eines Ortes, an dem sich das Teilchen befindet, sehr bescheiden. Ein Ortsanalysator ist überhaupt nicht konstruierbar. Er müßte Ausgangskanäle haben, die den ganzen Raum überdecken (jeder Ort ist prinzipiell möglich). Die Rechtfertigung für die Einführung von Ortszuständen besteht daher hauptsächlich in der Konsistenz der Beschreibung, die man mit ihnen erhält. Hat man sich für ihre Verwendung entschlossen, so ist die Orthogonalität

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = 0 \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$$

plausibel: Ist das Teilchen an der Stelle \mathbf{x} , so kann es nicht gleichzeitig an einer anderen Stelle \mathbf{y} sein. Die Vollständigkeit bedeutet, daß das Teilchen **irgendwo** im Raum sein muß. Auf die Normierung ($\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle$ bzw. $\langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle$) werden wir später zurückkommen.

Sollen die Impuls- bzw. Ortszustände sinnvolle Zustände in einer quantenmechanischen Beschreibung sein, so muß ihr Skalarprodukt $\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle$ die charakteristischen Züge einer Wahrscheinlichkeitsamplitude haben. Insbesondere sollte es als Folge der quantenmechanischen Zustandsüberlagerung Interferenzphänomene geben (vgl. Abschnitt 2.5). Im vorliegenden Fall können diese Phänomene in Termen eines Wellenbildes verstanden werden, wenn man einem freien Teilchen einen Wellenvorgang zuordnet. Eine solche Zuordnung wurde von L. de Broglie 1923 im Zusammenhang mit dem Comptoneffekt vorgeschlagen. Die Zuordnung besteht darin, daß man die Beziehung zwischen Energie und Wellenlänge λ eines Photons

$$cp = E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

als Beziehung zwischen Impuls p und Wellenlänge λ liest

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

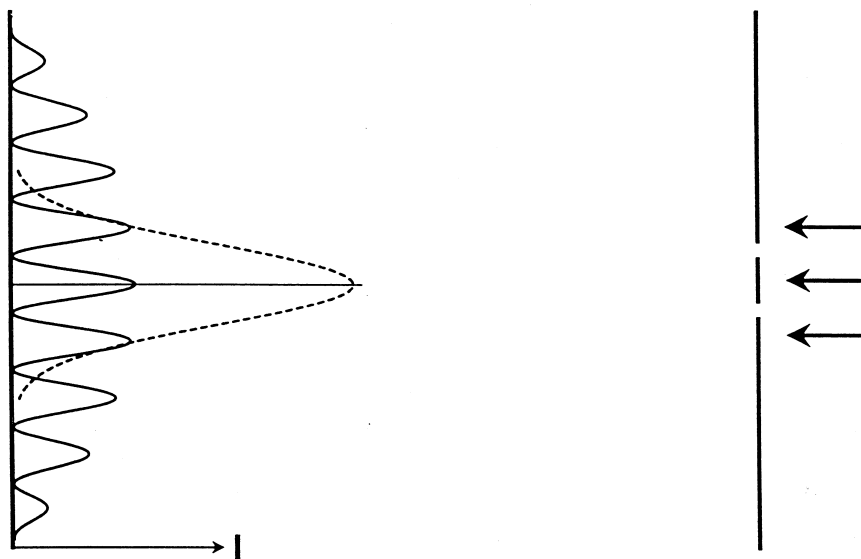
und in dieser Form auf andere Teilchen überträgt. Damit erhält man für jeden Wert des Impulses eines Teilchens die Wellenlänge der dem Teilchen zugeordneten De-Broglie-Welle. Natürlich weiß man damit noch nicht, was der Wellenvorgang physikalisch bedeutet. De Broglie stellte sich die Welle als eine Art Führungswelle (*onde pilote*) vor, der das Teilchen folgt. Wir werden die Beziehung benutzen, ohne eine solche Interpretation vorzunehmen. Anstelle der Wellenlänge benutzen wir die Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ bzw. den zugehörigen Wellenvektor \mathbf{k} und schreiben die Beziehung in der Form

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} .$$

In den Impulszuständen verwenden wir als Argument stets \mathbf{k} statt \mathbf{p}

$$|\mathbf{p}\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle .$$

Wenn die Zuordnung von de Broglie richtig ist, müssen aus der Optik bekannte Interferenzexperimente die gleichen Interferenzbilder ergeben, wenn sie mit Teilchen durchgeführt werden. Wir betrachten als besonders exemplarischen Fall das Doppelspaltexperiment von Th. Young (1773 – 1829).



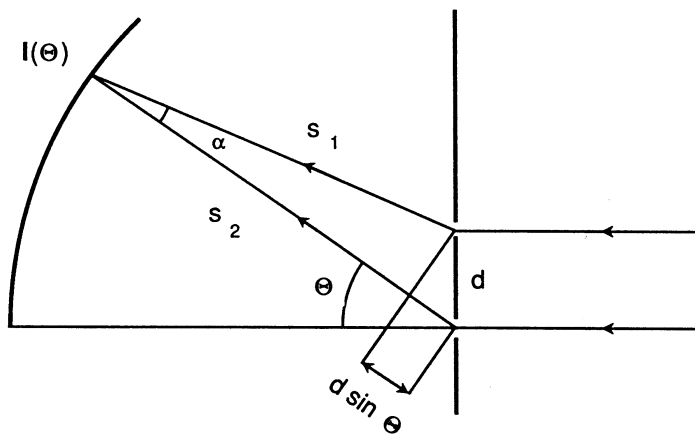
Dabei fällt Licht auf einen Schirm, der bis auf zwei enge Schlitze undurchlässig ist. Die Schlitze haben voneinander nur geringen Abstand. Das durchgelassene Licht fällt auf einen zweiten Schirm, der vom ersten einen relativ großen Abstand hat. Beobachtet wird die Intensität I auf

dem zweiten Schirm. Deckt man einen der beiden Schlitze zu, so erhält man eine Intensitätsverteilung, die dem Bild des offenen Schlitzes entspricht (vgl. die unterbrochene Kurve in der Abbildung). Infolge von Beugungsphänomenen ist das Bild verbreitert und es kann kleine Nebenmaxima geben. Deckt man stattdessen den anderen Schlitz zu, so erhält man das gleiche Bild: der Abstand der Schlitze spielt wegen der großen Entfernung des zweiten Schirms keine Rolle. Öffnet man jedoch beide Schlitze, so erhält man das bekannte Interferenzmuster (ausgezogene Kurve). Für Teilchenstrahlen sollte das gleiche Verhalten der Intensität resultieren, wenn die Anordnung die geeigneten Dimensionen aufweist. Wir werden den entsprechenden Befund zur Bestimmung von $\langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle$ verwenden.

Bevor wir das tun, soll aber kurz auf die experimentelle Situation hinsichtlich des Teilchen-Welle-Dualismus eingegangen werden. Die Befunde des Doppelspaltexperiments sind besonders häufig für Interpretationsfragen der Quantentheorie herangezogen worden, obwohl das Experiment lange Zeit ein Gedankenexperiment war. Den ersten experimentellen Nachweis für die Richtigkeit der de Broglie-Hypothese bildete die Streuung von Elektronenstrahlen an Kristallen (C.J. Davisson, L.H. Germer 1927), bei der man die gleichen Beugungsbilder wie mit Röntgenstrahlen entsprechender Wellenlänge erhielt. Später wurden entsprechende Versuche mit Atomstrahlen (Na, He) durchgeführt (O. Stern, O.R. Frisch, I. Estermann 1929 – 33). Interferenzstreifen für Elektronenstrahlen wurden erst viel später mit Hilfe der Elektronenmikroskopie realisiert (G. Möllenstedt, H. Düker 1954 – 56). Die verwendete Apparatur entspricht aber nicht dem Doppelspaltexperiment, sondern dem elektronenoptischen Analogon zum Fresnelschen Biprisma. Der Fortschritt in der Elektronenmikroskopie hat dazu geführt, daß Interferenzstreifen (und damit Wellenphänomene) bei Elektronenstrahlen für eine Reihe von Versuchsanordnungen sichtbar gemacht werden können, u.a. auch für das Doppelspaltexperiment. Vgl. dazu z.B. den Aufsatz “Electron interferometry” von G. Möllenstedt und H. Lichte in Neutron Interferometry, U. Bonse und H. Rauch (ed.), Oxford Clarendon Press 1979. Solche Experimente geben allerdings über die quantitativen Verhältnisse nur groben Aufschluß. Ein auch quantitativ sehr genaues Doppelspaltexperiment wurde erst in der letzten Zeit durchgeführt, und zwar für Neutronen. Vgl. dazu A. Zeilinger, R. Gähler, C.G. Shull, W. Treimer, W. Mampe, Rev.Mod.Phys. **60**, 1067 (1988). Die Übereinstimmung der gemessenen Intensitäten mit den aus der

Quantentheorie berechneten ist eindrucksvoll.

Zur Analyse des Doppelspaltexperiments in Termen von Wellen betrachten wir die Versuchsanordnung genauer (vgl. Abbildung).



Der einfallende Strahl mit der Wellenzahl k trifft auf den Schirm mit den beiden engen Schlitzen, die voreinander den Abstand d haben. Die beiden durchtretenden Sekundärstrahlen legen die Strecken s_1 bzw. s_2 zurück und treffen auf den zweiten Schirm. Dort wird die resultierende Intensität $I(\theta)$ in Abhängigkeit vom Ablenkwinkel θ registriert (z.B. mit einem verschiebbaren Zähler). Wir nehmen an, daß die beiden Schirme so weit voneinander entfernt sind, daß der Zähler die beiden Schlitze unter annähernd gleichem Winkel θ sieht (der Winkel α soll also sehr klein sein). Der Unterschied der Weglängen beträgt dann $s_2 - s_1 = d \sin \theta$. Der Phasenunterschied der zu den Sekundärstrahlen gehörigen Wellen entsteht durch Multiplikation mit der Wellenzahl, d.h. $\Phi_2 - \Phi_1 = kd \sin \theta$. Die Winkelabhängigkeit der Intensität ist

$$I(\theta) \sim \cos^2 \left(\frac{kd \sin \theta}{2} \right) .$$

Intensitätsmaxima (konstruktive Interferenz) treten daher auf, wenn der Wegunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist (für die analoge Situation beim Biprisma vgl. ED Übung 3.19).

Nun fassen wir diesen Befund als **experimentelles** Resultat auf und analysieren das Experiment in Termen von Basiszuständen. Wir fassen die beiden Schlitze als Projektoren auf die entsprechenden Ortszustände $|\mathbf{x}_{(1)}\rangle, |\mathbf{x}_{(2)}\rangle$ auf. Der einlaufende Strahl entspricht dem Impuls $\mathbf{p} =$

$\hbar\mathbf{k}$, also dem Zustand $|\mathbf{k}\rangle$. Der Zähler sieht den Zustand $|\mathbf{k}'\rangle$, wobei $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$ ist: die Wellenlänge ändert sich nicht. Nach unseren Regeln von Abschnitt 2.5 (S. 40) erhalten wir für den Fall, daß nur Schlitz 1 geöffnet ist

$$I_1 \sim |\langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}_{(1)} \rangle \langle \mathbf{x}_{(1)} | \mathbf{k} \rangle|^2$$

(analog für $1 \rightarrow 2$). Sind beide Schlitze offen, so ist

$$\begin{aligned} I_{12} &\sim |\langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}_{(1)} \rangle \langle \mathbf{x}_{(1)} | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}_{(2)} \rangle \langle \mathbf{x}_{(2)} | \mathbf{k} \rangle|^2 = \\ &= \cos^2 \left(\frac{kd \sin \theta}{2} \right) = \cos^2 \left(\frac{1}{2} (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{x}_{(2)} - \mathbf{x}_{(1)}) \right) . \end{aligned}$$

Die Amplituden für die Teilwege (die Summanden in I_{12}) müssen komplex sein, damit die Interferenz möglich ist. Wenn der Zähler die Schlitze unter demselben Winkel sieht (also für sehr kleines α), ist $I_1 = I_2$. Die Amplituden können sich daher nur in der Phase unterscheiden. Die ganze Abhängigkeit von $(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{x})$ muß daher in einem Phasenfaktor enthalten sein

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = A^2 \exp(i\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{x})) .$$

Diese Amplitude muß ein Produkt von zwei Faktoren sein, von denen der eine nur von $(\mathbf{k}', \mathbf{x})$, der andere nur von (\mathbf{k}, \mathbf{x}) abhängt. Daher muß der Exponent eine Summe von zwei solchen Termen sein. Setzen wir

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{x}) = a(\mathbf{k}, \mathbf{x}) - a(\mathbf{k}', \mathbf{x})$$

so erfüllen wir außerdem die für Projektionsamplituden notwendige Eigenschaft $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle^*$. Durch Einsetzen in die Formel für I_{12} erhalten wir die Gleichung

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{x}_{(1)}) - a(\mathbf{k}', \mathbf{x}_{(1)}) - a(\mathbf{k}, \mathbf{x}_{(2)}) + a(\mathbf{k}', \mathbf{x}_{(2)}) = \pm (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{x}_{(2)} - \mathbf{x}_{(1)}) .$$

Diese Beziehung muß für beliebige Impulse gelten. Das ist nur mit

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \pm \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + C$$

erreichbar. Wir wählen das obere Vorzeichen und setzen $C = 0$ (das ist Konvention). Damit wird

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) .$$

Mit unseren zunächst eher intuitiven Vorstellungen über Impuls- und Ortszustände ist also eine konsistente Interpretation des Doppelspaltversuchs möglich, denn wir haben als Skalarprodukt eine Größe erhalten, die in den Formalismus paßt. Das wollen wir bereits als ausreichende Rechtfertigung für die Verwendung dieser Zustände ansehen und untersuchen, was sich daraus ergibt.

Ein beliebiger Zustand $|\psi\rangle$ eines Teilchens kann durch seine Projektionsamplituden auf diese Zustände dargestellt werden. Wir nennen die komplexen Amplituden

$\langle \mathbf{x}|\psi\rangle$ die Ortsdarstellung

$\langle \mathbf{k}|\psi\rangle$ die Impulsdarstellung

des Zustands $|\psi\rangle$. Da \mathbf{x} bzw. \mathbf{k} kontinuierliche Variable sind, hat das Quadrat der Amplituden die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte (vgl. die entsprechenden Begriffsbildungen Massendichte M 3.1 bzw. Ladungsdichte ED 1.1). Dementsprechend interpretieren wir

$$|\langle \mathbf{x}|\psi\rangle|^2 d^3x$$

als Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ in einem Volumelement d^3x um einen Punkt \mathbf{x} anzutreffen. Analog ist

$$|\langle \mathbf{k}|\psi\rangle|^2 d^3k$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ einen Impuls hat, der in einem Volumelement $d^3p = \hbar^3 d^3k$ um $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ liegt. Die Vollständigkeit der Basiszustände schreiben wir in der Form

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{x}\rangle d^3x \langle \mathbf{x}| = \int |\mathbf{k}\rangle d^3k \langle \mathbf{k}| .$$

Damit können wir die Normierung der Basiszustände untersuchen

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle &= \int \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle d^3k \langle \mathbf{k}|\mathbf{x}'\rangle = |A|^2 \int \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')) d^3k \\ &= (2\pi)^3 |A|^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \end{aligned}$$

Wählen wir für die noch offene Konstante A den Wert $A = (2\pi)^{-3/2}$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ \langle \mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) . \end{aligned}$$

Impuls- und Ortsdarstellung sind dann in symmetrischer Weise durch die Fouriertransformation verknüpft

$$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \langle \mathbf{k} | \psi \rangle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) d^3 k$$

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) d^3 x .$$

Daß die Impuls- bzw. Ortszustände für sich vollständig sind, bedeutet einen charakteristischen Unterschied zur klassischen Beschreibung von Teilchen. In der klassischen Mechanik sind Impuls und Ort eines Teilchens (z.B. im Rahmen der Hamiltonschen Fassung der Theorie, vgl. dazu M 4.6) unabhängige Variable. In der Quantentheorie sind Impuls- und Ortszustände nicht unabhängig. Sie geben verschiedene Darstellungen desselben Sachverhalts (Zustand eines Teilchens), da beide Basen für sich vollständig sind. Der Zusammenhang wird durch die Transformationsfunktion $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$ hergestellt. Kennt man z.B. die Resultate aller Impulsmessungen an einem Kollektiv identisch präparierter Teilchen, so kann man die Resultate von Ortsmessungen ausrechnen und umgekehrt. Wir haben die Transformationsfunktion durch Analyse eines Experiments erhalten; die im Experiment beobachtete Interferenz hat zu $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$ geführt; daß Impuls und Ort keine unabhängigen Bestimmungsstücke sind, ist daher eine Konsequenz von Experimenten (mit Feynman: Yes! That's the way electrons go!). Mathematisch erfordert das auch hier die Verwendung komplexer Amplituden. Daß die Interferenz der Zustände hier im Sinn eines Wellenphänomens interpretiert werden kann, ist durch das betrachtete System (Teilchen) und die verwendete Beschreibung (Basis $|\mathbf{x}\rangle$) bedingt und liegt nicht an der Struktur der Quantentheorie.

Die Normierung der Basiszustände auf die δ -Funktion mag etwas ungewöhnlich erscheinen. Sie impliziert aber nicht, daß alle Zustände so normiert werden müssen. Das sieht man aus

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \langle \psi | \mathbf{x} \rangle d^3 x \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int |\langle \mathbf{x} | \psi \rangle|^2 d^3 x .$$

Die Normierung von $|\psi\rangle$ bleibt daher noch weitgehend willkürlich. Wenn das Integral konvergiert, heißt der Zustand $|\psi\rangle$ normierbar. Wählen wir die Normierung dann gleich 1, so ist die oben gegebene Wahrscheinlichkeitsinterpretation korrekt. Ist $|\psi\rangle$ nicht normierbar, so muß man die

Normierung so wählen, daß **relative** Wahrscheinlichkeiten korrekt wiedergegeben werden.

Der Unterschied zur klassischen Physik wird besonders deutlich, wenn man eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation für $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$ versucht. Der entsprechende Ausdruck $|\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle|^2$ hängt überhaupt nicht von \mathbf{x} ab. Das bedeutet, daß die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit festem Impuls $\hbar \mathbf{k}$ an einem Ort \mathbf{x} anzutreffen, für alle Orte gleich groß ist: der Ort ist also völlig unbestimmt. Das ist ein Extremfall der Unschärferelation, auf die wir noch zurückkommen werden. Für die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten wir

$$\int |\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle|^2 d^3 x = \infty .$$

Die Impulszustände $|\mathbf{k}\rangle$ sind daher nicht normierbar. Sie stellen eine Idealisierung dar. In Wirklichkeit kann kein Teilchen in einem Zustand sein, der so beschaffen ist, daß es überall in der Welt mit gleicher Wahrscheinlichkeit angetroffen wird: die Wahrscheinlichkeit, es in einem endlichen Bereich anzutreffen, wäre dann Null. Trotzdem sind die betrachteten Basiszustände nützlich. Sie stellen ideale Grenzfälle dar, mit denen realistische Zustände analysiert werden können. Durch Überlagerung kann man aus ihnen realistische Zustände aufbauen.

4.2 Wellenpakete und Unschärferelation

Nun versuchen wir, durch geeignete Überlagerung von Impulsen zu Zuständen zu kommen, die normierbar sind. Die zugehörigen Ortsdarstellungen können dann als Wellenpakete interpretiert werden (für diese Begriffsbildung vgl. ED Anhang A6; es ist nützlich, diesen Abschnitt kurz zu rekapitulieren). Wir betrachten also den “Paketzustand”

$$|\psi_f\rangle = \int |\mathbf{k}\rangle d^3 k f(\mathbf{k})$$

mit einer bestimmten Funktion f , die zu einem normierbaren Zustand führt und untersuchen die Eigenschaften der Orts- und Impulsdarstellung für “vernünftige” Funktionen f .

Die Norm des Zustandes ist

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | \psi_f \rangle &= \int \int d^3 k' d^3 k f^*(\mathbf{k}') f(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle \\ &= \int d^3 k |f(\mathbf{k})|^2 . \end{aligned}$$

Für eine Überlagerung einer endlichen Anzahl von Zuständen mit festen Impulsen $\mathbf{k}_{(i)}$

$$|\psi_f\rangle = \sum_{i=1}^n |\mathbf{k}_{(i)}\rangle C_{(i)} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{(i)})$$

ist der resultierende Zustand ebensowenig normierbar wie ein Impulszustand. Wir betrachten daher ein Kontinuum. Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst Funktionen der Form

$$f(\mathbf{k}) = f_{(1)}(k_x) f_{(2)}(k_y) f_{(3)}(k_z) .$$

Die Ortsdarstellung des resultierenden Zustands ist dann ein Produkt

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \psi_f \rangle &= \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle d^3 k f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) d^3 k \\ &= \langle x | \psi_1 \rangle \langle y | \psi_2 \rangle \langle z | \psi_3 \rangle \end{aligned}$$

mit

$$\langle x | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ik_x x) f_{(1)}(k_x) dk_x$$

(analog für die anderen beiden Faktoren). Wir können uns daher auf die Untersuchung eines der Faktoren und damit auf ein Fourierintegral in einer Dimension beschränken.

Statt das Fourierintegral für eine größere Anzahl von Funktionen f auszurechnen, betrachten wir ein typisches Beispiel, für das man das Resultat in einer Tabelle von Fourierintegralen findet (z.B. in A. Erdélyi et al., Tables of Integral Transforms Bd.1, Mac Graw Hill 1954). Für eine Gaußfunktion

$$f_1(k_x) = \frac{1}{(\pi a)^{1/4}} \exp\left(-\frac{k_x^2}{2a}\right)$$

ist

$$\langle x | \psi_1 \rangle = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{ax^2}{2}\right) .$$

Der resultierende Zustand ist offenkundig normierbar. Der Vorfaktor wurde so gewählt, daß

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_1 | x \rangle dx \langle x | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_1 | k_x \rangle dk_x \langle k_x | \psi_1 \rangle = 1$$

ist. Der Parameter a bestimmt, auf welchen Bereich die Funktion f_1 bzw. $\langle x|\psi_1\rangle$ konzentriert ist. Je kleiner a gewählt wird, desto enger ist der Bereich von k_x -Werten, in dem f_1 wesentlich von Null verschieden ist: Die Halbwertsbreite von f_1 ist proportional zu \sqrt{a} . Die entsprechende Funktion $\langle x|\psi_1\rangle$ zeigt das entgegengesetzte Verhalten. Sie wird mit abnehmendem a immer breiter, ihre Halbwertsbreite ist proportional zu $1/\sqrt{a}$. Mit Hilfe einer Tabelle von Fourierintegralen kann man sich davon überzeugen, daß dieser Zusammenhang allgemeinen Charakter hat, d.h. daß die Breite im Ortsraum reziprok zu der im Impulsraum ist (es handelt sich um eine mathematische Eigenschaft von Fourierintegralen). Offenbar überträgt sich diese Eigenschaft auch auf die übrigen Komponenten.

Die Quadrate der Amplituden in der Impuls- bzw. Ortsdarstellung liefern die Verteilung möglicher Meßwerte des Impulses bzw. Orts, die man für Teilchen im Zustand $|\psi_f\rangle$ finden kann, und zwar ist $|\langle \mathbf{k}|\psi_f\rangle|^2 d^3k = |f(\mathbf{k})|^2 d^3k$ die Verteilung von Meßwerten für den Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $|\langle \mathbf{x}|\psi_f\rangle|^2 d^3x$ ist die Verteilung von Meßwerten für den Ort \mathbf{x} . Wie stets in der Quantentheorie impliziert das viele Messungen an identisch präparierten Teilchen (Teilchenstrahl nach Passieren eines ψ_f -Projektors: so ist der Zustandsbegriff definiert). Die Breite einer solchen Verteilung ist ein Maß für die Unschärfe bei der betreffenden Einzelmessung, denn wir können bei einer solchen Messung jeden Wert aus dem durch diese Breite bestimmten Bereich erhalten. Nennen wir die entsprechenden Unschärfen Δk_x bzw. Δx , so bedeutet der Zusammenhang offenbar $\Delta k_x \cdot \Delta x \sim 1$ (analog für die anderen Komponenten). Für den Impuls erhalten wir daher die Heisenbergsche(n) Unschärfere-lation(en):

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \sim \hbar .$$

Der Ortszustand $|\mathbf{x}\rangle$ ist der Grenzfall eines Paketzustands $|\psi_f\rangle$ mit der Ortsunschärfe (Breite der Ortsverteilung) Null. Die Breite der zugehörigen Impulsverteilung ist unendlich. Analog ist für den Impulszustand $|\mathbf{k}\rangle$ die Ortsunschärfe unendlich. Jeder zwischen diesen Extremen liegende (realistische) Fall fügt sich nahtlos ein.

Betrachten wir zum Abschluß die Zeitentwicklung eines Paketzustands für ein freies Teilchen. Die Energie ist in diesem Fall die kinetische Energie

$$E_k = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 .$$

Fassen wir die Impulszustände als stationäre Zustände freier Teilchen auf, so sind die zugehörigen zeitabhängigen Zustände

$$|\mathbf{k}, t\rangle = |\mathbf{k}\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right) = |\mathbf{k}\rangle \exp\left(-\frac{i\hbar}{2m} \mathbf{k}^2 t\right).$$

Diese Zuordnung ist konsistent mit der im vorhergehenden Abschnitt vorgenommenen Interpretation von Interferenzbildern. Betrachten wir nur Zustände mit gleicher kinetischer Energie, so erhalten wir (wie im Experiment) zeitunabhängige Figuren.

Paketzustände bestehen hingegen aus Impulszuständen mit verschiedenen Impulsen und daher auch verschiedenen kinetischen Energien. Die Zeitabhängigkeit ist für sie kein Phasenfaktor. Sie kann aber bestimmt werden, indem man den zeitabhängigen Paketzustand aus $|\mathbf{k}, t\rangle$ aufbaut

$$|\psi_f(t)\rangle = \int |\mathbf{k}\rangle f(\mathbf{k}) \exp\left(-\frac{i\hbar}{2m} \mathbf{k}^2 t\right) d^3k.$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die Norm dieses Zustands nicht von der Zeit abhängt

$$\langle\psi_f(t)|\psi_f(t)\rangle = \int d^3k |f(\mathbf{k})|^2.$$

Auch die Impulsverteilung $|\langle\mathbf{k}|\psi_f(t)\rangle|^2$ ändert sich im Lauf der Zeit nicht. Die Ortsverteilung hängt hingegen von der Zeit ab. Um zu sehen, was passiert, betrachten wir das Produkt von drei gleichen Gaußfunktionen der oben betrachteten Form

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(\pi a)^{3/4}} \exp\left(-\frac{\mathbf{k}^2}{2a}\right).$$

Das entsprechende Fourierintegral in $\langle\mathbf{x}|\psi_f(t)\rangle$ braucht man nicht zu berechnen, wenn man beachtet, daß es aus dem oben angegebenen durch die Substitution

$$\frac{1}{a} \rightarrow \frac{1}{a} \left(1 + i\frac{t}{\tau}\right) \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\tau} = \frac{\hbar a}{2m}$$

hervorgeht. Damit erhält man

$$|\langle\mathbf{x}|\psi_f(t)\rangle|^2 = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{(1 + (t/\tau)^2)^{3/4}} \exp\left(-\frac{a\mathbf{x}^2}{1 + (t/\tau)^2}\right).$$

Mit wachsender Zeit nimmt der Ausdruck wegen des Nenners im Vorfaktor ab. Zugleich nimmt die Breite der Verteilung wegen des Nenners im Exponenten zu. Im Lauf der Zeit “zerfließt” daher das Wellenpaket. Da in der dafür charakteristischen Zeitskala τ die Konstante a im Nenner steht, erfolgt dieses “Breitfließen” umso rascher, je größer a ist, je schärfer also die Lokalisierung am Anfang war. Wie die Unschärferelation ist auch dieser Sachverhalt eine Fouriereigenschaft, die sehr allgemein gültig ist. Früher oder später bricht daher jede Analogie mit der klassischen Bahn des Teilchens zusammen. In vielen praktisch relevanten Fällen ist jedoch die Zeitkonstante τ so groß, daß die Abnahme der Lokalisierung keine große Rolle spielt (vgl. Übungen).

Die Analogie zum Verhalten eines elektromagnetischen Wellenpakets in einem dispersiven Medium (ED Anhang A6) ist sehr eng. Für die hier betrachteten “Teilchenwellen” führt die Energie dazu, daß bereits für ein freies Teilchen (im Vakuum) das Analogon von Dispersionsphänomenen auftritt.

Man soll aus dieser Analogie keine allzu weitreichenden Schlüsse für eine Interpretation der Quantentheorie ziehen. Die Analogie zu einem Wellenvorgang besteht nur für die Ortsdarstellung $\langle \mathbf{x} | \psi \rangle$ eines Teilchenzustands $|\psi\rangle$. **Derselbe** Zustand kann genauso gut durch die Impulsdarstellung $\langle \mathbf{k} | \psi \rangle$ beschrieben werden, in der man kaum von einem Wellenvorgang sprechen wird. Das Wesen der Quantentheorie besteht darin, daß ihre Aussagen unabhängig von der verwendeten Basis sind. Welche Basisvektoren man verwendet, ist eine Frage der Zweckmäßigkeit. Es muß lediglich gesichert werden, daß die benützte Basis eine vollständige Beschreibung des betrachteten Systems liefert. Für Zustände eines Teilchens ist das sowohl für $|\mathbf{x}\rangle$ als auch für $|\mathbf{k}\rangle$ der Fall. Wir werden daher je nach Bedarf die eine oder andere Basis benützen, und zwar auch für ein Teilchen, das nicht frei ist. Natürlich gibt es beliebig viele andere Möglichkeiten für Einteilchenbasiszustände.

Übungen

- 1) Mit Hilfe eines Magnetfeldes von 1 Kilogauß soll ein p_x -Projektor für Protonen mit dem Impuls $p_x = 43,5 \text{ MeV}/c$ konstruiert werden.
 - a) Welchen Durchmesser Δy müssen die Blenden haben, wenn die Toleranz 0,1% betragen darf?
 - b) Vergleiche die Impulsunschärfe Δp_y , die infolge der Unschärfere-lation (Beugung an der Blende) auftritt, mit der angegebenen Toleranz.
 - c) Nach welcher Strecke hat sich das entsprechende Wellenpaket in der y -Richtung auf das Doppelte verbreitert?
- 2) Vorgelegt sei ein eindimensionales Wellenpaket

$$\langle x | \psi_f(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)\right) \frac{dp}{\hbar}$$

mit einer beliebigen reellen Funktion $E(p)$.

Der "Formfaktor" $f(p)$ sei nur in der Umgebung eines Impulswertes p_0 wesentlich von Null verschieden (enges Frequenzband).

- a) Man spalte das Paket in eine ebene Welle und einen starr bewegten Amplitudenfaktor auf.
 - b) Welche physikalische Bedeutung hat (dE/dp) für $p = p_0$?
- 3) Betrachte den Ausdruck $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ in einem Würfel mit der Kantenlänge L . Die Exponentialfunktion soll dabei an der Stelle $x = 0$ denselben Wert haben wie für $x = L$, analog für y, z (sog. periodische Randbedingungen).
 Welche Werte für $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ sind möglich? Konstruiere mit diesen Werten ein vollständiges, orthogonales und normiertes System von Impulszuständen $|\mathbf{k}\rangle$, für die $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \sim \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ ist. Dabei sind $|\mathbf{x}\rangle$ die Ortszustände mit $\int |\mathbf{x}\rangle d^3x \langle \mathbf{x}| = \mathbf{1}$, $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$.
 Vergleiche die erhaltenen Formeln für $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$, $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle$ und die Fourierdarstellung von $\delta(\mathbf{x})$ mit den entsprechenden Formeln im Text.

4.3 Quantenmechanische Operatoren für ein Teilchen

In den vorhergehenden Kapiteln haben wir gesehen, daß physikalische Größen in der Quantentheorie durch Operatoren (d.h. nichtvertauschbare Größen) beschrieben werden. Die zugehörigen Apparate waren Meßapparate für die betreffenden physikalischen Größen. Das wichtigste bisher betrachtete Beispiel eines solchen Operators war der Energieoperator H , der gleichzeitig die zeitliche Entwicklung des betrachteten Systems bestimmt. Bisher wurde noch keine allgemeine Methode erarbeitet, mit der man die Matrixelemente physikalischer Operatoren (z.B. jene von H) berechnen kann. Die Matrixelemente wurden vielmehr stets in irgendeiner Form "erraten" (etwa durch halbklassische Betrachtungen) oder direkt dem Experiment entnommen. Dieser Mangel soll nun behoben werden. Dazu versuchen wir, zu Rechenregeln für die Operatoren zu kommen, aus denen wir lernen können, wie man sie konstruiert. Wir beschränken uns zunächst auf ein Teilchen (das nicht frei sein muß) und beginnen mit dem Impulsoperator \mathbf{P} sowie dem Ortsoperator \mathbf{X} . Zugehörige Apparate sind alle, mit denen man den Impuls bzw. Ort des Teilchens messen kann.

Die Impulszustände $|\mathbf{k}\rangle$ eines Teilchens hatten wir so konstruiert, daß sie Eigenzustände von \mathbf{P} sind; der Impuls eines Teilchens im Zustand $|\mathbf{k}\rangle$ war mit Sicherheit $\hbar\mathbf{k}$

$$\mathbf{P}|\mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}\rangle\hbar\mathbf{k}.$$

Die Gleichung gilt dabei komponentenweise

$$P_x|\mathbf{k}\rangle = P_x|k_x, k_y, k_z\rangle = |k_x, k_y, k_z\rangle\hbar k_x = |\mathbf{k}\rangle\hbar k_x$$

(analog für die anderen Komponenten). Multiplizieren wir die Gleichung von rechts mit $\langle\mathbf{k}|$ und integrieren, so erhalten wir mit der Vollständigkeit der Impulszustände

$$\int |\mathbf{k}\rangle d^3k \langle\mathbf{k}| = \mathbf{1}$$

die Impulsdarstellung von \mathbf{P}

$$\mathbf{P} = \int |\mathbf{k}\rangle d^3k \hbar\mathbf{k} \langle\mathbf{k}|.$$

Der Impulsoperator wird daher (wie zu erwarten war) in der Impulsdarstellung durch eine diagonale "Matrix" mit kontinuierlich unendlich

vielen “Matrizelementen” dargestellt. Multiplizieren wir diese Form von links mit $\langle \mathbf{x} |$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{P} &= \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \hbar \mathbf{k} d^3 k \langle \mathbf{k} | = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \hbar \mathbf{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \langle \mathbf{k} | = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\hbar}{i} \nabla(x) \int d^3 k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \langle \mathbf{k} | = \frac{\hbar}{i} \nabla(x) \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle d^3 k \langle \mathbf{k} | . \end{aligned}$$

Mit der Vollständigkeitsrelation der Impulszustände wird daraus

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla(x) \langle \mathbf{x} | .$$

Durch Multiplikation mit $|\mathbf{x}\rangle$ von links und Integration erhalten wir mit der Vollständigkeit der Orstzustände

$$\int |\mathbf{x}\rangle d^3 x \langle \mathbf{x} | = \mathbf{1}$$

die Ortsdarstellung von \mathbf{P}

$$\mathbf{P} = \int |\mathbf{x}\rangle d^3 x \frac{\hbar}{i} \nabla(x) \langle \mathbf{x} | .$$

Wegen der Ableitung ist \mathbf{P} in der Ortsdarstellung nicht diagonal. Schreibt man die Ableitung als Grenzwert eines Differentialquotienten, so gibt es Beiträge der Diagonale und der (infinitesimal) benachbarten Parallele zu ihr.

Die Orstzustände eines Teilchens hatten wir als Eigenzustände des Operators \mathbf{X} konstruiert

$$\mathbf{X}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle \mathbf{x} .$$

Mit der gleichen Vorgangsweise wie oben findet man

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{X} = \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | , \quad \langle \mathbf{k} | \mathbf{X} = i \nabla(k) \langle \mathbf{k} |$$

und

$$\mathbf{X} = \int |\mathbf{x}\rangle \mathbf{x} d^3 x \langle \mathbf{x} | = \int |\mathbf{k}\rangle d^3 k i \nabla(k) \langle \mathbf{k} | .$$

Potenzen von \mathbf{P} bzw. \mathbf{X} lassen sich mit der gleichen Technik untersuchen. So erhalten wir z.B.

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{P}^2 = \langle \mathbf{x} | \mathbf{P} \cdot \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{x} | \mathbf{P} = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \nabla \cdot \nabla \langle \mathbf{x} | = -\hbar^2 \Delta(x) \langle \mathbf{x} | .$$

Daraus gewinnt man durch Multiplikation mit $|\mathbf{x}\rangle$ von links, Integration und Verwendung der Vollständigkeit die Ortsdarstellung von \mathbf{P}^2 (und damit der kinetischen Energie!). In der Impulsdarstellung ist der Operator diagonal

$$\mathbf{P}^2 = \int |\mathbf{x}\rangle d^3x (-\hbar^2 \Delta(x)) \langle \mathbf{x}| = \int |\mathbf{k}\rangle d^3k \hbar^2 \mathbf{k}^2 \langle \mathbf{k}| .$$

Die gleichen Formeln erhält man natürlich auch, wenn man eine der Darstellungen von \mathbf{P} quadriert. Mit dem "Herausziehen" ist die Rechnung jedoch einfacher. Durch "freche" Verallgemeinerung finden wir für Funktionen von \mathbf{P} bzw. \mathbf{X}

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | F(\mathbf{P}) &= F\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) \langle \mathbf{x} | \quad , \quad \langle \mathbf{k} | F(\mathbf{P}) = F(\hbar \mathbf{k}) \langle \mathbf{k} | \\ \langle \mathbf{x} | F(\mathbf{X}) &= F(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \quad , \quad \langle \mathbf{k} | F(\mathbf{X}) = F(i \nabla(k)) \langle \mathbf{k} | . \end{aligned}$$

Damit könnten wir z.B. bereits die Wirkung eines Hamiltonoperators der Form

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

untersuchen, der "so aussieht", wie die entsprechende klassische Hamiltonfunktion für ein Teilchen in einem Potential. Natürlich ist er weder in der Orts-, noch in der Impulsdarstellung diagonal.

Nicht alles funktioniert jedoch so, wie in der klassischen Physik. Operatoren sollten, wenn sie diesen Namen verdienen, nicht vertauschbar sein. Als "Kardinalfall" betrachten wir den Kommutator

$$X_i P_j - P_j X_i =: [X_i, P_j] \quad i, j = 1, 2, 3 .$$

Ein Apparat dazu wäre einer für eine Vergleichsmessung, mit der man den Unterschied erfaßt, der auftritt, wenn man in einem Teilchenstrahl (a) zuerst den Impuls und dann den Ort bzw.

(b) zuerst den Ort und dann den Impuls

mißt. Daß verschiedene Resultate herauskommen können, wenn man in einen Strahlengang eingebrachte Apparate miteinander vertauscht, ist alles eher als ungewöhnlich.

Mit unserer Technik finden wir für den Kommutator

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x} | [X_i P_j] &= \left(x_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} x_i \right) \langle \mathbf{x} | \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \delta_{ij} - x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \langle \mathbf{x} | \\
&= i\hbar \delta_{ij} \langle \mathbf{x} |
\end{aligned}$$

Multiplikation mit $|\mathbf{x}\rangle$ von links, Integration und Verwendung der Vollständigkeit gibt die äußerst wichtigen Beziehungen

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1} \quad \textbf{Heisenbergsche Vertauschungsrelationen} .$$

Der Kommutator von Orts- und Impulskomponenten ist daher proportional dem Einheitsoperator (und daher mit allen Operatoren vertauschbar). Diese Relationen sind die wichtigsten Vertauschungsrelationen (VR) der ganzen Quantentheorie. Aus ihnen kann man alle VR für beliebige aus \mathbf{X} und \mathbf{P} aufgebaute Operatoren auf rein algebraischem Weg berechnen und beherrscht damit alle Rechenregeln für Operatoren.

Kommutatoren erfüllen eine Reihe von algebraischen Regeln, die man verhältnismäßig leicht aus ihrer Definition ablesen kann. Sind A, B, C beliebige Operatoren, so ist z.B.

$$\begin{aligned}
[AB, C] &= ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = \\
&= A[B, C] + [A, C]B .
\end{aligned}$$

Damit kann man den Kommutator mit einem Produkt auf Kommutatoren mit dessen Faktoren reduzieren. Durch wiederholte Anwendung der Formel kann man den Kommutator beliebiger aus \mathbf{X} und \mathbf{P} aufgebauter Größen aus Termen zusammensetzen, in denen schließlich nur mehr die Heisenbergschen VR auftreten. Im allgemeinen wird dabei insgesamt ein Operator resultieren.

Die angegebene Regel ist nicht die einzige, die bei solchen Rechnungen nützlich ist. Eine brauchbare Liste bilden die in M 4.7 für Poissonklammern angegebenen Regeln 1–6, die auch für Kommutatorklammern gelten, wenn man A, B, C als Operatoren und k_1, k_2, k, λ als gewöhnliche Zahlen versteht. Die Regel 7 ist durch die Heisenbergschen VR zu ersetzen, wobei X_k als kanonische Koordinaten und P_k als kanonische Impulse auftreten. Auf die formale Gleichheit der Algebra für Poisson- und Kommutatorklammern war bereits in M 4.7 hingewiesen worden. Die Herleitung der Regeln erscheint für Kommutatoren

einfacher. Bei Produkten ist natürlich auf die Reihenfolge der Faktoren zu achten.

Die gefundenen Regeln geben uns bereits die Möglichkeit, für ein Teilchen eine "Vorschrift" für den Übergang von der klassischen zur Quantentheorie zu versuchen. Das Kochrezept lautet: Man nehme die klassische Hamiltonfunktion und ersetze in ihr die (Newtonschen) Koordinaten und Impulse durch entsprechende Operatoren, die den Heisenbergschen VR genügen. Damit erhält man den quantenmechanischen Hamiltonoperator. Die Zeitentwicklung der Zustände muß man dann durch Lösung der zugehörigen Schrödingergleichung (vgl. Abschnitt 3.4) bestimmen. Hängt H nicht explizit von der Zeit ab, so muß man die Energiewerte aus der entsprechenden Eigenwertgleichung bestimmen.

Formal funktioniert dieses Kochrezept für eine Vielzahl von Einteilchenproblemen. Eine Mehrdeutigkeit könnte sich nur dort ergeben, wo es auf die Reihenfolge von \mathbf{X} und \mathbf{P} in Produkten ankommt. Das ist selten genug der Fall. Im Zweifelsfall werden wir das entsprechend symmetrisierte Produkt verwenden. Zu untersuchen ist aber, ob man mit dem Rezept die physikalisch korrekte Beschreibung von Quantensystemen erhält. Dazu muß man Anwendungen auf atomare Systeme untersuchen, z.B. das Wasserstoffatom, bei dem sich ein Elektron im Coulombpotential des Protons bewegt. Solche Anwendungen werden wir später untersuchen. Zuerst sollte aber untersucht werden, ob die Theorie überhaupt in einen vernünftigen Rahmen paßt. In den folgenden Übungsaufgaben werden einige diesbezügliche Fragen gestellt. Gleichzeitig sollen sie praktische Fertigkeit im Umgang mit Kommutatoren vermitteln.

Übungen

Für die folgenden Beispiele ist der Hamiltonoperator für ein Teilchen

$$H = H_{kin} + V(\mathbf{X}), \quad H_{kin} = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2$$

zu betrachten. Bei der Berechnung von Kommutatoren kann man sich V als formale Potenzreihe in \mathbf{X} vorstellen.

- 4) Berechne den Kommutator $[H, \mathbf{X}]$.
- 5) Berechne den Kommutator $[H, \mathbf{P}]$.
- 6) Ein Mittelwert für einen Operator A soll durch

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

definiert sein, wobei $|\psi(t)\rangle$ die Schrödingergleichung erfüllt. Zeige, daß für $\langle \mathbf{X} \rangle, \langle \mathbf{P} \rangle$ die klassischen Newtonschen Gleichungen gelten.

- 7) Betrachte den Operator

$$D = \frac{1}{2}(\mathbf{X} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{X})$$

- a) Wie wirkt er in der Ortsdarstellung $\langle \mathbf{x} | D = (?) \langle \mathbf{x} |$?
- b) Berechne seine Kommutatoren mit \mathbf{X}, \mathbf{P} und H .
- c) Beweise damit den quantenmechanischen Virialsatz

$$2\langle E | H_{kin} | E \rangle = \langle E | (\mathbf{X} \cdot \nabla) V(\mathbf{X}) | E \rangle$$

für einen beliebigen Eigenzustand $|E\rangle$ von H .

- 8) Verwende den Virialsatz zur Untersuchung von Potenzpotentialen

$$V = \alpha R^\beta \quad R = |\mathbf{X}|.$$

Untersuche positive und negative Werte für α bzw. β . Für welche Bereiche sind die Eigenwerte E positiv bzw. negativ? In welchen Bereichen sind die Eigenzustände normierbar?

- 9) Der Hamiltonoperator soll ein vollständiges System von (normierten) Eigenzuständen $|E_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots$) mit voneinander verschiedenen Eigenwerten E_i haben. Beweise folgende Beziehungen:

$$\text{a) } \langle E_i | \mathbf{P} | E_j \rangle = \frac{im}{\hbar} (E_i - E_j) \langle E_i | \mathbf{X} | E_j \rangle$$

$$\text{b) } -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_j (E_i - E_j) |\langle E_i | X | E_j \rangle|^2 = 1$$

$$\text{c) } -\frac{2m}{(\hbar\omega)^2} \sum_j (E_i - E_j) |\langle E_i | \exp(i\omega X) | E_j \rangle|^2 = 1.$$

Dabei ist X eine Komponente von \mathbf{X} . Die Beziehungen b) bzw. c) hängen eng mit der Summenregel von Thomas, Reiche und Kuhn in der Dispersionstheorie (vgl. ED, Übung 5.6) zusammen, weswegen b) auch unter diesen Namen läuft. Bei der Entwicklung der Quantenmechanik war es sehr wichtig, den Zusammenhang sicherzustellen. Zusammenhänge zwischen Kommutatoren und Summenregeln sind in vielen Bereichen der Quantentheorie wichtig. Es ist gut, wenn man sich an diesem Beispiel überlegt, wie man dazu kommt.

4.4 Die kanonische Quantelung

Das im vorhergehenden Abschnitt gefundene Kochrezept für den Übergang von der klassischen zur Quantentheorie wurde an einigen wenigen Fragestellungen als vernünftig erkannt. Es wäre möglich, dies durch Untersuchung weiterer Anwendungsbeispiele zu untermauern. Das Rezept funktioniert aber nur für ein Teilchen, das sich in einem geschwindigkeitsunabhängigen Potential bewegt. Die Quantentheorie sollte auf eine viel größere Klasse von physikalischen Systemen anwendbar sein. Wir müssen daher nach einer allgemeineren Quantelungsregel suchen, in der unser Kochrezept als Spezialfall enthalten ist. Einen geeigneten Ausgangspunkt bildet die Hamiltonsche Fassung der klassischen Mechanik eines Systems mit f Freiheitsgraden in Termen von kanonischen Koordinaten q_α und Impulsen p_α ($\alpha = 1, 2, \dots, f$), vergleiche M 4.6–4.10. Der entsprechende Zugang zur Quantentheorie wurde von Dirac 1925 entwickelt. Um ihn zu finden, beachten wir zunächst, daß das im vorhergehenden Abschnitt betrachtete System selbstverständlich in den kanonischen Formalismus paßt. Die dynamischen Variablen sind $(q_\alpha) = (x_1, x_2, x_3)$, $(p_\alpha) = (p_1, p_2, p_3)$, die Zahl der Freiheitsgrade ist $f = 3$. Die Hamiltonfunktion ist

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} p_{\alpha}^2 + V(q) .$$

Ein allgemeines klassisches System wird durch Vorgabe einer Hamiltonfunktion mit f Koordinaten und Impulsen

$$H = H(q, p, t) = H(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t)$$

festgelegt. Die dynamischen Variablen können dadurch charakterisiert werden, daß ihre Poissonklammern die folgenden Relationen erfüllen (vgl. z.B. M 4.7):

$$\{q_{\alpha}, q_{\beta}\} = \{p_{\alpha}, p_{\beta}\} = 0, \quad \{q_{\alpha}, p_{\beta}\} = \delta_{\alpha\beta} .$$

In Analogie zu unserem Beispiel ersetzen wir die klassischen dynamischen Variablen durch Operatoren Q_{α}, P_{α} und verlangen für sie die (Diracschen) **kanonischen Vertauschungsrelationen**

$$[Q_{\alpha}, Q_{\beta}] = [P_{\alpha}, P_{\beta}] = 0, \quad [Q_{\alpha}, P_{\beta}] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} .$$

In unserem Beispiel entspricht das den Heisenbergschen VR. Durch Vergleich mit den klassischen Poissonklammer-Beziehungen sieht man, daß die kanonischen VR der folgenden Ersetzungsregel entsprechen:

$$\{A, B\}_{kl} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]_{QM} \quad \text{Kanonische Quantelung .}$$

In den kanonischen VR treten in den Klammern nur die dynamischen Variablen auf. Mit Hilfe der in M 4.7 angegebenen algebraischen Regeln (1)–(6) lassen sich jedoch Poissonklammern für beliebige aus q_α, p_β aufgebaute Funktionen $A = A(q, p), B, C$ auf die fundamentalen Poissonklammern reduzieren bzw. aus diesen solche für Funktionen der dynamischen Variablen gewinnen. Für die Kommutatorklammern gelten aber dieselben algebraischen Regeln. Man kann daher für sie die gleiche Reduktion bzw. Konstruktion durchführen und sich so davon überzeugen, daß die kanonische Quantelungsvorschrift für beliebige Funktionen der dynamischen Variablen gilt. Zu jedem Paar A, B von klassischen Funktionen, deren Poissonklammer bekannt ist, liefert sie automatisch eine algebraische Regel für das zugehörige quantenmechanische Paar von Operatoren. Die einzige Stelle, an der es bei der Übersetzung in die Quantentheorie zu Mehrdeutigkeiten kommen kann, ist die Reihenfolge nichtvertauschbarer Operatoren in dem quantenmechanischen Operator $A(Q, P)$, der einer klassischen Observablen $A(q, p)$ zugeordnet wird (in der es ja auf die Reihenfolge nicht ankommt). Wenn die Mehrdeutigkeit zu Unklarheiten führt, muß man im Einzelfall nachprüfen, welche Reihenfolge zu physikalisch vernünftigen Ergebnissen führt. Meistens ist das für den bezüglich möglicher Reihenfolgen symmetrisierten Ausdruck der Fall.

Verwendet man als Koordinaten bzw. Impulse in der klassischen Fassung die Ortskoordinaten $\mathbf{x}_{(i)}$ bzw. die (kinetischen) Impulse $\mathbf{p}_{(i)} = m\dot{\mathbf{x}}_{(i)}$ eines Systems von n Teilchen ($i = 1, 2, \dots, n, f = 3n$), so erhält man in der quantenmechanischen Fassung die Verallgemeinerung der im vorigen Abschnitt untersuchten Theorie auf n Teilchen. Damit werden aber nur Systeme mit geschwindigkeitsunabhängigem Potential $V = V(\mathbf{X}_{(1)}, \dots, \mathbf{X}_{(n)}, t)$ erfaßt. Bei geschwindigkeitsabhängigen Kräften sind die in den kanonischen VR auftretenden **kanonischen** Impulse von den **kinetischen** Impulsen $m\dot{\mathbf{x}}_{(i)}$ verschieden (und die Hamiltonfunktion ist nicht die Summe aus kinetischer Energie + Potential). Die kanonische Quantelungsvorschrift erfaßt auch diesen Fall, wenn

man die klassischen Ausdrücke im Sinn des Hamiltonformalismus auf-
faßt (d.h. alle Geschwindigkeiten \dot{q}_α müssen zugunsten von p_α eliminiert
sein, vgl. M 4.6).

Durch die Fassung in Termen von generalisierten Koordinaten und
Impulsen erlaubt der kanonische Formalismus aber auch die Formu-
lierung einer Quantentheorie für Systeme, deren dynamische Variable
nichts mit Koordinaten oder Impulsen von "Teilchen" im naiven Sinn
des Wortes zu tun haben. Was beim Übergang von der klassischen zur
Quantentheorie gequantelt wird, sind die Variablen, die für eine kon-
krete physikalische Problemstellung zu den relevanten Freiheitsgraden
gehören. Bei schwingungsfähigen Systemen sind das z.B. Auslenkungen
der Bestandteile aus ihrer Ruhelage oder daraus konstruierte Koordi-
naten und Impulse für Normalschwingungen (sog. Moden), bei starrer
Rotation kann es sich um Winkelvariable handeln usw. Der kanonische
Formalismus garantiert, daß man nur relevante Freiheitsgrade quan-
tentheoretisch untersucht. Dazu muß man sich aber **zuerst** überlegen,
welche Freiheitsgrade für das betrachtete System relevant sind und wie
die klassische Theorie im Rahmen des kanonischen Formalismus aus-
sieht.

Die Formulierung der Dynamik im Rahmen der Quantentheorie ge-
schieht (wie für ein Teilchen) mit Hilfe der Schrödingergleichung von
Kap. 3. Formal sieht sie anders aus als in der klassischen Theorie. Ei-
ne Alternative, in der die Analogie enger ist, werden wir im nächsten
Abschnitt untersuchen.

Wie für ein Teilchen kann man Eigenzustände aller Koordinaten Q_α
oder solche aller Impulse P_α benützen

$$|q\rangle := |q_1, q_2, \dots, q_f\rangle \quad \text{bzw.} \quad |p\rangle := |p_1, p_2, \dots, p_f\rangle$$

aber es gibt wegen der kanonischen VR keine simultanen Eigenzustände
von kanonisch konjugierten Paaren (Q_α, P_α) . Die Zustände $|q\rangle$ bzw. $|p\rangle$
sind mögliche Basiszustände, mit denen man z.B. Eigenschaften von
Operatoren untersuchen kann. Für die Lösung der Schrödingergleichung
für ein konkretes System können sie als Ausgangsbasis verwendet wer-
den. Um eine Vorstellung zu erhalten, wie das zu lösende Problem be-
schaffen ist, betrachten wir als einfachsten möglichen Fall n Teilchen
mit geschwindigkeitsunabhängiger Wechselwirkung

$$H = H_{kin}(P) + V(Q) .$$

In der Ortsbasis erhalten wir

$$\langle q|H|\Psi(t)\rangle = \left(H_{kin} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) + V(q) \right) \langle q|\Psi(t)\rangle .$$

Die Schrödingergleichung ist dann eine partielle Differentialgleichung in $f + 1$ Variablen (f Koordinaten q_α und die Zeit). Für ein Teilchen in drei Dimensionen ist das die Form, in der sie Schrödinger gefunden hat. Wenn man unbedingt von einem Wellenvorgang reden möchte, so muß man damit leben, daß es ein solcher in f Dimensionen ist. Die Bestimmung der Energieeigenwerte im stationären Fall läuft auf die Lösung des Eigenwertproblems für eine partielle Differentialgleichung in f Dimensionen hinaus. Arbeitet man mit der Impulsdarstellung, so ist zwar der kinetische Term diagonal, nicht aber der Potentialterm

$$\langle p|H|\Psi(t)\rangle = H_{kin}(p)\langle p|\Psi(t)\rangle + \langle p|V(Q)|\Psi(t)\rangle .$$

Durch Einsetzen der **1** in der Impuls- und Ortsdarstellung erhält man

$$\langle p|H|\Psi(t)\rangle = H_{kin}(p)\langle p|\Psi(t)\rangle + \int K(p, p') d^f p' \langle p'|\Psi(t)\rangle$$

mit

$$K(p, p') = \int \langle p|q\rangle V(q) \langle q|p'\rangle d^f q$$

und die Schrödingergleichung hat bezüglich der Impulsvariablen den Charakter einer Integralgleichung in f Dimensionen. In der einen oder anderen Form ist die Lösung für ein konkretes Problem nur möglich, wenn H genügend einfach ist. In allen anderen Fällen hat man mit $|q\rangle$ bzw. $|p\rangle$ eine unzuweckmäßige Basis gewählt. Es ist daher vorzuziehen, so lang als möglich rein algebraisch (d.h. mit Operatoren und ihren algebraischen Eigenschaften) zu rechnen und erst dann eine Basis zu benützen, wenn man sehen kann, in welcher Basis das Problem besonders einfach wird. In dieser werden in der Regel weder alle Q_α , noch alle P_α diagonal sein. Diese Vorgangsweise wird daher in den folgenden Kapiteln bevorzugt.

Die physikalische Interpretation der Theorie ist im Wesentlichen durch die allgemeine Bedeutung bestimmt, die quantenmechanische Matrixelemente als Wahrscheinlichkeitsamplituden haben (vgl. Kap. 2). Wir untersuchen zunächst, was sie in dem hier betrachteten Zusammenhang für einen Operator $A(Q, P)$ bedeutet, der aus einer klassischen

Observablen $A(q, p)$ durch die quantenmechanische Ersetzung hervorgeht. Beispiele dafür gibt es viele: die kinetische, potentielle oder gesamte Energie eines Systems oder seiner Teile, ein entsprechender Impuls oder Drehimpuls, elektrische oder magnetische Momente usw. Im Sinn unserer Veranschaulichung von Kap. 2 können wir uns einen zugehörigen Apparat A als einen Meßapparat vorstellen, mit dem man die betreffende physikalische Größe messen kann (wobei wir uns nicht darum kümmern sollen, ob und wie er gebaut werden kann).

Welche quantenmechanischen Resultate entsprechen den Meßwerten, die man bei einer Messung einer physikalischen Observablen A erhalten kann? Meßwerte müssen reelle Zahlen sein. Soll bei einer Messung ein bestimmter Zahlwert resultieren, so muß es erlaubt sein zu sagen, daß die betreffende Observable in der vorliegenden Situation (d.h. in dem vorliegenden Zustand) den gemessenen Wert hat. Von einem Operator kann man nur dann behaupten, daß er in einem Zustand einen Zahlwert annimmt, wenn dieser Zustand ein Eigenzustand ist. Dem Meßwert entspricht dann der zugehörige Eigenwert. Diese (umkehrbar eindeutige) Zuordnung der Eigenwerte von A zu den möglichen Meßwerten der durch A beschriebenen physikalischen Größe ist die einzige logische Möglichkeit, die man hat, wenn man sich dazu entschlossen hat, physikalische Größen durch Operatoren zu beschreiben. Sie entspricht der Vorstellung des Meßapparats als Analysator nach möglichen Meßwerten. Daß physikalische Observable durch selbstadjungierte Operatoren $A = A^\dagger$ beschrieben werden müssen, ist nun evident. Nur für solche Operatoren sind die Eigenwerte reell, wie das für Meßwerte der Fall sein muß.

In Formeln lautet die Eigenwertgleichung für A

$$A|a_i\rangle = |a_i\rangle a_i .$$

Die Eigenzustände $|a_i\rangle$ müssen eine vollständige Basis bilden, wenn A als Analysator wirken soll:

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \mathbf{1} .$$

Enthält das Eigenwertspektrum kontinuierliche Anteile, so ist die Summe im Sinn von

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| + \int |a\rangle da\langle a|$$

gemeint, wobei das Integral über den kontinuierlichen Anteil zu erstrecken ist. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß man bei der Messung von A in einem beliebigen (normierten) Zustand $|\psi\rangle$ den Wert a_i findet, ist nach unseren Regeln das Quadrat der Projektionsamplitude von $|\psi\rangle$ auf $|a_i\rangle$

$$W(a_i, \psi) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 .$$

Das ist mit der Zuordnung von Meßwerten zu Eigenwerten konsistent: Ist $|\psi\rangle$ der Zustand $|a_i\rangle$ selbst, so hat A mit Sicherheit den Wert a_i , die Wahrscheinlichkeit ist 1. Nur in diesem Fall ist die physikalische Größe "scharf", d.h. jede Messung liefert mit Sicherheit denselben Wert.

Die Amplitude $\langle \psi | A | \psi \rangle$ selbst ist als Folge von $A = A^\dagger$ reell. Sie heißt **Erwartungswert** oder **Mittelwert** von A im Zustand $|\psi\rangle$. Die Bezeichnung "Mittelwert" wird verständlich, wenn wir die Eigenzustände einschieben

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | A | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2 .$$

Der Erwartungswert ist also ein gewogener Mittelwert aller möglichen Meßwerte. Als Gewichtsfunktion tritt die Wahrscheinlichkeit auf, mit der man den betreffenden Meßwert im Zustand $|\psi\rangle$ findet. Das entspricht dem Mittelwertbegriff in der Statistik. Diese Wahrscheinlichkeit kann als Mittelwert des Projektors auf $|\psi\rangle$

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

im Eigenzustand verstanden werden

$$\langle a_i | P_\psi | a_i \rangle = \langle a_i | \psi \rangle \langle \psi | a_i \rangle = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 .$$

Eine andere Fragestellung, bei der die Wahrscheinlichkeitsinterpretation zum Tragen kommt, betrifft die Änderung von Zuständen im Lauf der Zeit. Wir betrachten ein System, das zu einer Anfangszeit t_0 im Zustand $|\Psi\rangle = |\Psi(t_0)\rangle$ sein soll und fragen nach der Wahrscheinlichkeit $W(\Phi, \Psi; t, t_0)$ dafür, es zur Zeit $t > t_0$ im Zustand $|\Phi\rangle$ anzutreffen, wobei zwischen t und t_0 eine zeitabhängige Störung auf das System wirkt (die in t_0 ein- und in t ausgeschaltet wird). Nach unseren allgemeinen Regeln ist

$$W(\Phi, \Psi; t, t_0) = |\langle \Phi | \Psi(t) \rangle|^2 = |\langle \Phi | U(t, t_0) | \Psi \rangle|^2$$

Der zu U gehörige “Apparat” ist dabei das ganze (sich selbst überlassene) System (einschließlich des “Schaltmechanismus” für das Ein- und Ausschalten der Störung). Vorauszusetzen ist dabei, daß die Zustände $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle$ Elemente eines vollständigen, normierten Orthogonalsystems sind. Ein Beispiel ist die auf S.87 betrachtete Übergangswahrscheinlichkeit. In diesem Beispiel kann man sich die Störung abrupt ein- und ausgeschaltet denken. Es gibt aber auch Problemstellungen, bei denen der “Schaltmechanismus” eine Rolle spielt. Zu beachten ist z.B., daß durch ihn das Problem auch dann zeitabhängig werden kann, wenn die Störung selbst zeitunabhängig ist.

In vielen praktisch relevanten Fällen sind die Anfangszustände Eigenzustände der Energie des ungestörten Systems

$$|\psi\rangle = |E_a\rangle, \quad H^{(0)}|E_a\rangle = |E_a\rangle E_a$$

und man interessiert sich dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit das System unter Einfluß der Störung zur Zeit t in einem anderen Eigenzustand $|\phi\rangle = |E_b\rangle$ von $H^{(0)}$ übergegangen ist. Die Formel dafür ist

$$W_{ba}(t, t_0) = |\langle E_b|U(t, t_0)|E_a\rangle|^2 = \langle E_a|U^\dagger|E_b\rangle\langle E_b|U|E_a\rangle .$$

Ist das Energiespektrum von $H^{(0)}$ diskret, so gibt es (bei normierten Eigenzuständen) keine Probleme. Bei kontinuierlichem Spektrum bereitet die Normierung Schwierigkeiten. Eine korrekte Normierung erhält man mit Hilfe der δ -Funktion

$$\langle E_a|E_b\rangle = \frac{1}{\rho(E_b)}\delta(E_a - E_b) .$$

Die Größe ρ heißt Termdichte und ist ein Maß für das Gewicht, mit dem ein Eigenwert zum Kontinuum beiträgt. Es ist konsequent, dafür die Zahl der Zustände pro Einheitsintervall der Energie zu wählen. Ersetzt man den Projektor auf einen einzelnen Eigenzustand $|E_b\rangle\langle E_b|$ durch den entsprechenden Projektor auf ein (differentielles) Energieintervall $|E_b\rangle\rho(E_b)dE_b\langle E_b|$ und integriert über ein endliches Intervall Δ des Energiespektrums um E_b , so erhält man die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das System unter Einfluß der Störung zur Zeit t in Eigenzustände von $H^{(0)}$ übergegangen ist, deren Energie im Intervall Δ liegt:

$$W_{\Delta,a}(t, t_0) = \int_{\Delta} W_{ba}(t, t_0)\rho(E_b)dE_b = \int_{\Delta} |\langle E_b|U|E_a\rangle|^2\rho(E_b)dE_b .$$

Übungen

- 10) Beweise mit Hilfe der Schrödingergleichung, daß die Mittelwerte

$$\langle Q_\alpha \rangle = \langle \Psi(t) | Q_\alpha | \Psi(t) \rangle, \quad \langle P_\alpha \rangle$$

die klassischen Hamiltonschen Gleichungen erfüllen.

- 11) Betrachte Operatoren $A(Q, P), B(Q, P)$, die von allen kanonischen Variablen abhängen. Dabei kann man sich vorstellen, daß die Operatoren so geordnet sind, daß alle Q_α links von allen P_α stehen. Die Zustände

$$|q\rangle := |q_1, q_2, \dots, q_f\rangle$$

sollen ein vollständiges System bilden

$$\int |q\rangle d^f q \langle q| = \mathbf{1} \quad d^f q = dq_1 dq_2 \dots dq_f$$

und Eigenzustände aller Q_α sein

$$Q_\alpha |q\rangle = |q\rangle q_\alpha \quad \langle q| A(Q, P) = \langle q| A(q\mathbf{1}, P) .$$

Analog für Impulszustände

$$P_\alpha |p\rangle = |p\rangle p_\alpha, \quad A(Q, P) |p\rangle = A(Q, p\mathbf{1}) |p\rangle .$$

Zu untersuchen sind Matrixelemente

$$\langle q| A |p\rangle$$

in einer gemischten Darstellung

$$A = \int |q\rangle d^f q \langle q| A |p\rangle d^f p \langle p| .$$

Entwickle $A(q\mathbf{1}, P)$ bzw. $A(Q, p\mathbf{1})$ in der Umgebung der Diagonale und berechne das Matrixelement

$$\langle q| [A, B] |p\rangle$$

in niedrigster nichttrivialer Ordnung.

- 12) Gegeben seien zwei selbstadjungierte Operatoren A, B mit dem Kommutator

$$C = \frac{1}{i}[A, B].$$

Ein Schwankungsquadrat soll durch

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad \text{mit} \quad \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

definiert sein (analog für B). Beweise die Beziehung

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}(\langle C \rangle)^2$$

und diskutiere ihre physikalische Bedeutung.

4.5 Andere Fassungen der Quantendynamik

Bisher haben wir die Dynamik in Termen eines zeitabhängigen Zustandsvektors beschrieben, der aus der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(Q, P, t) |\Psi(t)\rangle$$

in Termen eines Anfangszustands $|\Psi(t_0)\rangle$ zu bestimmen ist. Die Operatoren Q_α, P_α sind dabei als zeitunabhängig aufzufassen. Die zeitliche Entwicklung einer durch die physikalische Größe $A(Q, P)$ beeinflussten Situation (zu A gehöriger "Apparat im Strahl") ist

$$|\Psi'\rangle = A(Q, P) |\Psi(t)\rangle$$

und wird somit erhalten, indem man **denselben** Operator auf einen im Lauf der Zeit **veränderlichen** Zustandsvektor anwendet, der die Schrödingergleichung erfüllt. Die Variable t in H bezieht sich dabei nur auf eine **explizite** Zeitabhängigkeit. Durch Vergleich mit der klassischen Dynamik wird nun auch klar, was mit explizit gemeint ist. Analog zu H kann man natürlich auch andere explizit zeitabhängige Operatoren betrachten (z.B. tP_α oder $Q_\alpha \sin \omega t$ etc.).

Insgesamt heißt diese Beschreibung der Dynamik das **Schrödingerbild** und stellt nicht die einzige Möglichkeit zur Erfassung der zeitlichen Entwicklung eines Quantensystems dar. Andere Bilder erhält man durch zeitabhängige Transformationen der Zustände und Operatoren. Wir gehen dazu vom Schrödingerbild aus und bezeichnen die Zustände bzw. Operatoren mit einem Index s :

$$|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi_s(t)\rangle, \quad Q_\alpha \equiv Q_{s,\alpha}, \quad P_\alpha \equiv P_{s,\alpha}, \quad A(Q_s, P_s, t) \equiv A_s(Q, P, t)$$

$$\frac{d}{dt} Q_{s,\alpha} = \frac{d}{dt} P_{s,\alpha} = 0, \quad \frac{d}{dt} A_s = \frac{\partial}{\partial t} A_s .$$

Die in 3.4 betrachtete Zeitentwicklung können wir als unitäre Transformation auffassen, durch die $|\Psi_s(t)\rangle$ aus einem anderen Zustand hervorgeht:

$$|\Psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_h\rangle \quad |\Psi_h\rangle \equiv |\Psi_s(t_0)\rangle .$$

Im Gegensatz zu $|\Psi_s(t)\rangle$ ist $|\Psi_h\rangle$ zeitunabhängig

$$\frac{d}{dt} |\Psi_h\rangle = 0 .$$

Definieren wir nun neue Operatoren (Q, P) durch

$$Q_{h,\alpha}(t) = U^\dagger(t, t_0) Q_{s,\alpha} U(t, t_0) \quad (\text{analog für } P),$$

so sind diese Größen offensichtlich zeitabhängig. Mit Hilfe der Schrödingergleichung für U aus 3.4 findet man für sie eine Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} Q_{h,\alpha}(t) &= \frac{dU^\dagger}{dt} Q_{s,\alpha} U + U^\dagger Q_{s,\alpha} \frac{dU}{dt} = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H_s Q_{s,\alpha} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger Q_{s,\alpha} H_s U \\ &= \frac{1}{i\hbar} (-U^\dagger H_s U U^\dagger Q_{s,\alpha} U + U^\dagger Q_{s,\alpha} U U^\dagger H_s U) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [Q_{h,\alpha}(t), H_h(t)] \end{aligned}$$

wobei

$$H_h(t) = U^\dagger H_s U$$

ist. Die Gleichung für $P_{h,\alpha}(t)$ bzw. für aus (Q, P) zusammengesetzte Operatoren erhält man auf die gleiche Weise. Insgesamt erhalten wir als Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} Q_{h,\alpha}(t) &= [Q_{h,\alpha}(t), H_h(t)] \\ i\hbar \frac{d}{dt} P_{h,\alpha}(t) &= [P_{h,\alpha}(t), H_h(t)] \\ \frac{d}{dt} A_h &= \frac{\partial A_h}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A_h, H_h] \end{aligned}$$

(**Heisenbergsche** Bewegungsgleichungen). Schreibt man die klassischen kanonischen Bewegungsgleichungen mit Poissonklammern (vgl. M 4.7), so erhält man aus ihnen mit der kanonischen Quantelungsvorschrift die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen. Im Gegensatz zur klassischen Physik müssen aber in der Quantentheorie **Operatorlösungen** der Gleichungen gesucht werden. Außerdem muß man beachten, daß die physikalisch relevanten Größen in der Quantentheorie nicht die kanonischen Koordinaten- und Impulsoperatoren sind, sondern Eigenwerte (z.B. der Energie) bzw. Übergangswahrscheinlichkeiten.

Insgesamt heißt diese Beschreibung der Dynamik das **Heisenbergbild**. Die zeitliche Entwicklung einer durch eine physikalische Größe

$A(Q, P)$ beeinflussten Situation erhält man, indem man den **zeitabhängigen** Operator $A_h(Q_h(t), P_h(t))$ (der die Bewegungsgleichungen löst) auf einen **festen** Zustandsvektor anwendet. Er entspricht dem Schrödingerzustand zur Anfangszeit t_0 , in der die ganze zeitliche Entwicklung beginnt.

Mit Hilfe der angegebenen Transformationsformeln ist leicht nachzurechnen, daß die kanonischen VR in beiden Bildern dieselben sind

$$[Q_{h,\alpha}(t), P_{h,\beta}(t)] = [Q_{s,\alpha}, P_{s,\beta}] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\mathbf{1}$$

und daß Erwartungswerte nicht vom verwendeten Bild abhängen

$$\langle \Psi_h | A_h | \Psi_h \rangle = \langle \Psi_s(t) | A_s | \Psi_s(t) \rangle .$$

Außer diesen beiden Extremfällen gibt es eine Fülle von weiteren Möglichkeiten zur Beschreibung der Dynamik, die man erhält, indem man die Zeitabhängigkeit auf Zustände und Operatoren aufteilt. Die folgende Überlegung zeigt, wie man vorgehen kann. Wir gehen dazu vom Schrödingerbild aus. Wir zerlegen den Hamiltonoperator in zwei Teile

$$H_s = H_s^{(0)} + H_s^{(1)}$$

und setzen die Zeitentwicklung als Produkt an

$$U = U_0 U_1 .$$

Dabei verlangen wir, daß U_0 die dynamische Gleichung mit $H^{(0)}$ löst und der Anfangsbedingung genügt

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_0 = H_s^{(0)} U_0 , \quad U_0(t_0, t_0) = \mathbf{1} .$$

Wir fassen die durch U_0 bestimmte Zeitentwicklung als Übergang zu einem anderen Bild (Index w) auf

$$\begin{aligned} |\Psi_s(t)\rangle &= U_0 |\Psi_w(t)\rangle \\ Q_{w,\alpha}(t) &= U_0^\dagger Q_{s,\alpha} U_0 \quad (\text{analog für } P) . \end{aligned}$$

In diesem Bild sind evidenterweise sowohl die Zustände, als auch die Operatoren zeitabhängig. Die Schrödingergleichung für

$$|\Psi_w(t)\rangle = U_0^\dagger |\Psi_s(t)\rangle$$

erhält man durch Differenzieren und Einsetzen der dynamischen Gleichung für U_0^\dagger . Das Resultat ist

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_w(t)\rangle = H_w^{(1)}(t) |\Psi_w(t)\rangle .$$

Für die Operatoren erhält man

$$i\hbar \frac{d}{dt} Q_{w,\alpha}(t) = [Q_{w,\alpha}(t), H_w^{(0)}]$$

(analog für P , entsprechend für andere Operatoren). In Termen des Heisenbergbildes ist

$$|\Psi_w(t)\rangle = U_1 |\Psi_h\rangle , \quad Q_{w,\alpha} = U_1 Q_{h,\alpha} U_1^\dagger \quad \text{etc.}$$

Der Name für diese Beschreibung ist **Wechselwirkungsbild**. Er kommt daher, daß man dieses Bild häufig zur Untersuchung von (im Schrödingerbild) zeitabhängigen Störungen (Wechselwirkungen) verwendet, bei denen $H_s^{(0)}$ (ungestörtes Problem) zeitunabhängig ist. In diesem Fall ist

$$H_w^{(0)} = H_s^{(0)} , \quad U_0 = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_s^{(0)}\right)$$

und man versucht, die Schrödingergleichung für $|\Psi_w(t)\rangle$ näherungsweise zu lösen (zeitabhängige Störungstheorie). Allgemein kann man jedoch auch andere Aufspaltungen von H in zwei Terme betrachten, zu jeder gibt es ein eigenes Wechselwirkungsbild. Unter Umständen kann es zweckmäßig sein, einen Teil der expliziten Zeitabhängigkeit in $H^{(0)}$ aufzunehmen. Natürlich ist das nur sinnvoll, wenn man U_0 berechnen kann.

Für die kanonischen Koordinaten- bzw. Impulsoperatoren (zu gleichen Zeiten) gelten dieselben VR wie im Schrödinger- und Heisenbergbild. Erwartungswerte sind, wie schon oben bemerkt, unabhängig vom verwendeten Bild, daher ist

$$\langle \Psi_s(t) | A_s | \Psi_s(t) \rangle = \langle \Psi_w(t) | A_w | \Psi_w(t) \rangle .$$

4.6 Ergänzung: Exponentielle Operatoren

Bei vielen Problemen der Quantentheorie treten Operatoren in Exponentialform $\exp A$ auf. Die Exponentialfunktion ist dabei rein formal als Abkürzung für ihre Reihenentwicklung

$$\exp A = \mathbf{1} + A + \frac{1}{2!}A^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}A^n$$

gemeint. Beispiele dafür sind vereinzelt bereits in Kap. 2 und 3 vorgekommen (Übungsbeispiele 2.15, 2.25, 3.4). In vielen praktisch relevanten Problemen kann der Operator der Zeitentwicklung in Exponentialform geschrieben werden (vgl. Abschnitte 3.4 und 4.6). Weitere Anwendungen werden wir im folgenden Abschnitt untersuchen. Für alle damit zusammenhängenden Probleme ist es nützlich, über einige technische Fertigkeiten im Umgang mit solchen Operatoren zu verfügen. Die folgenden Übungsbeispiele sollen sie vermitteln. Dabei bedeuten A, B, \dots (lineare) Operatoren und λ, μ, \dots (i.a. komplexe) Zahlen, von denen die Operatoren nicht abhängen sollen. Außerdem bedeutet ${}_n[A, B]$ den n -fachen Kommutator

$${}_n[A, B] = [A, [A, \dots, [A, B] \dots]]$$

(n Klammern, in denen n mal A und einmal B vorkommt). Eine rekursive Definition ist

$${}_0[A, B] = B, \quad {}_n[A, B] = [A, {}_{(n-1)}[A, B]] \quad n = 1, 2, \dots$$

Das gibt

$${}_1[A, B] = [A, B], \quad {}_2[A, B] = [A, [A, B]] \quad \text{usw.}$$

Für die Lösung der Übungsaufgaben ist es nützlich, Ableitungen nach den Parametern (bzw. entsprechende Differentialgleichungen) zu untersuchen.

Übungen

- 13) Berechne den n -ten Term B_n in der Entwicklung

$$\exp(\lambda A) \cdot B \cdot \exp(-\lambda A) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n B_n .$$

- 14) Berechne die n -ten Terme C_n, D_n in

$$[B, \exp(-\lambda A)] = \exp(-\lambda A) \sum_n \lambda^n C_n = \left(\sum_n \lambda^n D_n \right) \exp(-\lambda A) .$$

- 15) Finde eine Reihenentwicklung für den Exponenten Q in

$$\exp(\lambda A) \cdot \exp(\mu B) \cdot \exp(-\lambda A) = \exp(\mu Q) .$$

Dabei sollen λ und μ voneinander unabhängig sein.

- 16) Für vertauschbare Operatoren $A, B, [A, B] = 0$ (und nur für solche) ist

$$\exp(A + B) = \exp A \cdot \exp B = \exp B \cdot \exp A .$$

Betrachte stattdessen Operatoren mit

$$[A, B] \neq 0, \quad {}_2[A, B] = {}_2[B, A] = 0$$

und berechne C, D in den Darstellungen

$$\exp(A + B) = \exp A \cdot \exp B \cdot \exp C = \exp B \cdot \exp A \cdot \exp D$$

(Formel(n) von Baker-Hausdorff).

Es gibt viele Verallgemeinerungen dieser Formeln, die Faktorzerlegungen von exponentiellen Operatoren liefern. Für Anwendungen in der Physik sind sie nur dann nützlich, wenn die Faktoren (bzw. deren Exponenten) brauchbare algebraische Eigenschaften haben. Für eine Zerlegung von $\exp(A + B + C)$ vgl. H. Mitter, K. Yamazaki, Lett. Math. Phys. **8**, 321 (1984).

17) Beweise die Formeln von Kubo

$$\begin{aligned} [A, \exp(-\lambda B)] &= \exp(-\lambda B) \int_0^\lambda d\mu \exp(\mu B) [B, A] \exp(-\mu B) \\ &= - \int_0^\lambda d\mu \exp(-\mu B) [B, A] \exp(\mu B) \exp(-\lambda B) . \end{aligned}$$

18) Betrachte ein stationäres quantenmechanisches Problem (H_s zeitunabhängig). Verwende die Kuboformel und finde damit eine Darstellung eines Heisenbergoperators $A_h(t)$ in Termen von $A_h(0) = A_s$ (die Darstellung enthält ein Zeitintegral).

Betrachte als Spezialfall

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 + V(Q) , \quad A_h(t) = Q_{h,\alpha}(t) .$$

19) Material zum Nachdenken. In vielen physikalischen Problemen geht es um Operatoren, für welche die in Aufgabe 16 verlangten Voraussetzungen ${}_2[A, B] = {}_2[B, A] = 0$ erfüllt sind. Diese bedeuten offenbar, daß $[A, B] = \alpha \mathbf{1}$ ist (mit einer komplexen Zahl α). Beispiele für solche Operatorpaare sind Q_{α}, P_{α} bzw. Kombinationen davon. Eine Untersuchung von $\exp(\lambda AB)$ gelingt mit Hilfe einer durch

$$\exp(\mu(A; B)) = \sum_n \frac{\mu^n}{n!} A^n B^n$$

definierten geordneten Exponentialfunktion, die auf J. Schwinger zurückgeht. Für diese lassen sich folgende Formeln beweisen:

$$\begin{aligned} \exp(\mu(A; B)) &= \exp\left(-\frac{1}{\alpha} AB \ln(1 - \mu\alpha)\right) \\ \exp(\lambda AB) &= \exp\left(-\frac{1}{\alpha} (\exp(-\lambda\alpha) - 1)(A; B)\right) . \end{aligned}$$

Die letzte Formel läßt sich auf $\exp(\lambda AB^n)$ verallgemeinern. Mit dieser Technik ist es möglich, geordnete Zerlegungen von Bildungen wie z.B. $\exp(\lambda(A+B)^2)$ oder $\exp(\lambda(A^2 \pm B^2))$ zu erhalten.

4.7 Transformationen, Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Für jeden mathematischen Formalismus zur Beschreibung physikalischer Sachverhalte ist die Frage interessant, ob es Änderungen der mathematischen Beschreibung gibt, von denen die beschriebenen Sachverhalte nicht betroffen werden. Hat man gelernt, die entsprechenden mathematischen Transformationen klar zu erfassen, so kann man daraus großen Nutzen ziehen. Man wird dann in einer konkreten Situation Transformationen durchführen, durch die sich die mathematische Beschreibung so vereinfacht, daß das entsprechende physikalische Problem gelöst werden kann. In der klassischen Dynamik sind diese Transformationen die kanonischen Transformationen (vgl. M 4.8). Sie sind dadurch charakterisiert, daß die Bewegungsgleichungen ihre Form behalten. Die fundamentalen Poissonklammern $\{q_\alpha, p_\beta\}$ ändern sich bei kanonischen Transformationen nicht. Das quantenmechanische Gegenstück dazu ist leicht zu finden, wenn man sich klar macht, daß die physikalischen Aussagen in den Wahrscheinlichkeiten bzw. Erwartungswerten enthalten sind. Diese sind so konstruiert worden, daß sie bei unitären Transformationen

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U|\psi\rangle, \quad A \rightarrow A' = UAU^\dagger$$

ungeändert bleiben. Die kanonischen VR ändern sich bei unitären Transformationen ebenfalls nicht. Den kanonischen Transformationen der klassischen Theorie entsprechen also unitäre Transformationen der Quantentheorie. Wie in der klassischen Physik ändert sich dabei im allgemeinen der Hamiltonoperator $H' \neq H$. Das gibt die Möglichkeit, die Lösung eines Problems durch eine Transformation zu vereinfachen.

Eine besonders wichtige Klasse von Transformationen bilden solche, bei denen sich H **nicht** ändert. Sie heißen Symmetrietransformationen und hängen eng mit Bewegungskonstanten (Erhaltungströßen) zusammen. Wir untersuchen zunächst, in welchem Sinn man einen Operator F in der Quantentheorie eine Erhaltungsgröße nennen kann (wobei wir explizit zeitabhängige Größen von vornherein ausschließen).

Im Sinn von "Bewegungskonstanz bedeutet Zeitableitung = 0" kann sich diese Aussage nur auf das Heisenbergbild beziehen (im Schrödingerbild sind alle Operatoren zeitunabhängig). Aus der Bewegungsgleichung folgt dann

$$\frac{d}{dt}F_h = \frac{1}{i\hbar}[F_h, H_h] = 0, \quad \text{also} \quad [F_h, H_h] = 0.$$

Daraus folgt aber auch, daß F im Schrödingerbild mit H vertauschbar ist

$$[F_s, H_s] = 0 .$$

Als Folge der Schrödingergleichung ändert sich der Erwartungswert nicht

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi_s(t) | F_s | \Psi_s(t) \rangle = 0 .$$

Dem Erhaltungssatz für eine klassische Größe F entspricht also im Schrödingerbild die Zeitkonstanz des Mittelwerts des zugehörigen quantenmechanischen Operators. Daß F mit H kommutiert, hat zur Folge, daß F und H simultan diagonalisiert werden können, d.h. es gibt ein vollständiges System von Basisvektoren, die zugleich Eigenvektoren von F sind. Wir zeigen das unter der Annahme, daß die Eigenwerte E_n von H alle voneinander verschieden sind (zu jedem Eigenwert gibt es dann nur einen Eigenzustand). Ist E_n ein Eigenwert von H

$$H|E_n\rangle = |E_n\rangle E_n ,$$

so ist der Zustand

$$|\rho_n\rangle = A|E_n\rangle$$

ebenfalls ein Eigenzustand von H mit demselben Eigenwert:

$$H|\rho_n\rangle = HA|E_n\rangle = AH|E_n\rangle = |\rho_n\rangle E_n$$

Voraussetzungsgemäß gibt es aber nur einen solchen Eigenzustand. Die Zustände $|E_n\rangle$ und $|\rho_n\rangle$ müssen daher bis auf einen Zahlfaktor gleich sein:

$$|\rho_n\rangle = A|E_n\rangle = |E_n\rangle a_n .$$

Der Zustand $|E_n\rangle$ ist daher auch Eigenzustand von A . Ist das Eigenwertspektrum von H entartet, so ist der Beweis komplizierter, es gibt aber auch in diesem Fall ein vollständiges System von simultanen Eigenzuständen.

Für die Physik ist es außerordentlich wichtig, für ein gegebenes Problem möglichst viele mit H vertauschbaren Operatoren zu finden, weil man damit auch viele Erhaltungsgrößen gefunden hat. Die entsprechende Basis bietet sich für die Lösung des Problems als besonders günstig an, weil in ihr physikalisch wichtige Operatoren diagonal sind. Durch Angabe der Eigenwerte der mit H vertauschbaren Operatoren sollte der Zustand des betrachteten Systems weitgehend festgelegt sein

(wir werden später Beispiele angeben, in denen auf diese Weise sogar eine rein algebraische Lösung gelingt). Wenn es mehr als einen solchen mit H vertauschbaren Operator gibt (was oft der Fall ist), muß man jedoch vorsichtig sein. Um zu sehen, worauf es ankommt, nehmen wir an, daß wir zwei solche Operatoren A, B bereits gefunden haben:

$$[H, A] = 0, \quad [H, B] = 0.$$

Mit Hilfe der Jacobi-Identität

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

läßt sich dann leicht zeigen, daß der Kommutator $[A, B]$ ebenfalls mit H vertauschbar (und damit erhalten) ist:

$$[H, [A, B]] = 0$$

(das ist das quantenmechanische Gegenstück zum Satz von Poisson, vgl. M 4.7). Es folgt aber i.a. **nicht**, daß der Kommutator $[A, B]$ verschwindet. Ist er aber von Null verschieden, so kann man kein gemeinsames System von Eigenvektoren für A und B finden. Man kann dann lediglich H und A **oder** H und B simultan diagonalisieren. Um die "beste aller möglichen" Basen zu erhalten, muß man daher einen Satz von Operatoren finden, die mit H und **miteinander** vertauschbar sind und deren Eigenwerte finden. Man hat bei der Suche "nichts vergessen", wenn das entsprechende System von Basiszuständen vollständig ist.

Nun wollen wir den Zusammenhang zwischen Symmetrietransformationen und Erhaltungssätzen herstellen. Die Untersuchung ist analog zu der entsprechenden in der klassischen Theorie, vgl. M 4.9. Wir betrachten als Beispiel Symmetrietransformationen, die stetig von einem Parameter λ abhängen, also eine einparametrische Liegruppe bilden und bezeichnen den unitären Operator, der die Transformation bewirkt, mit $U(\lambda)$. Parametrisieren wir so, daß $\lambda = 0$ der identischen Transformation entspricht $U(0) = \mathbf{1}$, so lautet ein geeigneter Ansatz

$$U(\lambda) = \exp(i\lambda F) \quad \text{mit} \quad F = F^\dagger.$$

Für kleine λ können wir entwickeln

$$U(\lambda) = \mathbf{1} + i\lambda F - \frac{\lambda^2}{2} F^2 + \dots$$

und sehen, daß F die infinitesimale Transformation erzeugt. Für die geänderten Zustände bzw. Operatoren erhalten wir

$$|\psi'\rangle = |\psi(\lambda)\rangle = |\psi(0)\rangle + i\lambda F|\psi(0)\rangle + \dots$$

$$A' = A(\lambda) = A(0) + i\lambda[F, A(0)] - \frac{\lambda^2}{2!}[F, [F, A(0)]] + \dots$$

Bei einer Symmetrietransformation soll sich voraussetzungsgemäß H nicht ändern $H(\lambda) = H(0)$, und zwar für beliebiges λ . Setzen wir $A = H$, so sehen wir aus der Entwicklung, daß das nur der Fall ist, wenn

$$[F, H] = 0$$

ist. Es gibt daher einen selbstadjungierten Operator F , der mit H vertauschbar und daher eine Erhaltungsgröße ist. Die Umkehrung kann genauso gezeigt werden. Liegt ein mit H vertauschbarer Operator F vor, so ist die zugehörige Symmetrietransformation $U(\lambda)$ als exponentieller Operator konstruierbar. Durch Vergleich mit der analogen klassischen Betrachtung (vgl. M 4.9) sieht man, daß $\hbar F$ das quantentheoretische Gegenstück zum klassischen Generator G ist. Außerdem kann man sich davon überzeugen, daß die durch H selbst erzeugte Zeitentwicklung in den Rahmen paßt.

Durch den engen Zusammenhang, der zwischen der Struktur von Liegruppen und ihren Generatoren besteht, ergibt sich auch eine enge Verbindung von Gruppentheorie und Quantenmechanik. Wir werden darauf an geeigneter Stelle zurückkommen. Es muß jedoch darauf hingewiesen werden, daß der Zusammenhang zwischen Symmetrien des Hamiltonoperators und Erhaltungsgrößen auch dann besteht, wenn die Symmetriegruppe keine kontinuierliche Gruppe ist.

Als Beispiel dafür betrachten wir die **Raumspiegelung**. Damit ist eine Transformation gemeint, bei der das Vorzeichen aller Koordinaten umgekehrt (und damit "rechts" und "links" vertauscht) wird. Für ein Teilchen in 3 Dimensionen bedeutet das

$$\mathbf{X} \longrightarrow -\mathbf{X}$$

Für N Teilchen müssen alle Ortskoordinaten umgekehrt werden

$$\mathbf{X}^{(n)} \longrightarrow -\mathbf{X}^{(n)} \quad n = 1, 2, \dots, N$$

(analog bei Verwendung kanonischer statt kartesischer Variablen). Wir betrachten der Einfachheit halber ein Teilchen; die Resultate sind unabhängig von der Zahl der Freiheitsgrade.

Es gibt viele physikalische Systeme, bei denen die Raumspiegelung eine Symmetrietransformation ist, bei denen also der Unterschied zwischen "rechts" und "links" keine Rolle spielt. Wir untersuchen die Konsequenzen der Symmetrie. Wenn es sich um eine solche handelt, muß es einen unitären Operator $U = \mathcal{R}$ geben,

$$\mathcal{R}^\dagger \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{R}^\dagger = \mathbf{1}, \quad \mathcal{R}^{-1} = \mathcal{R}^\dagger$$

der die Transformation bewirkt

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= |\psi \text{ (gespiegelt)}\rangle = \mathcal{R}|\psi\rangle \\ A' &= A(\text{gespiegelt}) = \mathcal{R}A\mathcal{R}^{-1}. \end{aligned}$$

Die Wirkung auf Ortszustände ist daher

$$\mathcal{R}|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle.$$

Zweimalige Anwendung gibt

$$\mathcal{R}^2|\mathbf{x}\rangle = \mathcal{R}|-\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle, \quad \mathcal{R}^2 = \mathbf{1}, \quad \mathcal{R} = \mathcal{R}^{-1}.$$

Da \mathcal{R} außerdem unitär sein soll, ist

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}^\dagger.$$

Die Eigenwerte von \mathcal{R} sind daher reell. Wegen $\mathcal{R}^2 = \mathbf{1}$ gibt es nur die beiden Eigenwerte ± 1

$$\mathcal{R}|\pm\rangle = |\pm\rangle(\pm 1)$$

Zustände mit dem Eigenwert $+1$ (bzw. -1) heißen solche mit gerader (bzw. ungerader) Parität. Bei einer Symmetrietransformation darf sich H nicht ändern:

$$H = \mathcal{R}H\mathcal{R}^\dagger = \mathcal{R}H\mathcal{R}.$$

Durch Multiplikation mit \mathcal{R} erhält man

$$\mathcal{R}H = H\mathcal{R}, \quad [\mathcal{R}, H] = 0.$$

Der Paritätsoperator \mathcal{R} muß also mit H vertauschbar (d.h. erhalten) sein, wenn die Raumspiegelung eine Symmetrietransformation sein soll.

Als Konsequenz muß es möglich sein, H und \mathcal{R} simultan zu diagonalisieren, d.h. die Eigenzustände von H in solche mit gerader/ungerader Parität einzuteilen.

Ist das Verhalten einer physikalischen Größe bei Raumspiegelung bekannt, so kann man Aussagen über seine Vertauschungsrelationen mit \mathcal{R} machen. Für jeden Skalar S ist (vgl. M A1)

$$S \text{ (gespiegelt)} = S$$

und daher

$$\mathcal{R}S\mathcal{R}^{-1} = S \quad \text{oder} \quad [\mathcal{R}, S] = 0.$$

Für jeden Pseudoskalar \hat{S} ist

$$\hat{S} \text{ (gespiegelt)} = -\hat{S}$$

und man erhält

$$[\mathcal{R}, \hat{S}]_+ = \mathcal{R}\hat{S} + \hat{S}\mathcal{R} = 0.$$

Analoge Formeln gelten für jeden polaren Vektor \mathbf{V} bzw. für jeden Axialvektor \mathbf{A}

$$[\mathcal{R}, \mathbf{V}]_+ = 0, \quad [\mathcal{R}, \mathbf{A}] = 0.$$

Diese Formeln gelten unabhängig davon, ob die Raumspiegelung eine Symmetrietransformation ist oder nicht.

Übungen

Für die folgenden Aufgaben ist die in 4.3 skizzierte Quantentheorie eines Teilchens zu betrachten. Mit Hilfe der Heisenbergschen VR ist für die angegebene Transformation der Operator F in der Exponentialform zu finden.

- 20) Verschiebung um einen konstanten Vektor $\mathbf{a} = \lambda \mathbf{e}$, $\mathbf{e}^2 = 1$

$$\mathbf{X}' = \mathbf{X} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{1}, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P}$$

Wie wirkt U auf Ortszustände $\langle \mathbf{x} | U(\mathbf{a}) = \langle ? |$?

- 21) Galileitransformation (\mathbf{a} fester Vektor)

$$\mathbf{X}' = \mathbf{X} + \mathbf{a}t \cdot \mathbf{1}, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P} + m\mathbf{a} \cdot \mathbf{1}$$

- 22) Drehung um eine feste Achse \mathbf{e} ($\mathbf{e}^2 = 1$) um einen Winkel λ

$$\mathbf{X}' = \mathbf{X} \cos \lambda + \mathbf{e}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{X})(1 - \cos \lambda) - \mathbf{e} \times \mathbf{X} \sin \lambda$$

(analog \mathbf{P}).

- 23) Dilatation

$$\mathbf{X}' = \mathbf{X} \exp \lambda, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P} \exp(-\lambda)$$

Im folgenden Beispiel ist die Symmetriegruppe keine Liegruppe, sondern eine diskrete Gruppe. Das Beispiel ist von grundlegender Bedeutung für die Festkörperphysik.

- 24) Ein Teilchen bewegt sich in einem periodischen Potential

$$V(\mathbf{X}) = V(\mathbf{X} + \mathbf{a}\mathbf{1}) = V(\mathbf{X} + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{1}) = \dots$$

Dabei ist \mathbf{a} ein fester Vektor. Die folgenden Aussagen sollen bewiesen werden:

- $\langle \mathbf{x} + \mathbf{a} | \psi \rangle = f \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$, $f = f(\mathbf{a})$ unabhängig von \mathbf{x}
- f ist ein Phasenfaktor $f = \exp(i\phi(\mathbf{a}))$
- $\phi = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa}$ mit einem festen Vektor $\boldsymbol{\kappa}$
- Setzt man $\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\kappa}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x})$, so ist u in \mathbf{x} periodisch mit \mathbf{a} .
- $\boldsymbol{\kappa}$ ist nicht eindeutig. Untersuche die Mehrdeutigkeit.

Der Vektor $\hbar\boldsymbol{\kappa}$ heißt Quasiimpuls. Der Ansatz d) stammt in der Quantentheorie von F. Bloch. In der Theorie der Differentialgleichungen ist der in d) untersuchte Zusammenhang schon viel länger bekannt (Floquet 1883).

5. Einfache Anwendungen

In diesem Kapitel werden einige Anwendungen des Formalismus auf Probleme untersucht, die sich auf die Bewegung eines "Teilchens" in einem Kraftfeld reduzieren lassen. Dabei soll es aber in erster Linie um Methoden und Techniken zur Lösung quantenmechanischer Probleme gehen, die über den betrachteten Problemkreis hinaus anwendbar sind und hier nur am einfachsten denkbaren Fall vorgeführt werden. Die angeschlossenen Übungsbeispiele sollen sowohl die erforderliche Praxis vermitteln, als auch eine Erweiterung des Anwendungsbereiches ermöglichen.

5.1 Zur Reduktion von Freiheitsgraden

Eine verhältnismäßig große Anzahl quantenmechanischer Probleme läßt sich streng oder näherungsweise auf solche mit wenigen Freiheitsgraden zurückführen. Ist diese Anzahl ≤ 3 , so kann man von einem Einteilchenproblem sprechen.

Um einzusehen, wie eine Reduktion in der Anzahl der Freiheitsgrade im Rahmen der Quantentheorie funktionieren kann, betrachten wir zunächst die klassische Hamiltonfunktion eines Systems $A + B$ mit f Freiheitsgraden und identifizieren in ihr die dynamischen Variablen eines Teilsystems A und des Restsystems B

$$(q, p) = (q_A, q_B, p_A, p_B) .$$

Sind die beiden Teile A, B wechselwirkungsfrei, so besteht H aus zwei Teilen der Form

$$H_{kl, A+B} = H_A(q_A, p_A) + H_B(q_B, p_B) .$$

Wenden wir die kanonische Quantelung an, so resultiert für die Hamiltonoperatoren der Teilsysteme

$$[H_A, H_B] = 0 .$$

Die Eigenzustände können als direktes Produkt

$$|\psi_{A+B}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$$

geschrieben werden. Darstellungen faktorisieren als Produkte, z.B.

$$\langle q_A, q_B | \psi_{A+B} \rangle = \langle q_A | \psi_A \rangle \langle q_B | \psi_B \rangle$$

und man kann sich leicht davon überzeugen, daß die Schrödingergleichung in zwei Gleichungen für die Faktoren separiert, daß man also die beiden Teilsysteme A bzw. B getrennt behandeln kann. Der Zusammenhang gilt natürlich auch in umgekehrter Richtung, d.h. man kann durch Addition von miteinander vertauschbaren Hamiltonoperatoren einen Hamiltonoperator für ein Gesamtsystem (ohne Wechselwirkung seiner Teile) aufbauen, dessen Eigenzustände die direkten Produkte der Zustände der entsprechenden Teilsysteme sind.

Ein Beispiel für den Zusammenhang bildet die Wechselwirkung von zwei Teilchen mit Zentralkräften. Transformiert man die klassische Hamiltonfunktion auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (vgl. M 2.5), so erhält man

$$H_{kl} = \frac{1}{2M}(\mathbf{p}_{ges})^2 + \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(r) .$$

Dabei ist M die Gesamtmasse und m die reduzierte Masse. Geht man zur Quantentheorie über, so vertauscht der erste Term mit dem Rest (was man mit den Heisenbergschen VR zwischen den Koordinaten $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}$ und Impulsen $\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(2)}$ der beiden Teilchen auch explizit nachrechnen kann). Die Zustände sind das direkte Produkt von zwei Anteilen. Der eine bezieht sich auf die Schwerpunktsbewegung und ist ein Einteilchenproblem für ein **fiktives** Teilchen mit der **Gesamtmasse** M , das sich frei bewegt:

$$|\psi_A\rangle = |\psi_{SP}\rangle, \quad H_A = \frac{1}{2M}(\mathbf{P}_{ges})^2 .$$

Der Rest $|\psi_B\rangle = |\psi_{rel}\rangle$ beschreibt die Relativbewegung. Der zugehörige Hamiltonoperator entspricht einem Einteilchenproblem für ein **fiktives** Teilchen mit der **reduzierten** Masse m , das sich im Potential V bewegt. Das Beispiel zeigt, daß die Begriffe "Teilchen" bzw. "Masse" für die bei der Reduktion entstehenden Einteilchenprobleme nicht allzu wörtlich genommen werden dürfen: die Reduktion erfolgt i.a. in Termen von **generalisierten** Koordinaten und Impulsen.

Für wechselwirkende Systeme funktioniert die angegebene Reduktion nicht, weil die klassische Hamiltonfunktion einen zusätzlichen Wechselwirkungsterm enthält, der von den Variablen beider Teilsysteme abhängt

$$H_{kl,A+B} = H_A(q_A, p_A) + H_B(q_B, p_B) + H_W(q_A, q_B, p_A, p_B) .$$

Der entsprechende Operator H_W ist i.a. weder mit H_A , noch mit H_B vertauschbar.

Ein Produktansatz für die Eigenzustände stellt in diesem Fall zwar keine Lösung des Problems dar, er kann aber erste Hinweise auf deren Eigenschaften enthalten. Durch geeignete Modifikation kann man daraus eine Ausgangsbasis für ein Näherungsverfahren erhalten. Methoden dieses Typs sollen später untersucht werden.

Eine andere Möglichkeit zur näherungsweise Untersuchung besteht darin, in einem ersten Schritt nur die dynamischen Variablen des einen Systems der Quantelung zu unterwerfen:

$$H_{A+B} \approx H_A(Q_A, P_A) + H_W(Q_A, q_B, P_A, p_B) + H_B(q_B, p_B)\mathbf{1}$$

und für die anderen Variablen Lösungen des klassischen Problems für das System B (ohne Wechselwirkungsterm) zu verwenden. Der letzte Term ändert den quantentheoretischen Hamiltonoperator nur um ein Vielfaches der Einheit. Ohne ihn erhält man einen "effektiven" Hamiltonoperator $H_A + H_W$, der als Bewegung des Systems A in einem durch B bestimmten (vorgegebenen) "äußeren Feld" aufgefaßt werden kann. Der effektive Hamiltonoperator wird jedoch i.a. explizit zeitabhängig sein und es können auch geschwindigkeitsabhängige Potentiale auftreten. Die Bewegung eines geladenen Teilchens in (klassisch behandelten) elektromagnetischen Feldern ist ein Beispiel, auf das wir zurückkommen werden.

Nun konzentrieren wir uns auf Einteilchensysteme. Damit soll gemeint sein, daß die Zahl der Freiheitsgrade für das System A höchstens 3 beträgt. Der (effektive) Hamiltonoperator enthält jedenfalls einen Beitrag der kinetischen Energie, den wir in der Form

$$\frac{1}{2m} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2$$

schreiben können. Die Zahl der möglichen Werte für α ist ≤ 3 . Die Konstante m hat die Dimension einer Masse (es muß sich dabei aber nicht um die Masse eines wirklichen Teilchens handeln). Dazu kommt ein Potentialterm, der i.a. (explizit) zeit- und geschwindigkeitsabhängig sein kann. Insgesamt erhalten wir die Form

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 + V(Q, P, t) .$$

Wie in der klassischen Theorie (vgl. M 1.7 bzw. 1.12) ist es zweckmäßig, dimensionslose Variable \mathcal{Q}, \mathcal{P} zu benutzen. Zu diesem Zweck setzen wir

$$Q_{\alpha} = \lambda \mathcal{Q}_{\alpha} , \quad P_{\alpha} = \frac{\hbar}{\lambda} \mathcal{P}_{\alpha} .$$

Dabei soll die (willkürliche) Konstante λ die Dimension einer Länge haben. Die kanonischen VR erhalten die Form

$$[\mathcal{Q}_{\alpha}, \mathcal{P}_{\beta}] = i\delta_{\alpha\beta} .$$

Der Hamiltonoperator erhält die Form

$$H = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} \left(\sum_{\alpha} \mathcal{P}_{\alpha}^2 + U(\mathcal{Q}, \mathcal{P}, t) \right) =: \mathcal{Y}\mathcal{H}$$

mit

$$U(\mathcal{Q}, \mathcal{P}, t) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V \left(\lambda \mathcal{Q}, \frac{\hbar}{\lambda} \mathcal{P}, t \right) .$$

Die (willkürliche) Konstante \mathcal{Y} soll dabei die Dimension einer Energie haben, sodaß \mathcal{H} dimensionslos ist. Die Skalenkonstanten λ und \mathcal{Y} wird man so wählen, daß \mathcal{H} möglichst einfach ausfällt. Welche Skala in diesem Zusammenhang als "natürliche" Skala anzusehen ist, hängt vom betrachteten System ab. Ein Kriterium ist, daß der wichtigste Term in U einen Zahlenfaktor von der Größenordnung 1 erhält.

Um zu verdeutlichen, was gemeint ist, betrachten wir die Bewegung eines Elektrons in einem Wasserstoffatom. In diesem Fall ist

$$V = -\frac{e^2}{R} \text{ mit } R = |\mathbf{X}| \equiv |\mathbf{Q}| .$$

Wählen wir als Längenskala den Bohrschen Radius

$$\lambda = a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m} = 5.291772 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

und als "natürliche" Energieskala die Rydbergenergie

$$\mathcal{Y} = E_R = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.60575 \text{ eV} ,$$

so erhalten wir

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}^2 - \frac{2}{\mathcal{Q}} \text{ mit } \mathcal{Q} = |\mathcal{Q}|.$$

In den folgenden Anwendungen werden wir meist mit den dimensionslosen Größen $\mathcal{Q}_\alpha, \mathcal{P}_\alpha, \mathcal{H}$ arbeiten, um Anwendungen für verschiedenartige physikalische Probleme mit gleicher mathematischer Struktur möglich zu machen.

5.2 Der harmonische Oszillator

Ein Teilchen, das um eine Ruhelage ($q = 0$) harmonische Schwingungen (Frequenz ω) in einer Richtung ausführen kann, wird durch die klassische Hamiltonfunktion

$$H_{kl} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2$$

beschrieben. Verwenden wir als Skalen

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \gamma = \hbar\omega,$$

so lautet der dimensionslose quantenmechanische Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\mathcal{P}^2 + \mathcal{Q}^2), \quad [\mathcal{Q}, \mathcal{P}] = i\mathbf{1}.$$

Wir bestimmen seine Eigenwerte und Eigenzustände mit einer algebraischen Technik, die für eine große Vielfalt quantentheoretischer Probleme anwendbar ist. Dazu versuchen wir eine Zerlegung von \mathcal{H} in Linearfaktoren. Für vertauschbare \mathcal{Q}, \mathcal{P} würde man eine solche Zerlegung mit

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{Q} + i\mathcal{P}), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{Q} - i\mathcal{P}) \quad \text{bzw.}$$

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \mathcal{P} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger)$$

erhalten. Wegen der kanonischen VR funktioniert das nicht ganz. Man erhält

$$aa^\dagger = \frac{1}{2}(\mathcal{P}^2 + \mathcal{Q}^2 - i[\mathcal{Q}, \mathcal{P}]) = \mathcal{H} + \frac{1}{2}\mathbf{1}$$

bzw. für die andere Reihenfolge

$$N := a^\dagger a = \mathcal{H} - \frac{1}{2} \mathbf{1} .$$

Durch Vergleich der beiden Formeln erhalten wir

$$[a, a^\dagger] = \mathbf{1} .$$

Durch Multiplikation mit a bzw. a^\dagger erhalten wir für den eben eingeführten Operator N

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger , \quad [N, a] = -a .$$

Die gleichen VR gelten für

$$\mathcal{H} = N + \frac{1}{2} \mathbf{1} ,$$

weil der Einheitsoperator mit allen Operatoren vertauschbar ist. Damit läßt sich leicht zeigen, daß a^\dagger bzw. a einen Eigenzustand von \mathcal{H} wieder in einen solchen überführt, wobei sich dabei aber der Eigenwert erhöht bzw. erniedrigt. Ist $|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand mit dem Eigenwert ϵ_n

$$\mathcal{H}|\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle\epsilon_n$$

so ist

$$\mathcal{H}a^\dagger|\psi_n\rangle = (a^\dagger\mathcal{H} + [\mathcal{H}, a^\dagger])|\psi_n\rangle = a^\dagger|\psi_n\rangle(\epsilon_n + 1)$$

$$\mathcal{H}a|\psi_n\rangle = a|\psi_n\rangle(\epsilon_n - 1) .$$

Mit a^\dagger bzw. a kann man also die “Leiter” der Eigenwerte um eine Sprosse hinauf- bzw. hinuntersteigen. Operatoren mit dieser Eigenschaft heißen “Leiteroperatoren” (Aufsteige- oder Erzeugungsoperator a^\dagger , Absteige- oder Vernichtungsoperator a) und sind in vielen Fällen nützlich.

Um alle Eigenwerte zu erhalten, braucht man sich nur zu überlegen, daß \mathcal{H} als Summe von Quadraten selbstadjungierter Operatoren ein “positiver” Operator ist (d.h. keine negativen Eigenwerte haben kann). Es muß daher einen **kleinsten** Eigenwert geben. Wir nennen den entsprechenden Zustand den **Grundzustand** und bezeichnen ihn mit $|0\rangle$. a erniedrigt die Energie jedes Eigenzustands, es gibt aber keinen solchen Zustand mit kleinerer Energie als $|0\rangle$. Daher muß die “Leiter” bei $|0\rangle$ enden:

$$a|0\rangle = 0 .$$

Durch Multiplikation mit a^\dagger erhält man

$$0 = N|0\rangle = \left(\mathcal{H} - \frac{1}{2}\mathbf{1}\right)|0\rangle.$$

Der unterste Eigenwert von \mathcal{H} ist daher $1/2$. Alle weiteren Eigenzustände erhält man aus dem Grundzustand durch ein- oder mehrmalige Anwendung von a^\dagger . Der n te Eigenzustand ist daher mit einem Normierungsfaktor $\lambda(n)$

$$|n\rangle = (a^\dagger)^n|0\rangle\lambda(n), \quad \mathcal{H}|n\rangle = |n\rangle\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Die ganzen Zahlen n sind Eigenwerte des Anzahloperators N (Anzahl der Leitersprossen, vom Grundzustand an gezählt). Die **Energie**eigenwerte sind $\hbar\omega(n + 1/2)$. Man kann das so ausdrücken, daß jeder Operator a^\dagger bzw. a ein "Oszillatorquant" mit der Energie $\hbar\omega$ hinzufügt (erzeugt) bzw. wegnimmt (vernichtet). Im Gegensatz zur klassischen Physik hat der Grundzustand eine endliche Nullpunktsenergie $\hbar\omega/2$.

Nun müssen wir noch den Normierungsfaktor $\lambda(n)$ berechnen. Wir bestimmen ihn so, daß alle Eigenzustände normiert sind:

$$1 = \langle n|n\rangle = \langle n-1|n-1\rangle = \dots = \langle 0|0\rangle.$$

Mit

$$|n\rangle = (a^\dagger)^n|0\rangle\lambda(n) = a^\dagger(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle\lambda(n) = a^\dagger|n-1\rangle\frac{\lambda(n)}{\lambda(n-1)}$$

erhalten wir

$$\langle n|n\rangle = 1 = \left|\frac{\lambda(n)}{\lambda(n-1)}\right|^2 \langle n-1|aa^\dagger|n-1\rangle$$

und das gibt mit

$$\langle n-1|aa^\dagger|n-1\rangle = \langle n-1|N+1|n-1\rangle = (n-1+1)\langle n-1|n-1\rangle = n$$

die Rekursionsformel

$$|\lambda(n)|^2 = \frac{1}{n}|\lambda(n-1)|^2 = \frac{1}{n(n-1)}|\lambda(n-2)|^2 = \dots$$

Mit $\lambda(0) = 1$ erhalten wir

$$\lambda(n) = \frac{1}{\sqrt{n!}}.$$

Insgesamt lauten die Eigenzustände daher

$$|n\rangle = (a^\dagger)^n |0\rangle \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

und es ist

$$a^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle \sqrt{n+1}, \quad a |n\rangle = |n-1\rangle \sqrt{n}, \quad a |0\rangle = 0.$$

Die Orts- bzw. Impulsdarstellung der Eigenzustände ist aus diesen Formeln sehr einfach zu finden. Wir bezeichnen die Eigenwerte der dimensionslosen Operatoren \mathcal{Q} mit \hat{q} (ebenso für \mathcal{P}):

$$\mathcal{Q}|\hat{q}\rangle = |\hat{q}\rangle \hat{q} \quad (\text{Ortsraum}), \quad \mathcal{P}|\hat{p}\rangle = |\hat{p}\rangle \hat{p} \quad (\text{Impulsraum}).$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{q} | \mathcal{P} &= \frac{1}{i} \frac{d}{d\hat{q}} \langle \hat{q} | & \langle \hat{p} | \mathcal{P} &= \hat{p} \langle \hat{p} | \\ \langle \hat{q} | \mathcal{Q} &= \hat{q} \langle \hat{q} | & \langle \hat{p} | \mathcal{Q} &= i \frac{d}{d\hat{p}} \langle \hat{p} | \\ \langle \hat{q} | a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{q} + \frac{d}{d\hat{q}} \right) \langle \hat{q} | & \langle \hat{p} | a &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{p} + \frac{d}{d\hat{p}} \right) \langle \hat{p} | \\ \langle \hat{q} | a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{q} - \frac{d}{d\hat{q}} \right) \langle \hat{q} | & \langle \hat{p} | a^\dagger &= \frac{(-i)}{\sqrt{2}} \left(\hat{p} - \frac{d}{d\hat{p}} \right) \langle \hat{p} | \end{aligned}$$

Aus $a|0\rangle = 0$ erhalten wir

$$\left(\hat{q} + \frac{d}{d\hat{q}} \right) \langle \hat{q} | 0 \rangle = 0 \quad \left(\hat{p} + \frac{d}{d\hat{p}} \right) \langle \hat{p} | 0 \rangle = 0.$$

Die Lösung dieser einfachen Differentialgleichung ist

$$\langle \hat{q} | 0 \rangle = C \exp(-\hat{q}^2/2) \quad \langle \hat{p} | 0 \rangle = D \exp(-\hat{p}^2/2).$$

Die Normierungskonstante C bzw. D erhält man aus $\langle 0|0\rangle = 1$, wobei aber zu beachten ist, daß sich die $\mathbf{1}$ im Ortsraum auf q bzw. im Impulsraum auf $k = p/\hbar$ bezieht:

$$\mathbf{1} = \int |q\rangle dq \langle q| = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int |\hat{q}\rangle d\hat{q} \langle \hat{q}| = \int |k\rangle dk \langle k| = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int |\hat{p}\rangle d\hat{p} \langle \hat{p}|.$$

Damit erhält man

$$C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \quad D = \left(\frac{\hbar}{m\omega\pi} \right)^{1/4} .$$

Für die übrigen Eigenzustände erhält man durch Herausziehen von $(a^\dagger)^n$

$$\begin{aligned} \langle \hat{q} | n \rangle &= \frac{C}{\sqrt{n!} \sqrt{2}^n} \left(\hat{q} - \frac{d}{d\hat{q}} \right)^n \exp(-\hat{q}^2/2) \\ \langle \hat{p} | n \rangle &= \frac{(-i)^n D}{\sqrt{n!} \sqrt{2}^n} \left(\hat{p} - \frac{d}{d\hat{p}} \right)^n \exp(-\hat{p}^2/2) . \end{aligned}$$

Führt man die Differentiation aus, so erhält man die Exponentialfunktion mal einem Polynom n -ten Grades (n -tes Hermitesches Polynom). In dieser Form kann man die Eigenfunktionen auch durch Lösung der Schrödingergleichung als Differentialgleichung 2. Ordnung erhalten, allerdings mit deutlich höherem Arbeitsaufwand.

Da \mathcal{H} mit den Paritätsoperator \mathcal{R} vertauschbar ist, können die Eigenzustände in solche mit gerader bzw. ungerader Parität eingeteilt werden. Aus den angegebenen Eigenfunktionen sieht man sofort, daß Zustände mit geradem (ungeradem) n gerade (ungerade) Parität haben.

Der harmonische Oszillator und insbesondere die Technik der Leiteroperatoren ist von viel größerer Bedeutung, als dies hier erkennbar ist. Verallgemeinerungen vom Typ

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^f \hbar\omega_\alpha (\mathcal{P}_\alpha^2 + \mathcal{Q}_\alpha^2)$$

sind für viele quantenmechanische Systeme ein geeigneter Ausgangspunkt ("wechselwirkungsfreies" System). Die Leiteroperatoren können in diesem Fall für jeden Freiheitsgrad getrennt eingeführt werden. Ihre VR sind

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta} \mathbf{1} .$$

Die physikalische Bedeutung der kanonischen Variablen und die Zahl f der Freiheitsgrade (die auch unendlich sein kann) hängt vom betrachteten Problem ab. Wechselwirkungsterme enthalten jedenfalls die kanonischen Variablen und können daher in Termen von $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$ geschrieben werden. Unter Umständen ist es jedoch zweckmäßiger, vorher durch

kanonische Transformationen neue Leiter- und Anzahloperatoren einzuführen und die Eigenzustände der letzteren zu benützen. In den folgenden Übungen soll die Praxis im Umgang mit Methoden vermittelt werden, die einen großen Anwendungsbereich haben.

Übungen

- 1) Bestimme die Eigenwerte und Eigenzustände für den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = N + \frac{1}{2}\mathbf{1} + \lambda a^\dagger + \lambda^* a .$$

Wie lautet \mathcal{H} in Termen von \mathcal{Q}, \mathcal{P} ?

- 2) Löse die gleiche Aufgabe für

$$\mathcal{H} = N + \frac{1}{2}\mathbf{1} + \lambda(a^\dagger)^2 + \lambda^*(a)^2 .$$

- 3) Bestimme die Eigenwerte und Eigenzustände für den harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\mathcal{P}_1^2 + \mathcal{P}_2^2 + \mathcal{Q}_1^2 + \mathcal{Q}_2^2) .$$

Diskutiere die Entartung der Eigenzustände von N_1, N_2 . Zeige, daß der Operator

$$A_3 = \mathcal{Q}_1\mathcal{P}_2 - \mathcal{Q}_2\mathcal{P}_1$$

mit \mathcal{H} vertauschbar ist. Welche Transformationen erzeugt er? Konstruiere aus a_1, a_2 neue Leiteroperatoren, und mit deren Hilfe simultane Eigenzustände von \mathcal{H} und A_3 . Bestimme die Orts- bzw. Impulsdarstellung der Eigenzustände in Polarkoordinaten.

- 4) Betrachte die Transformation

$$a = u^*b + vb^\dagger$$

mit komplexen Konstanten u, v .

- Wie lautet die Umkehrtransformation?
- Welche Bedingungen müssen u, v erfüllen, damit die Transformation kanonisch ist? Dabei bedeutet "kanonisch", daß die neuen Operatoren b die gleichen Vertauschungsrelationen wie die alten a haben.
- Finde eine möglichst einfache Parametrisierung von u, v , die diese Bedingungen erfüllt.
- Wie transformieren sich \mathcal{Q}, \mathcal{P} ?
- Welche physikalische Bedeutung hat die Transformation für reelle u, v ?

Transformationen diesen Typs wurden von Primakoff, Holstein, Bogoliubov, Pauli, Gürsey u.a. in verschiedenen Gebieten der Physik verwendet.

5) Drücke den Hamiltonoperator

$$H = E_0 \mathbf{1} + E_1 a^\dagger a + \lambda a^2 + \lambda^* a^{\dagger 2}$$

durch die im vorigen Beispiel definierten Operatoren b, b^\dagger aus. u und v sind so zu bestimmen, daß eine der beiden folgenden Bedingungen erfüllt ist:

(a) H ist in den neuen Operatoren diagonal.

(b) Die neue Nullpunktsenergie (Koeffizient von $\mathbf{1}$) ist minimal. Zeige, daß (a) und (b) gleichwertig sind. Wie lautet die Diagonalform von H ?

6) Unitäre Transformationen:

Betrachte eine unitäre Transformation $U(\lambda)$ und ihren Generator

$$U(\lambda) = \exp(-i\lambda G), \quad UU^\dagger = \mathbf{1}, \quad G = G^\dagger$$

deren Wirkung auf einen Oszillatoroperator

$$a' = U(\lambda)aU^\dagger(\lambda)$$

vorgegeben ist. Zu bestimmen ist $\mathcal{Q}', \mathcal{P}'$ und der Generator G in Termen von a, a^\dagger sowie von \mathcal{Q}, \mathcal{P} . Die geometrische Bedeutung der Transformation ist anzugeben. Folgende Beispiele sind zu betrachten:

(a) $a' = a - \lambda/\sqrt{2}$

(b) $a' = a + i\lambda/\sqrt{2}$

(c) $a' = a \exp(i\lambda)$

(d) $a' = a \cosh \lambda - a^\dagger \sinh \lambda$

(e) $a' = a \cosh \lambda + ia^\dagger \sinh \lambda$.

7) $F(a, a^\dagger)$ sei eine aus Potenzprodukten $(a^\dagger)^\alpha a^\beta (a^\dagger)^\gamma \dots$ aufgebaute Funktion. Bestimme folgende Ausdrücke

(a) $[a^\dagger, F]$

(b) $[a, F]$

(c) $\exp(\lambda a^\dagger) F \exp(-\lambda a^\dagger)$

(d) $\exp(\lambda a) F \exp(-\lambda a)$

(e) $\exp(-i\lambda N) F \exp(i\lambda N)$.

8) **Kohärente Zustände** sind definiert durch

$$|z\rangle = T(z)|0\rangle \quad \text{mit} \quad T(z) = \exp(za^\dagger - z^*a)$$

mit einer beliebigen komplexen Zahl $z = \alpha + i\beta$.

Die folgenden Eigenschaften sind zu untersuchen bzw. zu beweisen:

- (a) $\langle z'|z\rangle = ?$
- (b) $|z\rangle = \sum_n |n\rangle c_n$, $c_n = ?$
- (c) $\int_{-\infty}^{+\infty} |z\rangle d\alpha d\beta \langle z| = ?$
- (d) $|z\rangle$ ist Eigenzustand von $F(a)$, Eigenwert? (Dabei ist F eine Funktion von a)
 $\langle z|$ ist Eigenzustand von $F(a^\dagger)$, Eigenwert?
- (e) $|z\rangle$ ist Grundzustand des "verschobenen" Oszillators

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\mathcal{P} - \sqrt{2}\beta)^2 + \frac{1}{2}(\mathcal{Q} - \sqrt{2}\alpha)^2$$

- (f) $\langle z|a = (?)\langle z|$, $\langle z|N = (?)\langle z|$, Verallgemeinerungen?
- (g) Zeitabhängige Zustände $|\Psi(t)\rangle$ zu $\mathcal{H} = N + \frac{1}{2}\mathbf{1}$

$$|\Psi(t)\rangle = |(?z)\rangle .$$

Es ist nützlich, den Exponenten von T in Termen von \mathcal{Q}, \mathcal{P} auszudrücken und T als Produkt von exponentiellen Operatoren zu schreiben, deren Exponenten linear in a bzw. a^\dagger oder \mathcal{P} bzw. \mathcal{Q} sind.

Die kohärenten Zustände sind in vielen Bereichen der Physik anwendbar.

9) Das Jaynes-Cummings-Modell.

Ein Zweizustandssystem soll mit einem harmonischen Oszillator in Wechselwirkung treten. Die Oszillatorenergie $\hbar\omega$ soll mit dem Energieunterschied der Niveaus des Zweizustandssystems übereinstimmen. Die Wechselwirkung soll so beschaffen sein, daß beim Übergang vom unteren zum oberen Zweizustandsniveau eine Abnahme der Oszillatorenergie um $\hbar\omega$ erfolgt und beim Übergang vom oberen zum unteren Niveau eine entsprechende Zunahme. Bestimme den Hamiltonoperator sowie seine Eigenwerte und Eigenzustände. Untersuche die Anordnung der Eigenwerte in Abhängigkeit von der Stärke der Kopplung zwischen Oszillator und Zweizustandssystem.

Dieses Problem ist ein Modell für Resonanzvorgänge bei der Wechselwirkung von Molekülen mit elektromagnetischer Strahlung. Das Molekül ist durch ein Zweizustandssystem ersetzt, den Photonen des Strahlungsfeldes entsprechen die Oszillatorquanten (d.h. es wird in dem Modell nur Strahlung mit einer einzigen Frequenz ω betrachtet). Das Modell läßt sich auf N Zweizustandssysteme erweitern.

10) Betrachte den Oszillator

$$H(t) = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}Q^2 + f(t)Q$$

mit einer beliebigen gegebenen Funktion $f(t)$ (kein Operator). Zur Anfangszeit $t = 0$ sei $f(0) = 0$ und der Oszillator befinde sich im Grundzustand. Berechne die Übergangswahrscheinlichkeit in den n -ten angeregten Zustand zur Zeit $t > 0$.

$f(t)$ entspricht einer zeitabhängigen, äußeren Kraft, die auf das "Teilchen" wirkt. Für harmonische Zeitabhängigkeit entspricht das der Problemstellung einer erzwungenen Schwingung. Es können aber auch ganz andere Formen für f betrachtet werden.

11) Betrachte einen harmonischen Oszillator mit zeitabhängiger Masse und Federkonstante (sog. parametrisierter Oszillator)

$$H(t) = \frac{1}{2m(t)}P^2 + \frac{k^2(t)}{2}Q^2$$

Zur Anfangszeit $t = 0$ ($m(0) = m_0, k(0) = k_0$) soll sich der Oszillator im Grundzustand von $H(0)$ befinden. Berechne die Übergangswahrscheinlichkeit in den n -ten Anregungszustand von $H(0)$ zur Zeit $t > 0$.

Für die Lösung sind die Ergebnisse der Beispiele 4-6 und 8 von Nutzen.

Die Beispiele 10 und 11 gehören zu den wenigen streng lösbaren Problemen der nichtstationären Quantentheorie. In beiden Fällen sind Verallgemeinerungen möglich.

5.3 Quantentheorie von Drehimpulsen

Der Bahndrehimpuls eines klassischen Teilchens, das sich auf einer durch $\mathbf{x}(t)$ beschriebenen Bahn mit dem Impuls $\mathbf{p}_{kin}(t) = m\dot{\mathbf{x}}(t)$ bewegt, ist durch $\mathbf{x} \times \mathbf{p}_{kin}$ gegeben. Verwendet man generalisierte Koordinaten (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , so entspricht der Ausdruck $\mathbf{q} \times \mathbf{p}$ dem kanonischen Gegenstück; bei geschwindigkeitsabhängigen Kräften unterscheidet sich der kanonische Impuls \mathbf{p} vom kinetischen \mathbf{p}_{kin} und die entsprechenden Bahndrehimpulse spielen nicht die gleiche Rolle. Wir betrachten hier den kanonischen Ausdruck und untersuchen den zugehörigen quantenmechanischen Operator

$$\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P} = \hbar(\mathbf{Q} \times \mathbf{P}) .$$

Dieser Operator ist der Generator von Drehungen im Raum der kanonischen Koordinaten (vgl. dazu das Übungsbeispiel 4.22, in dem das für $\mathbf{Q} = \mathbf{X}$ untersucht wurde). Eine Drehung um eine feste Achse $\mathbf{e}(\mathbf{e}^2 = 1)$ um den Winkel λ bedeutet

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}' &= \mathbf{Q} \cos \lambda + \mathbf{e}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{Q})(1 - \cos \lambda) - \mathbf{e} \times \mathbf{Q} \sin \lambda \\ &= \mathbf{Q} - \lambda(\mathbf{e} \times \mathbf{Q}) + \dots \end{aligned}$$

Die unitäre Transformation $U = \exp(i\lambda F)$ führt zu

$$\mathbf{Q}' = U\mathbf{Q}U^\dagger = \mathbf{Q} + i\lambda[F, \mathbf{Q}] + \dots$$

Vergleicht man die Koeffizienten von λ

$$i[F, \mathbf{Q}] = -\mathbf{e} \times \mathbf{Q}$$

so kann man sich mit Hilfe der kanonischen VR davon überzeugen, daß diese Beziehung mit

$$F = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{e} \cdot (\mathbf{Q} \times \mathbf{P}) = -\mathbf{e} \cdot (\mathbf{L}/\hbar)$$

erfüllt ist. Jede Komponente $L_k (k = 1, 2, 3)$ erzeugt daher eine Drehung um die entsprechende Koordinatenachse. Die VR

$$[L_k, Q_l] = i\hbar \epsilon_{klm} Q_m \quad (k, l, m = 1, 2, 3)$$

drückt daher das Verhalten der Komponente Q_l des Vektors \mathbf{Q} bei einer infinitesimalen Drehung um die k -Achse aus. Man kann sie aus der für F angegebenen Relation durch Spezialisierung von \mathbf{e} erhalten (oder

auch mit den kanonischen VR nachrechnen). Die erstere Möglichkeit ist verallgemeinerungsfähig. Jeder Vektor \mathbf{A} verhält sich definitionsgemäß bei Drehungen wie \mathbf{Q} . Die angegebenen VR müssen daher für **jeden** Operator \mathbf{A} gelten, dessen drei Komponenten A_k sich bei Drehungen als **Vektor** transformieren (sog. Vektoroperator):

$$[L_k, A_l] = i\hbar\epsilon_{klm}A_m .$$

Ein notorisches Beispiel ist $\mathbf{A} = \mathbf{P}$; in diesem Fall kann man die VR auch direkt aus den kanonischen VR finden. Für kompliziertere Bildungen aus (\mathbf{Q}, \mathbf{P}) ist das weniger einfach.

Da sich ein **Skalar** S bei Drehungen definitionsgemäß **nicht** ändert, folgt mit der gleichen Schlußweise

$$[L_j, S] = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \quad \text{also} \quad [\mathbf{L}, S] = 0$$

für jeden skalaren (oder pseudoskalaren) Operator S . Für jedes Einteilchenproblem, dessen Hamiltonoperator H bei Drehungen invariant ist, vertauscht \mathbf{L} mit H und ist daher eine Erhaltungsgröße.

Der Drehimpuls \mathbf{L} selbst transformiert sich bei Drehungen als Vektor, sein Quadrat \mathbf{L}^2 als Skalar. Daher ist

$$[L_k, L_l] = i\hbar\epsilon_{klm}L_m , \quad [L_k, \mathbf{L}^2] = 0 .$$

Der mathematische Inhalt dieser Relationen sind Aussagen über die Struktur der Drehgruppe in drei Dimensionen: verwendet man überall den dimensionslosen Operator $\mathbf{L}/\hbar = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$, so fällt \hbar heraus und man erhält die Relationen der entsprechenden Liealgebra. Für die Physik ist bedeutsam, daß man die einzelnen Komponenten von \mathbf{L} nicht simultan diagonalisieren kann, weil sie miteinander nicht vertauschbar sind. Für drehinvariante Probleme bilden hingegen \mathbf{L}^2 , eine bestimmte Komponente von \mathbf{L} (z.B. L_3) und H ein System vertauschbarer Operatoren.

Die angegebenen VR gelten nicht nur für den Bahndrehimpuls. Definieren wir für ein Teilchen mit Spin 1/2 (vgl. Abschnitt 3.2) einen Spindrehimpuls durch

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

so erfüllen seine Komponenten untereinander dieselben VR. Dieser allgemeine Charakter läßt es angebracht erscheinen, die Eigenwerte und

Eigenzustände für einen allgemeinen (dimensionslosen) Drehimpulsoperator \mathbf{J} zu suchen, der den VR

$$[J_k, J_l] = i\epsilon_{klm}J_m, \quad [J_k, \mathbf{J}^2] = 0$$

genügt (man darf dabei an $\mathbf{L}/\hbar, \mathbf{S}/\hbar$ oder geeignete Verallgemeinerungen denken). Da die Komponenten von \mathbf{J} untereinander nicht vertauschen, suchen wir simultane Eigenzustände von J_3 und

$$\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2.$$

Wir zerlegen den “unangenehmen” ersten Teil von \mathbf{J}^2 in Linearfaktoren. Das gelingt mit Hilfe der Operatoren

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2.$$

Ihr Produkt

$$\begin{aligned} J_+J_- &= J_1^2 + J_2^2 + i[J_2, J_1] = \mathbf{J}^2 - J_3^2 + J_3 \\ J_-J_+ &= \mathbf{J}^2 - J_3^2 - J_3 \end{aligned}$$

unterscheidet sich von $J_1^2 + J_2^2$ nur um diagonale Terme. Durch Auflösen dieser Gleichungen erhält man die Zerlegung

$$\mathbf{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2.$$

Aus den VR der Drehimpulskomponenten erhält man

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2J_3, \quad [\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = 0.$$

Die Bildung von Kommutatoren führt daher aus der Algebra der Operatoren $(\mathbf{J}^2, J_3, J_{\pm})$ nicht heraus. Aus den VR sieht man, daß J_+ bzw. J_- den Eigenwert von J_3 um eine Einheit erhöht bzw. erniedrigt (vgl. den im vorhergehenden Abschnitt betrachteten Oszillator), ohne die Eigenwerte von \mathbf{J}^2 zu ändern. Die Eigenwerte und Eigenzustände lassen sich mit Hilfe der VR algebraisch bestimmen. Es gibt dafür eine besonders einfache Methode, die relativ wenig bekannt ist. Die Grundidee stammt von J.v. Neumann und E. Wigner. Später hat sie J. Schwinger zu einer perfekten Technik entwickelt, mit der man auch Probleme aus der Quantenmechanik von Drehimpulsen lösen kann, die anders nicht bewältigt werden können. Im Grund beruht die Methode darauf, eine ebene Drehung aus zwei zueinander senkrechten, harmonischen

Schwingungen zusammensetzen (vgl. dazu Beispiel 3 aus dem vorigen Abschnitt). Wir betrachten zwei unabhängige Oszillatoroperatoren a_i ($i = 1, 2$) mit den VR

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad , \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$$

und konstruieren mit ihrer Hilfe orthogonale und normierte Oszillatorzustände

$$|n_1, n_2, \text{Osz}\rangle := (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0, \text{Osz}\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots)$$

mit

$$a_1 |0, \text{Osz}\rangle = a_2 |0, \text{Osz}\rangle = 0 \quad .$$

Diese Zustände sind simultane Eigenzustände der beiden vertauschbaren Operatoren

$$N_1 = a_1^\dagger a_1 \quad , \quad N_2 = a_2^\dagger a_2 \quad , \quad [N_1, N_2] = 0 \quad .$$

Wir identifizieren bilineare Ausdrücke in a_i, a_i^\dagger mit den Drehimpulsoperatoren. Setzen wir

$$\begin{aligned} J_3 &= \frac{1}{2}(N_1 - N_2) \\ J_+ &= a_1^\dagger a_2 \quad , \quad J_- = a_2^\dagger a_1 \quad , \end{aligned}$$

so sind die VR der Drehimpulskomponenten erfüllt. Für \mathbf{J}^2 erhält man nach kurzer Rechnung

$$\mathbf{J}^2 = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \quad ,$$

wobei

$$N = N_1 + N_2$$

ist. Die Zustände $|n_1, n_2, \text{Osz}\rangle$ sind daher simultane Eigenzustände von \mathbf{J}^2 und J_3 . Der Zusammenhang zwischen Drehimpulskomponenten und Oszillatoroperatoren wird besonders durchsichtig, wenn man eine Matrixschreibweise benützt. Man kann sich davon überzeugen, daß \mathbf{J} in der Form

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 a_i^\dagger (\boldsymbol{\sigma})_{ij} a_j$$

geschrieben werden kann, wobei σ die Paulimatrizen sind. Ein Oszillatorquant der Sorte 1 (das durch a_1^\dagger hinzugefügt und durch a_1 weggenommen wird) entspricht einer halben Drehimpulseinheit in der positiven 3-Richtung, ein Oszillatorquant der Sorte 2 entspricht einer halben Drehimpulseinheit in der negativen 3-Richtung.

Anstelle der Klassifizierung der Zustände durch n_1, n_2 ist eine solche durch Zahlen

$$j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2), \quad m = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)$$

besser. Wir benützen von nun an diese Klassifizierung und verwenden die Zustände

$$|j, m\rangle := (a_1^\dagger)^{j+m} (a_2^\dagger)^{j-m} |0, \text{Osz}\rangle \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}},$$

$$|0, 0\rangle = |0, 0, \text{Osz}\rangle.$$

Die Eigenwerte von \mathbf{J}^2 und J_3 sind aus

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = |j, m\rangle j(j+1), \quad J_3 |j, m\rangle = |j, m\rangle m$$

abzulesen. Die möglichen Werte der Zahl j sind

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Für festes j kann m die $(2j+1)$ Werte

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

annehmen. Die Drehimpulszustände bilden daher für festes j ein System mit $(2j+1)$ Zuständen (vgl. Abschnitt 3.1). Die früher eingeführte Benennung ‘‘Spin j ’’ bezieht sich also auf den Wert der Quantenzahl j .

Mit Hilfe unserer expliziten Konstruktion lassen sich viele Rechnungen der ‘‘Drehimpulsgymnastik’’ einfach durchführen, wenn man den Formalismus der Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators beherrscht. Beispiele sind die Zahlenfaktoren in

$$J_\pm |j, m\rangle \sim |j, m \pm 1\rangle$$

oder in

$$|j, m\rangle \sim (J_+)^{j+m} |j, -j\rangle \sim (J_-)^{j-m} |j, j\rangle.$$

Damit kann man für festes j einen Zustand mit bestimmtem m aus demjenigen mit dem kleinsten bzw. größten möglichen Wert dieser Quantenzahl herstellen (also aus dem zur untersten bzw. obersten Leitersprosse). Diese Formeln könnte man auch ohne Oszillatorformalismus finden.

Die analoge Konstruktion bezüglich j ist mit dem Oszillatorformalismus genau so einfach, ohne diesen aber hoffnungslos kompliziert. Um sie zu finden, brauchen wir nur auf die Bedeutung der a_i zurückzugreifen. Offenbar erhalten wir die gewünschte Änderung von j um eine Einheit, wenn wir ein Quant der Sorte 1 und eines der Sorte 2 hinzufügen bzw. wegnehmen. Wir untersuchen daher die Operatoren

$$K_+ = a_1^\dagger a_2^\dagger, \quad K_- = a_1 a_2, \quad K_3 = \frac{1}{2}(N_1 + N_2 + 1).$$

Ihre VR sind

$$\begin{aligned} [J_3, K_\pm] &= [J_3, K_3] = 0 \\ [K_3, K_\pm] &= \pm K_\pm, \quad [K_+, K_-] = -2K_3. \end{aligned}$$

Außerdem ist

$$J_3^2 = K_3^2 - \frac{1}{2}(K_+ K_- + K_- K_+) + \frac{1}{4}.$$

Die Zahlfaktoren in

$$K_\pm |j, m\rangle \sim |j \pm 1, m\rangle \text{ bzw. } |j, m\rangle \sim K_+^{j-|m|} ||m\rangle, m\rangle$$

findet man wieder mit einfacher "Oszillatorgymnastik". Für Anwendungen dieser Technik vgl. die Übungen.

Aus der Konstruktion mit K_+ ist direkt abzulesen, daß dabei die ganzzahligen bzw. halbzahligen Werte von j nicht vermischt werden, weil die Erhöhung nur in ganzzahligen Schritten erfolgt. Der kleinste Wert für j ist $j = 0$. Der einzige mögliche Eigenzustand ist $|0, 0\rangle$. Der Operator K_- führt diesen Zustand in 0 über:

$$K_- |0, 0\rangle = 0.$$

Durch Anwenden von K_+ erhält man $|1, 0\rangle$ und durch Anwenden von J_\pm die anderen beiden Zustände $|1, \pm 1\rangle$ zu $j = 1$. Zweimalige Anwendung von K_+ auf $|0, 0\rangle$ führt zu $|2, 0\rangle$ usw. Der kleinste halbzahlige Wert für j ist $j = 1/2$, die beiden zugehörigen Eigenzustände sind

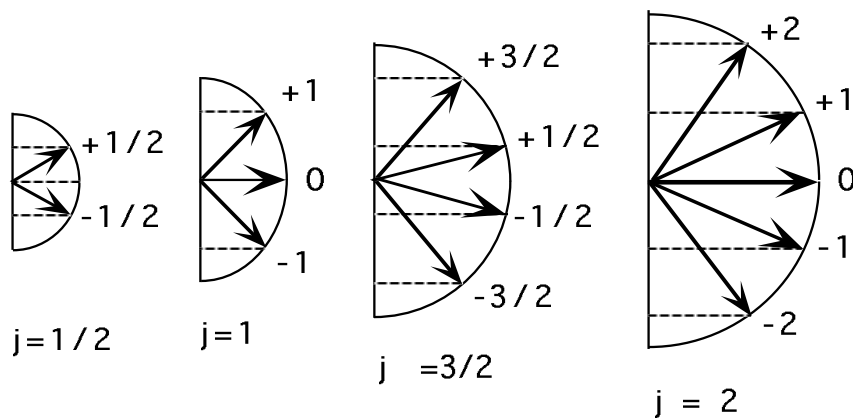
$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = a_1^\dagger |0, 0\rangle \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = a_2^\dagger |0, 0\rangle .$$

Beide werden durch K_- in 0 übergeführt. Durch Anwendung von K_+ erhält man $|3/2, \pm 1/2\rangle$ und daraus mit J_\pm die übrigen Zustände zu $j = 3/2$. Anwendung von K_+^2 führt zu $j = 5/2$ usw. Eine Konsequenz ist, daß wir für den **Bahndrehimpuls** (d.h. für $\mathbf{J} = \mathbf{L}/\hbar$) nur ganzzahlige Werte für die Quantenzahlen erhalten, weil Systeme ohne Bahndrehimpuls ($\mathbf{L} = 0$) und ohne Spin physikalisch möglich sind. Die ganzzahlige Quantelung von Bahndrehimpulsen entspricht der Erfahrung. Wir werden die Quantenzahl zu \mathbf{L}^2 mit l bezeichnen ($l = 0, 1, 2, \dots$). Die Quantenzahl zu L_3 nennen wir weiterhin m . Wenn Verwechslungen möglich sind, schreiben wir m_l bzw. m_j . Wo Verwechslungen mit einer Masse möglich sind, verwenden wir für diese einen anderen Buchstaben.

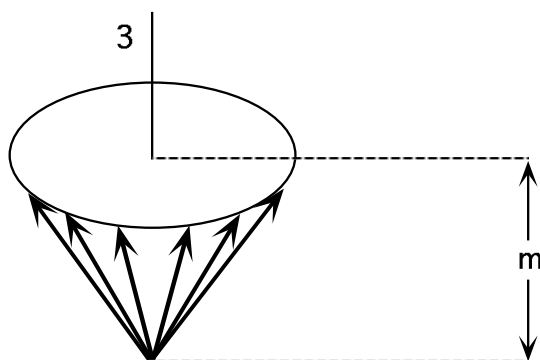
Als wichtigstes Resultat der Quantentheorie halten wir fest, daß der Drehimpuls (anders als in der klassischen Theorie) nicht jeden beliebigen Wert annehmen kann. Wegen der Nichtvertauschbarkeit der Komponenten ist es nur möglich, \mathbf{J}^2 und eine Komponente gleichzeitig scharf zu messen. Als diese Komponente haben wir J_3 gewählt. Die Richtung der 3-Achse (die Quantisierungsrichtung) ist durch die Drehimpulsalgebra nicht festgelegt. Im Sinn der Interpretation der Algebra als Meßalgebra ist sie als die Richtung aufzufassen, nach welcher der 3-Analysator analysiert (vgl. Abschnitt 3.1). Daß die anderen Komponenten von \mathbf{J} unscharf sind, kann man leicht einsehen. Aus der Wirkung von J_\pm auf $|j, m\rangle$ und der Orthogonalität sieht man, daß

$$\langle j, m | J_1 | j, m \rangle = \langle j, m | J_2 | j, m \rangle = 0$$

ist. Die Erwartungswerte der Quadrate (und damit die Schwankungsquadrate) sind hingegen von Null verschieden (vgl. Übungen). Eine anschauliche, graphische Darstellung dieses Zusammenhanges gibt das Diracsche Vektormodell. Dazu zeichnen wir einen Halbkreis mit dem Radius $\sqrt{j(j+1)}$ und schneiden ihn mit Parallelen zur Horizontalen im Abstand m . Die Vertikale entspricht dann der 3-Achse und die Schnittpunkte mit dem Kreis geben die möglichen Lagen von \mathbf{J} an.



Da die Komponenten J_1, J_2 nicht scharf sind, muß man sich vorstellen, daß der Vektor \mathbf{J} alle Einstellrichtungen haben kann, die durch Rotation der oben gezeichneten Figur um die 3-Achse entstehen. Für einen festen Wert von m liegen diese Richtungen auf einem Kegelmantel:



Das ist zwar nur ein Modell (“in Wirklichkeit” ist \mathbf{J} ein Operator), aber man kann daraus doch die relevanten Zusammenhänge ablesen. So kann man z.B. einsehen, daß J_1 und J_2 auch dann von Null verschieden sind, wenn die 3-Komponente ihren maximalen bzw. minimalen Wert annimmt, d.h. für $j = \pm m$. In der klassischen Physik nimmt J_3 den Maximal- bzw. Minimalwert an, wenn der Drehimpuls parallel bzw. antiparallel zur 3-Achse gerichtet ist.

Übungen

12) Vereinfache den Operator $\mathbf{J} \times \mathbf{J}$. Welche Eigenzustände hat er?

13) Berechne die Zahlenfaktoren c_{\pm}, f_{\pm} in

$$\begin{aligned} J_{\pm}|j, m\rangle &= |j, m \pm 1\rangle c_{\pm}(j, m) \\ |j, m\rangle &= (J_+)^{j+m}|j, -j\rangle f_+(j, m) \\ &= (J_-)^{j-m}|j, j\rangle f_-(j, m). \end{aligned}$$

14) Berechne die Zahlenfaktoren d_{\pm}, g in

$$\begin{aligned} K_{\pm}|j, m\rangle &= |j \pm 1, m\rangle d_{\pm}(j, m) \\ |j, m\rangle &= (K_+)^{j-|m|}|m, m\rangle g(j, m). \end{aligned}$$

15) Berechne $\langle j, m|J_1^2|j, m\rangle$.

16) \mathbf{A}, \mathbf{B} seien miteinander vertauschbare Vektoroperatoren. Beweise die Formel

$$[\mathbf{L} \cdot \mathbf{A}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}] = -i\hbar \mathbf{L} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}).$$

17) Für jeden Vektoroperator \mathbf{A} ist es nützlich, die Kombinationen

$$A_{\pm} = A_1 \pm iA_2$$

zu betrachten. Berechne die folgenden Kommutatoren:

$$\begin{aligned} [L_3, A_3], \quad [L_+, A_+], \quad [L_-, A_-] \\ [L_3, A_{\pm}], \quad [L_{\pm}, A_3], \quad [L_+, A_-] \\ [L_-, A_+]. \end{aligned}$$

18) Berechne die Kommutatoren

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{A}], \quad [\mathbf{L}^2, A_{\pm}], \quad [\mathbf{L}^2, A_3].$$

19) Zeige, daß \mathbf{J}^2 mit $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{A})$ vertauschbar ist

20) Beweise die Relation

$$[(\mathbf{J}^2)^2, \mathbf{A}]_+ - 2\mathbf{J}^2 \mathbf{A} \mathbf{J}^2 - 2[\mathbf{J}^2, \mathbf{A}]_+ + 4\mathbf{J}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}) = 0$$

Dabei bedeutet $[\cdot, \cdot]_+$ den Antikommutator

$$[B, C]_+ := B \cdot C + C \cdot B$$

- 21) Die Matrixelemente $\langle l', m' | \mathbf{A} | l, m \rangle$ eines Vektoroperators zwischen Drehimpulseigenzuständen sind bei festem l, m nur für wenige Werte l', m' von Null verschieden. Die entsprechende Beziehung zwischen den Quantenzahlen heißt "Auswahlregel": der Vektoroperator wählt von allen möglichen Übergängen zwischen den Zuständen nur solche aus, die der Regel entsprechen. Finde die Auswahlregel $m' - m$ für

$$\langle l', m' | A_3 | l, m \rangle \quad \text{bzw.} \quad \langle l', m' | A_{\pm} | l, m \rangle .$$

- 22) Durch Anwendung eines Vektoroperators \mathbf{A} auf $|l, m\rangle$ entsteht i.a. kein Eigenzustand von \mathbf{L}^2 . Die einzigen Ausnahmen sind

$$A_+ |l, l\rangle \sim |l', m'\rangle \quad \text{bzw.} \quad A_- |l, -l\rangle \sim |l'', m''\rangle .$$

Bestimme l', m', l'', m'' .

- 23) Betrachte ein rotationssymmetrisches Einteilchenproblem:

$$[H, \mathbf{L}] = 0, \quad \mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P} .$$

Die Eigenwerte E_n von H

$$H |E_n, l, m\rangle = |E_n, l, m\rangle E_n$$

könnten allgemein von l, m abhängen $E_n = E_n(l, m)$. Zeige, daß sie in Wirklichkeit von m nicht abhängen und interpretiere diese Tatsache physikalisch.

- 24) Betrachte einen rotierenden starren Körper als quantenmechanisches System. Bestimme die Eigenzustände und Eigenwerte
 a) für einen Kugelkreisel, b) für einen symmetrischen Kreisel.
- 25) Ein Teilchen soll so an eine Ruhelage gebunden sein, daß es harmonische Schwingungen in der 1,2-Ebene ausführen kann. Die Federkonstanten für die Schwingungen in der 1- bzw. 2-Richtung sollen gleich groß sein (vgl. Beispiel 3). Das System soll außerdem starr um die 3-Achse rotieren (Trägheitsmoment I). Bestimme Eigenzustände und Eigenwerte der Energie. Diskutiere die Lage der untersten 11 Energieniveaus für verhältnismäßig großes Trägheitsmoment.

5.4 Ergänzungen zur Drehimpulstheorie

Als erste Ergänzung betrachten wir die Orts- bzw. Impulsdarstellung der Eigenzustände des Bahndrehimpulses eines Teilchens. Zur Abwechslung verwenden wir gewöhnliche (nicht generalisierte) Koordinaten (mit generalisierten Koordinaten geht alles analog):

$$\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P} .$$

In beiden Darstellungen erhält man dabei die gleichen Funktionen. Das ist leicht einzusehen, wenn man Kugelkoordinaten einführt. Dazu schreiben wir die entsprechenden Vektoren \mathbf{x} bzw. \mathbf{k} als Produkt von Betrag und Richtung

$$\mathbf{x} = r\mathbf{e}_{(x)}, \quad r = |\mathbf{x}|, \quad e_{(x)}^2 = 1, \quad \mathbf{k} = k\mathbf{e}_{(k)}, \quad k = |\mathbf{k}|, \quad e_{(k)}^2 = 1 .$$

In Polarkoordinaten hat der Einheitsvektor \mathbf{e} die Komponenten

$$\mathbf{e} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$$

wobei θ, φ die Winkel mit der entsprechenden 3-Achse (für $\mathbf{e}_{(x)}$ mit der x_3 -Achse, für $\mathbf{e}_{(k)}$ mit der k_3 -Achse) sind. Statt durch r und $\mathbf{e}_{(x)}$ können wir die Eigenzustände auch durch r, θ, φ charakterisieren (analog für k). Eine gemeinsame Schreibweise für beide Fälle ist

$$|\cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot)\rangle \equiv |\cdot, \mathbf{e}_{(\cdot)}\rangle .$$

Der Punkt steht dabei für r bzw. k , θ und φ bedeuten die entsprechenden Winkel. Rechnet man die Wirkungsweise der Operatoren \mathbf{X}, \mathbf{P} auf die Zustände (vgl. Abschnitt 4.3) in Polarkoordinaten aus, so erhält man

$$\begin{aligned} \langle \cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot) | L_3 | \cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot) \rangle &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi(\cdot)} \langle \cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot) | \\ \langle \cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot) | L_{\pm} &= \\ &= \hbar \exp(\pm i\varphi(\cdot)) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta(\cdot)} + i \cot \theta(\cdot) \frac{\partial}{\partial \varphi(\cdot)} \right) \langle \cdot, \theta(\cdot), \varphi(\cdot) | . \end{aligned}$$

Offenbar resultieren in der Orts- bzw. Impulsdarstellung die gleichen Formeln. Wir lassen daher den Punkt weg (eine Unterscheidung der Winkel ist nur dann notwendig, wenn in einer Formel beide Darstellungen vorkommen). Um alle Eigenfunktionen für einen festen Wert l zu erhalten, beginnen wir mit dem niedrigsten Zustand $|l, -l\rangle$ und bauen

alle anderen daraus durch wiederholte Anwendung von L_+ auf. Für den untersten Zustand ist

$$L_3|l, -l\rangle = |l, -l\rangle(-\hbar l), \quad L_-|l, -l\rangle = 0.$$

Multiplikation mit $\langle\theta, \varphi|$ und Herausziehen als Differentialoperator gibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\varphi}\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle &= -il\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle \\ \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Die erste Gleichung hat als Lösung $\exp(-il\varphi)$, aus der zweiten erhält man damit einen zusätzlichen Faktor $(\sin\theta)^l$, insgesamt also

$$\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle = C_l \sin^l\theta \exp(-il\varphi).$$

Den Normierungsfaktor C_l bestimmen wir so, daß bei Integration über die Kugeloberfläche 1 resultiert:

$$\int d\Omega |\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |\langle\theta, \varphi|l, -l\rangle|^2 = 1.$$

Das gibt

$$C_l = \frac{1}{l!2^l} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}.$$

Für jeden anderen Wert von m erhält man durch wiederholte Anwendung von L_+ und Herausziehen als Differentialoperator

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &:= \langle\theta, \varphi|l, m\rangle = \\ &= \frac{1}{l!2^l} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \left(\exp(i\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right)^{l+m} \\ &\quad \cdot \exp(-il\varphi) \sin^l\theta. \end{aligned}$$

Diese Funktionen, die man durch Differenzieren explizit berechnen kann, sind die (normierten) Kugelflächenfunktionen. Ihre Orthogonalitätsrelationen sind leicht abzulesen:

$$\begin{aligned} \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} &= \langle l, m|l', m'\rangle = \int \langle l, m|\theta, \varphi\rangle d\Omega \langle\theta, \varphi|l', m'\rangle \\ &= \int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega. \end{aligned}$$

Dabei ist $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ das Flächenelement auf der Kugel mit dem Radius 1. Sind (θ, φ) bzw. (θ', φ') Winkel, die sich auf **dieselbe** Basis beziehen, so lautet die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = \delta(\cos\theta' - \cos\theta) \delta(\varphi' - \varphi) = \delta(\Omega' - \Omega).$$

Die Parität der Zustände $|l, m\rangle$ läßt sich leicht bestimmen, wenn man beachtet, daß in Polarkoordinaten

$$\mathbf{x} \longrightarrow -\mathbf{x} \quad r \longrightarrow r, \quad \theta \longrightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \longrightarrow \varphi + \pi$$

bedeutet. Daher ist

$$\begin{aligned} \langle \theta, \varphi | \mathcal{R} | l, m \rangle &= \langle \pi - \theta, \varphi + \pi | l, m \rangle = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = \\ &= (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

(die letzte Beziehung kann man entweder rekursiv erhalten oder aus der oben angegebenen Formel ablesen). Die Parität der Drehimpulszustände ist daher $(-1)^l$:

$$\mathcal{R} | l, m \rangle = | l, m \rangle (-1)^l.$$

Die Y_{lm} erfüllen eine Reihe von Beziehungen (z.B. Rekursionsformeln), von denen man die meisten mit Hilfe der im vorhergehenden Abschnitt entwickelten "Drehimpulsgymnastik" algebraisch herleiten kann. Fortschritte in der Entwicklung von Computerprogrammen zur symbolischen (nichtnumerischen) Rechnung führen dazu, daß man die Fertigkeit im Umgang mit solchen Formeln in wachsendem Ausmaß dem Computer überlassen kann. Das Programm "Mathematica" enthält z.B. die Y_{lm} als Standardbestandteil und man kann damit zusammenhängende Formeln abfragen bzw. mit ihnen rechnen. Natürlich ist es auch ohne besonderen Aufwand möglich, numerische Werte oder graphische Darstellungen zu erhalten. Wir verzichten daher auf weitere Einzelheiten.

Als nächste Ergänzung untersuchen wir eine Basis, die eine Alternative zur Orts- bzw. Impulsbasis darstellt und für viele Probleme eine zweckmäßige Analyse ermöglicht. Sie besteht aus den nach den Eigenwerten von Energie und Drehimpuls klassifizierten Zuständen eines freien Teilchens. Wir betrachten den Hamiltonoperator eines freien Teilchens $H = \mathbf{P}^2/2m$ und schreiben seine Eigenwerte in der Form

$E = (\hbar\kappa)^2/2m$. Da der Hamiltonoperator mit \mathbf{L} vertauschbar ist, können wir seine Eigenzustände simultan durch die Quantenzahlen l, m und die kontinuierliche Variable κ charakterisieren. Wir nennen die entsprechenden Zustände $|\kappa, l, m\rangle$ und verlangen, daß sie für $\kappa \geq 0$ ein orthogonales, vollständiges System bilden:

$$\langle \kappa', l', m' | \kappa, l, m \rangle = \delta(\kappa' - \kappa) \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\sum_{lm} \int_0^\infty |\kappa, l, m\rangle d\kappa \langle \kappa, l, m| = \mathbf{1}, \quad \sum_{lm} \equiv \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l}.$$

Wir konstruieren die Basis, indem wir sowohl ihre Impuls- als auch ihre Ortsdarstellung angeben. Dazu müssen die entsprechenden Winkel unterschieden werden. Wir bezeichnen die Winkel im Ortsraum mit (θ, φ) und die im Impulsraum mit $(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$. Wir untersuchen zunächst die Impulsdarstellung und machen dazu den Ansatz

$$\langle \mathbf{k} | \kappa, l, m \rangle \equiv \langle k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi} | \kappa, l, m \rangle = g(k, \kappa) Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}).$$

Die Eigenwertgleichung für H führt zu einer algebraischen Gleichung für g

$$(k - \kappa)g(k, \kappa) = 0.$$

Für beliebiges κ erhalten wir eine Lösung, wenn g proportional zur Deltafunktion $\delta(k - \kappa)$ ist. Mit

$$g(k, \kappa) = \delta(k - \kappa) \frac{1}{k}$$

erhalten wir die oben verlangte Orthogonalitätsrelation. Somit ist

$$\langle \mathbf{k} | \kappa, l, m \rangle = \frac{1}{k} \delta(k - \kappa) Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}).$$

In der Ortsdarstellung muß die Winkelabhängigkeit ebenfalls durch die entsprechende Kugelfunktion gegeben sein. Ein Ansatz lautet

$$\langle \mathbf{x} | \kappa, l, m \rangle \equiv \langle r, \theta, \varphi | \kappa, l, m \rangle = f_l(r, \kappa) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Um f_l zu erhalten, genügt es, den Spezialfall $\theta = 0, m = 0$ zu betrachten. Die entsprechende Kugelfunktion hängt nicht von φ ab

$$Y_{l0}(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

und wir erhalten

$$f_l(r, \kappa) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \langle r, 0, 0 | \kappa, l, 0 \rangle .$$

Wir schieben Impulszustände ein, verwenden die Amplitude

$$\langle r, 0, 0 | \mathbf{k} \rangle = \langle r, 0, 0 | k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(ikr \cos \tilde{\theta})$$

und setzen für $\langle \mathbf{k} | \kappa, l, 0 \rangle$ die oben gefundene Form ein. Die darin auftretende Kugelfunktion ist ein Legendrepolynom

$$Y_{l0}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \tilde{\theta}) .$$

Das Integral über k kann mit Hilfe der δ -Funktion ausgeführt werden, die Integration über $\tilde{\varphi}$ ist trivial und man erhält

$$f_l(r, \kappa) = \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{+1} dx P_l(x) \exp(i\kappa r x) ,$$

P_l ist ein Polynom und das Integral ist daher für jeden Wert von l elementar ausführbar. Das Resultat ist durch Besselfunktionen mit halbzahligem Index (sphärische Besselfunktionen) ausdrückbar:

$$f_l(r, \kappa) = \kappa \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l j_l(\kappa r) , \quad j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z)$$

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} , \quad j_1(z) = \frac{1}{z} \left(\frac{\sin z}{z} - \cos z \right) , \dots$$

Das asymptotische Verhalten für großes Argument ist

$$j_l(z) = \frac{(-i)^{(l+1)}}{2z} (\exp(iz) + (-1)^{(l+1)} \exp(-iz)) + O(z^{(-2)})$$

(einlaufende und auslaufende Kugelwelle!). Damit sind die Zustände $|\kappa, l, m\rangle$ in der Orts- und Impulsdarstellung bestimmt. Als orthogonale, vollständige Basis können sie genauso verwendet werden, wie die Impuls- oder Ortszustände, also auch zur Analyse von Situationen, in denen das betrachtete Teilchen nicht frei ist. Mit Hilfe der Zustände $|\kappa, l, m\rangle$ kann man z.B. Beziehungen zwischen Entwicklungen von Orts- und Impulszuständen nach Kugelfunktionen herstellen (vgl. Übungen).

Als weitere Ergänzung betrachten wir die Addition von zwei Drehimpulsen $\mathbf{J}_{(1)}, \mathbf{J}_{(2)}$ zu einem Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{(1)} + \mathbf{J}_{(2)} .$$

Für ein Teilchen ist ein Beispiel dafür die Addition des Bahn- und Spindrehimpulses. Die Klassifizierung der Eigenzustände ist aber auch in komplizierteren Fällen von Interesse. Wir betrachten zwei Drehimpulsvektoren, deren Komponenten miteinander vertauschbar sind

$$[J_{(1)i}, J_{(2)k}] = 0 \quad i, k = 1, 2, 3 .$$

Aus den Eigenzuständen $|j_i, m_i\rangle$ von $\mathbf{J}_{(i)}, J_{(i)3}$ ($i = 1, 2$) erhält man daher durch Produktbildung Eigenzustände des Gesamtsystems

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle .$$

Das ist aber nicht die einzige mögliche Basis und i.a. auch nicht eine, die man verwenden möchte. Interessant ist eine Basis, die durch die Quantenzahlen von \mathbf{J}^2 und J_3 charakterisiert ist. Aus

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_{(1)}^2 + \mathbf{J}_{(2)}^2 + 2\mathbf{J}_{(1)} \cdot \mathbf{J}_{(2)}$$

sieht man, daß $\mathbf{J}_{(1)}^2$ und $\mathbf{J}_{(2)}^2$ mit \mathbf{J}^2 vertauschbar sind, weil die beiden Drehimpulsvektoren $\mathbf{J}_{(i)}$ miteinander kommutieren. Außerdem sieht man unmittelbar ein, daß J_3 mit $\mathbf{J}_{(1)}^2$ und $\mathbf{J}_{(2)}^2$ vertauschbar ist. Daher kann eine geeignete Basis durch die Quantenzahlen von $\mathbf{J}_{(1)}^2, \mathbf{J}_{(2)}^2, \mathbf{J}^2$ und J_3 charakterisiert werden

$$|j_1, j_2, j, m\rangle .$$

In der Praxis muß man die beiden Basen ineinander umrechnen können:

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle .$$

Die als Koeffizienten auftretenden Amplituden heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten und können aus gruppentheoretischen Überlegungen gefunden werden. Den einfachsten Zugang bildet die im vorigen Abschnitt skizzierte Schwingersche Technik mit Oszillatoroperatoren, mit der es auch möglich ist, Verallgemeinerungen zu finden (Addition von 3 und 4 Drehimpulsen). Für Einzelheiten vgl. die von L.C. Biedenharn und H. van Dam herausgegebene Literatursammlung *Quantum Theory of*

Angular Momentum, Acad.Press, New York-London 1965, in der die wichtigsten Originalarbeiten (einschließlich der von Schwinger) abgedruckt sind. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind reell und nur für

$$m = m_1 + m_2, \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

von Null verschieden. Sie erfüllen bestimmte Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen und es gibt Rekursionsformeln, die sich zu einer Berechnung mit nichtnumerischen Computerprogrammen eignen. Für "Mathematica" gibt es z.B. ein entsprechendes Paket. Wir sehen daher von einer detaillierten Diskussion ab.

Übungen

- 26) Finde eine Entwicklung von $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ nach Kugelfunktionen.
 27) Untersuche den führenden Term für große kr und beweise, daß

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) = \frac{2\pi}{ikr} (\exp(ikr)\delta(\Omega - \tilde{\Omega}) - \exp(-ikr)\delta(\Omega + \tilde{\Omega})) + O(r^{-2})$$

ist. Dabei ist Ω das Flächenelement auf der Kugel im Ortsraum und $\tilde{\Omega}$ das entsprechende Element im Impulsraum.

- 28) Finde eine Entwicklung von $\exp(ikx_3)$ nach Funktionen von $\cos\theta$ ($x_3 = r \cos\theta$).
 29) Für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ soll die Orts- und die Impulsdarstellung nach Kugelfunktionen entwickelt werden

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle &= \sum_{lm} \Phi_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \langle \mathbf{k} | \psi \rangle &= \sum_{lm} \tilde{\Phi}_{lm}(k) Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}) \end{aligned}$$

Bestimme $\Phi_{lm}(r)$ in Termen von $\tilde{\Phi}_{lm}(k)$ und umgekehrt.

- 30) Betrachte die im Text untersuchten Eigenzustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{(1)} + \mathbf{J}_{(2)}$. Welche Eigenwerte haben die Operatoren $\mathbf{J}_{(1)} \cdot \mathbf{J}_{(2)}$ bzw. $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}_{(2)}$?
 31) Finde die Auswahlregeln $l' - l, j' - j, m' - m$ für die Matrixelemente des Ortsoperators

$$\langle l', \frac{1}{2}, j', m' | \mathbf{X} | l, \frac{1}{2}, j, m \rangle.$$

5.5 Zentralsymmetrisches Potential

Nun betrachten wir ein Teilchen mit der Masse m in einem zentralsymmetrischen Potential $V = V(R)$, $R = |\mathbf{X}|$ (oder, was auf dasselbe hinausläuft, zwei Teilchen mit Wechselwirkung durch Zentralkräfte; in diesem Fall ist m die reduzierte Masse und $R = |\mathbf{X}_{(1)} - \mathbf{X}_{(2)}|$, vgl. Abschnitt 5.1). Der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(R)$$

ist in diesem Fall mit dem Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ vertauschbar. Ein vollständiges System vertauschbarer Operatoren besteht daher aus H , \mathbf{L}^2 und L_3 . Als ersten Schritt zu einer entsprechenden Reduktion in der Zahl der zu untersuchenden Freiheitsgrade spalten wir von der kinetischen Energie einen Anteil der Radialbewegung ab (vgl. M 2.2). Wir führen die Rechnung in Termen der dimensionslosen Operatoren (vgl. Abschnitt 5.1)

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{\lambda} \mathbf{X}, \quad \mathcal{P} = \frac{\lambda}{\hbar} \mathbf{P}, \quad \mathbf{A} := \frac{1}{\hbar} \mathbf{L} = \mathcal{Q} \times \mathcal{P}, \quad \mathcal{Q} = |\mathcal{Q}|$$

durch. Dazu verwenden wir als quantentheoretisches Gegenstück zur Radialkomponente des Impulses den Operator

$$\Pi := \frac{1}{\mathcal{Q}} (\mathcal{Q} \cdot \mathcal{P}) = \frac{\lambda}{\hbar} \frac{1}{R} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{P}).$$

Mit Hilfe der kanonischen VR kann man nachrechnen, daß dieser Operator mit \mathcal{Q} ein kanonisches Paar bildet

$$[\mathcal{Q}, \Pi] = i\mathbf{1}.$$

Einige nützliche VR sind

$$[\mathcal{Q}, \Pi] = i \frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{Q}}, \quad \left[\frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{Q}}, \Pi \right] = 0, \quad \left[\Pi, \frac{1}{\mathcal{Q}} \right] = \frac{i}{\mathcal{Q}^2}.$$

Der Operator Π ist nicht selbstadjungiert, weil die in ihm enthaltenen Faktoren nicht vertauschbar sind. Man erhält

$$\Pi^\dagger = \Pi - \frac{2i}{\mathcal{Q}}.$$

Daher ist der folgende Operator selbstadjungiert:

$$\mathcal{K} = \Pi - \frac{i}{\mathcal{Q}} = \Pi^\dagger + \frac{i}{\mathcal{Q}} = \frac{1}{\mathcal{Q}}\Pi\mathcal{Q} .$$

Mit diesen Formeln und einfachen Eigenschaften des Vektorprodukts findet man nach etwas Rechnung die Zerlegungen

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= \frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{Q}}\Pi - \frac{1}{\mathcal{Q}^2}(\mathcal{Q} \times \mathbf{A}) , \\ \mathcal{P}^2 &= \mathcal{K}^2 + \frac{1}{\mathcal{Q}^2}\mathbf{A}^2 = \Pi^2 - \frac{2i}{\mathcal{Q}}\Pi + \frac{1}{\mathcal{Q}^2}\mathbf{A}^2 .\end{aligned}$$

Mit $\Upsilon = \hbar^2/2\lambda^2m$ wird der dimensionslose Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}(\mathbf{A}^2) = \mathcal{K}^2 + \frac{1}{\mathcal{Q}^2}\mathbf{A}^2 + U(\mathcal{Q})$$

mit

$$U(\mathcal{Q}) = \frac{1}{\Upsilon}V(\lambda\mathcal{Q}) .$$

Wir klassifizieren die simultanen Eigenzustände von H, \mathbf{L}^2, L_3 durch die entsprechenden Eigenwerte

$$|\epsilon, l, m\rangle \quad \text{mit} \quad \epsilon = E/\Upsilon .$$

Wenden wir \mathcal{H} auf diese Zustände an, so können wir \mathbf{A}^2 durch den Eigenwert ersetzen

$$\mathcal{H}(\mathbf{A}^2)|\epsilon, l, m\rangle = \mathcal{H}(l(l+1))|\epsilon, l, m\rangle .$$

Das Eigenwertproblem für \mathcal{H} ist somit ein eindimensionales Problem, denn es kommen nur die radialen Operatoren Π, \mathcal{Q} vor. Die anderen beiden Dimensionen sind im Eigenwertproblem für den Drehimpuls

$$\mathbf{A}^2|\epsilon, l, m\rangle = |\epsilon, l, m\rangle l(l+1) , \quad A_3|\epsilon, l, m\rangle = |\epsilon, l, m\rangle m$$

enthalten. Die Winkelabhängigkeit ist sowohl im Orts- als auch im Impulsraum durch die Kugelfunktionen bestimmt

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}|\epsilon, l, m\rangle &= Y_{lm}(\theta, \varphi)\Phi_l(r, \epsilon), \\ \langle \mathbf{k}|\epsilon, l, m\rangle &= Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})\tilde{\Phi}_l(k, \epsilon) .\end{aligned}$$

Es ist möglich und zweckmäßig, aus Φ einen Faktor herauszuziehen und den Rest als Zustandsprojektion auf eine entsprechende Basis zu schreiben:

$$\begin{aligned}\Phi_l(r, \epsilon) &= \frac{1}{\lambda^{3/2} q} \langle q, l | \epsilon, l \rangle \quad q = r/\lambda \\ \tilde{\Phi}_l(k, \epsilon) &= \frac{\lambda^{3/2}}{\xi} \langle \xi, l | \epsilon, l \rangle \quad \xi = k\lambda\end{aligned}$$

Für die Basisvektoren erhält man mit den Methoden bzw. Resultaten von Abschnitt 5.4

$$\begin{aligned}\langle q, l | \xi, l \rangle &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l q \xi j_l(q\xi), \\ \langle q, l | q', l \rangle &= \delta(q - q'), \quad \langle \xi, l | \xi', l \rangle = \delta(\xi - \xi')\end{aligned}$$

Zu untersuchen bleibt das eindimensionale Problem

$$(\mathcal{H}_l - \epsilon \mathbf{1}) | \epsilon, l \rangle = 0$$

mit

$$\mathcal{H}_l = \mathcal{K}^2 + \frac{l(l+1)}{\mathcal{Q}^2} + U(\mathcal{Q}) = \frac{1}{\mathcal{Q}} \left(\Pi^2 + \frac{l(l+1)}{\mathcal{Q}^2} + U(\mathcal{Q}) \right) \mathcal{Q}.$$

In Analogie zur klassischen Mechanik (vgl. M 2.2) tritt im Hamiltonoperator \mathcal{H}_l für die Radialbewegung anstelle von $U(\mathcal{Q})$ das effektive Potential

$$\frac{l(l+1)}{\mathcal{Q}^2} + U(\mathcal{Q})$$

auf. Da der erste Term (der sog. Zentrifugalterm) ein positiver Operator ist, müssen die Eigenwerte $\epsilon = \epsilon(l)$ mit wachsendem l zunehmen. Ausnahmen von dieser Regel gibt es dann, wenn die Eigenwerte bezüglich l entartet sind. Das ist nur für das Coulombpotential $U \sim 1/\mathcal{Q}$ und für das Oszillatorpotential $U \sim \mathcal{Q}^2$ der Fall.

In der klassischen Mechanik (vgl. M 2.3) können die möglichen Teilchenbahnen entweder auf einen endlichen Bereich um das Zentrum beschränkt sein (finite Bahn, Bindung) oder bis ins ∞ reichen (infinite Bahn, Streuung). Welche Bahnformen es gibt, hängt vom Potential ab. In der Quantentheorie zeigt sich dieser Unterschied in der Struktur des Eigenwertspektrums. Bindungszustände entsprechen diskreten Eigenwerten, d.h. das Spektrum besteht aus einzelnen, voneinander getrennten Punkten auf der Energieskala. Die Eigenzustände sind dann normierbar $\langle \epsilon, l | \epsilon, l \rangle = 1$. Für Streuzustände bilden die Eigenwerte ein

Kontinuum, die Eigenzustände sind dann nicht normierbar, ihr Skalarprodukt führt auf die δ -Funktion (die im vorhergehenden Abschnitt untersuchten Drehimpulszustände eines freien Teilchens sind ein Beispiel). Die tatsächliche Struktur des Spektrums hängt vom Potential ab. Das ganze Spektrum kann sowohl aus kontinuierlichen, als auch aus diskreten Teilen bestehen.

In der Ortsdarstellung erhalten wir

$$\langle q, l | F(\mathcal{Q}) = F(q) \langle q, l |, \quad \langle q, l | \mathcal{K} = \frac{1}{i} \frac{d}{dq} \langle q, l | .$$

Aus der Eigenwertgleichung erhalten wir eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + \frac{l(l+1)}{q^2} + U(q) - \epsilon \right) g_l(q) = 0$$

für die Eigenfunktion $g_l(q) = \langle q, l | \epsilon, l \rangle$.

Bildet man Erwartungswerte radialsymmetrischer Funktionen $F(\mathcal{Q})$, so kompensiert der herausgezogene Faktor $1/q$ den vom Volumenelement

$$d^3x = r^2 dr d\Omega = \lambda^3 q^2 dq d\Omega$$

herrührenden Faktor q^2 und wir erhalten

$$\langle \epsilon, l | F(\mathcal{Q}) | \epsilon, l \rangle = \int_0^\infty g_l^*(q) g_l(q) F(q) dq .$$

Mit $F = \mathbf{1}$ erhalten wir daraus z.B. die Norm des Eigenzustands. Da Erwartungswerte physikalisch bedeutsam sind, kommen nur solche Lösungen der Differentialgleichung als Eigenfunktionen in Frage, für die das Integral mit dem entsprechenden F konvergiert. Lösungen, für die der Integrand an den Integrationsgrenzen zu stark zunimmt, sind physikalisch unbrauchbar.

Wir betrachten zunächst das Verhalten für kleine q . Der Einfachheit halber betrachten wir Potentiale U , die für $q \rightarrow 0$ nicht zu stark wachsen:

$$q^2 U(q) \Big|_{q=0} = 0 .$$

Wir setzen für g_l eine Potenzreihe an

$$g_l(q) = q^\beta (c_0 + c_1 q + \dots)$$

und bestimmen den Exponenten β des führenden Terms aus der Differentialgleichung. Dabei kann U gegen den Zentrifugalterm vernachlässigt werden. Man erhält

$$\beta(\beta - 1) = l(l + 1), \quad \text{also } \beta = l + 1 \quad \text{oder} \quad \beta = -l.$$

Für die zweite Lösung wäre z.B. der Erwartungswert der potentiellen Energie divergent. Diese Lösung ist daher für die Physik unbrauchbar. Das Verhalten von g_l für kleine q ist daher

$$g_l(q) \sim q^{(l+1)}, \quad g_l(0) = 0.$$

Der Spezialfall $l = 0$ ist darin enthalten.

Das Verhalten von g_l bei großen Werten von q hängt vom entsprechenden Verhalten des Potentials ab. Nimmt $U(q)$ für große q **zu**, so muß g_l entsprechend stark abfallen. Das genaue asymptotische Verhalten hängt von der Form von U ab, jedenfalls konvergiert aber das Integral in der Norm des Eigenzustands und man erhält nur Bindungszustände. Insgesamt ist das Eigenwertspektrum von unten beschränkt.

Nimmt U für große q auf Null oder einen endlichen Wert **ab**, so kann das asymptotische Verhalten aus der Differentialgleichung ohne Potential- und Zentrifugalterm bestimmt werden. Die beiden Möglichkeiten sind

$$g_l(q) \sim \exp(\pm\sqrt{-\epsilon}q).$$

Für *negative* Energie muß das obere Vorzeichen ausgeschlossen werden: für eine exponentiell anwachsende Lösung würden Erwartungswerte divergieren. Für die exponentiell abfallende Lösung ist das nicht der Fall und es ist auch die Norm endlich. Man erhält also diskrete Eigenwerte $\epsilon \leq 0$. Für *positive* Energie ist der Exponent rein imaginär, die Eigenfunktion verhält sich asymptotisch (je nach dem Vorzeichen) wie eine aus- bzw. einlaufende Kugelwelle, die einem freien Teilchen entspricht. Die Eigenzustände sind nicht normierbar, das Eigenwertspektrum ist kontinuierlich. Welche Lösung auszuwählen ist, hängt von der physikalischen Situation ab. Eine detaillierte Untersuchung von Streuproblemen werden wir später vornehmen.

Strebt U für große q gegen $-\infty$, so gibt es keine Streuzustände. Das ist schon aus einer klassischen Überlegung zu erwarten: das Teilchen wird mit wachsendem Abstand immer stärker abgestoßen und kommt

nie als freies Teilchen heraus. Vom physikalischen Standpunkt betrachtet, ist es zwar durchaus möglich, daß Kräfte zwischen zwei Teilchen abstoßenden Charakter haben, aber ein unbegrenztes Anwachsen der Abstoßung ist unrealistisch. Solche Fälle sollen daher hier nicht untersucht werden.

Die qualitative Struktur des Eigenwertspektrums ist damit auf das Verhalten des Potentials im Ortsraum zurückgeführt. Zur Bestimmung der Eigenwerte muß die oben angegebene Differentialgleichung für $g_l(q)$ gelöst werden. Obwohl es sich "nur" um eine gewöhnliche, lineare Differentialgleichung 2. Ordnung handelt, ist eine strenge Lösung nur für wenige Potentiale möglich. Ein notorisches Beispiel ist das Coulombpotential, das im nächsten Abschnitt untersucht wird. Für weitere Beispiele vgl. die Übungen. Das Eigenwertproblem kann für solche (im Sinn der Quantentheorie) integrablen Fälle auch mit algebraischen Methoden gelöst werden, wenn man von den entsprechenden Eigenschaften von \mathcal{K} , \mathcal{Q} etc. Gebrauch macht. In den meisten Fällen müssen jedoch Näherungsmethoden verwendet werden.

Im Impulsraum ist die Eigenwertgleichung eine Integralgleichung. Das sieht man aus der Impulsdarstellung von H

$$\langle \mathbf{k} | H | \psi \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \mathbf{k} | \psi \rangle + \int \langle \mathbf{k} | V(R) | \mathbf{k}' \rangle d^3 k' \langle \mathbf{k}' | \psi \rangle.$$

In Termen der Amplituden $\langle \xi, l | \epsilon, l \rangle$ resultiert nach einiger Rechnung

$$(\xi^2 - \epsilon(l)) \langle \xi, l | \epsilon, l \rangle + \int_0^\infty d\xi' U_l(\xi, \xi') \langle \xi', l | \epsilon, l \rangle = 0.$$

Der Kern U_l dieser linearen Integralgleichung ist

$$\begin{aligned} U_l(\xi, \xi') &= \int_0^\infty dq \langle \xi, l | q, l \rangle U(q) \langle q, l | \xi', l \rangle \\ &= \frac{2}{\pi} \xi \xi' \int_0^\infty dq q^2 U(q) j_l(q\xi) j_l(q\xi'). \end{aligned}$$

Für Erwartungswerte von zentralsymmetrischen Impulsfunktionen $F(\mathcal{P})$ erhält man

$$\langle \epsilon, l | F(\mathcal{P}) | \epsilon, l \rangle = \int_0^\infty |\langle \xi, l | \epsilon, l \rangle|^2 F(\xi) d\xi.$$

Mit $F = \mathbf{1}$ resultiert die Norm des Eigenzustands.

Übungen

- 32) Der dreidimensionale (isotrope) harmonische Oszillator wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{R}^2$$

beschrieben. Im kartesischen Koordinaten $(X_1, X_2, X_3, P_1, P_2, P_3)$ und in Zylinderkoordinaten (X_3 als Achse) können die Eigenzustände und Eigenwerte algebraisch bestimmt werden. In Polarkoordinaten ist es einfacher, im Ortsraum zu arbeiten (eine algebraische Bestimmung mit dem in Anhang A1 für das Coulombproblem skizzierten Verfahren ist ebenfalls durchführbar). Die Verfahren sollen verglichen werden. Dabei ist auf die Entartung zu achten.

- 33) Für ein zentralsymmetrisches Problem mit dem Potential $U(Q)$ seien die Eigenwerte $\epsilon(n, l)$ und Eigenfunktionen $g_l(q)$ exakt bekannt. Wie kann man daraus die entsprechenden Größen für das Potential

$$U_g(Q) = U(Q) + \frac{g}{Q^2}, \quad g > 0$$

finden?

- 34) Die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_0 \left(\frac{a}{R} - \frac{R}{a} \right)^2 \quad V_0 > 0.$$

sind zu bestimmen. Die Lage der untersten Niveaus ($n = 0, 1, 2; l \leq 12$) ist für einen kleinen, einen mittleren und einen größeren Wert von a in eine graphische Darstellung des Potentials einzutragen.

- 35) Bestimme die Bindungsenergien für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{V_0}{(\cosh \kappa R)^2}$$

für Zustände mit $l = 0$ in Abhängigkeit von den Parametern $V_0 > 0$ und κ . Wieviele Bindungszustände gibt es bei gegebenen Parameterwerten? Welche Form haben die Eigenfunktionen?

- 36) Untersuche die Problemstellung des vorhergehenden Beispiels für das Potential

$$V = -V_0 \exp(-\kappa R).$$

Anmerkung: Die in den Beispielen 35, 36 untersuchten Potentiale sind Modelle für ein Teilchen, das in einem beschränkten Bereich in r anziehende Kräfte spürt. Wegen $l = 0$ können die Beispiele auch für eindimensionale Problemstellungen ($R = |X|$) aufgefaßt werden. Die Ortsdarstellung ist dann

$$\langle X|\psi\rangle \sim r (\langle \mathbf{X}|\psi\rangle)_{l=0}.$$

- 37) Separable Potentiale: Die Berechnung von Eigenwerten und Eigenzuständen im Impulsraum ist dann einfach, wenn das Matrixelement $\langle \mathbf{k}|\mathbf{V}|\mathbf{k}'\rangle$ als Summe von Produkten geschrieben werden kann

$$\langle \mathbf{k}|\mathbf{V}|\mathbf{k}'\rangle = \sum_s f_s^{(1)}(\mathbf{k}) f_s^{(2)}(\mathbf{k}')$$

Ein solches Potential heißt separabel. Separable Potentiale werden als Modelle verwendet (vor allem in der Kernphysik). Der einfachste mögliche Ansatz für $l = 0$ ist

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{V}|\mathbf{k}\rangle = -ag(k)g(k')$$

Die Berechnung von Bindungsenergien und Eigenfunktionen im Impulsraum ist zu untersuchen. Welche Form hat das Potential im Ortsraum? Die Rechnung ist für den Ansatz von Yamaguchi

$$g(k) = \frac{b}{k^2 + \kappa^2}$$

auszuführen. Zu bestimmen ist die Kopplungskonstante a , das Potential im Ortsraum und der mittlere quadratische Radius r_0

$$r_0^2 = \langle E|\mathbf{X}^2|E\rangle$$

Dabei ist die Bindungsenergie $E < 0$ und κ als vorgegeben zu betrachten. Als Anwendung in der Kernphysik ist a und r_0 für das Deuteron zu bestimmen (Als vorgegeben sind dabei die Parameter $E = -2.225$ MeV, $b^2 = 1/4\pi$, $\kappa = 1.3$ fm⁻¹ anzusehen).

5.6 Das Wasserstoffatom

Als besonders wichtige Anwendung für die quantenmechanische Berechnung von Energieeigenwerten betrachten wir das Wasserstoffatom. Die wichtigste Wechselwirkung zwischen Proton und Elektron ist die Coulombwechselwirkung zwischen den Ladungen der beiden Teilchen. Da beide Teilchen Spin $1/2$ und damit magnetische Momente haben, gibt es zusätzliche magnetische Wechselwirkungen. Läuft das Elektron auf einer stationären Bahn um ein Proton, so hat es i.a. einen von Null verschiedenen Bahndrehimpuls, der wegen der Ladung des Elektrons zu einem magnetischen Bahnmoment führt. Das magnetische Spinmoment führt sowohl zu einer Wechselwirkung mit dem Bahnmoment als auch mit dem Spinmoment des Protons. Diese vom Spin herrührenden Kopplungen sind aber sehr klein und wirken sich auf die Lage der Spektrallinien nur wenig aus (sie führen zur Feinstruktur bzw. Hyperfeinstruktur). Die relativistische Theorie enthält den Spin und die damit zusammenhängenden Wechselwirkungen automatisch. Im Rahmen der nichtrelativistischen Quantentheorie wollen wir uns zunächst auf die Coulombwechselwirkung beschränken und die Teilchen als spinlose Objekte beschreiben. Das entsprechende quantenmechanische Problem ist (wie sein klassisches Gegenstück) exakt lösbar. Ein Grund dafür kann in der Tatsache gesehen werden, daß es außer dem Drehimpuls eine weitere Erhaltungsgröße gibt (den Runge-Lenz-Vektor, vgl. M 2.4). Das führt dazu, daß das Coulombproblem eine höhere Symmetrie als die bei Drehungen in drei Dimensionen aufweist. Die Eigenwerte der Energie zeigen als Folge eine entsprechend hochgradige Entartung.

Das Coulombproblem kann auf verschiedene Weisen gelöst werden. Die Berechnung der Eigenwerte für die Bindungszustände ist rein algebraisch mit Hilfe der Vertauschungsrelationen des Drehimpulses und des Runge-Lenz-Vektors möglich (so hat Pauli das Spektrum als erster berechnet). Das Verfahren erlaubt auch die Berechnung der Streuphasen (vgl. Anhang 1), aber nicht der Eigenfunktionen. In der Ortsdarstellung ist die Schrödingergleichung eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Das gängige Verfahren zu ihrer Lösung stammt von Schrödinger und besteht in der Separation der Winkelabhängigkeit in Polarkoordinaten (vgl. vorhergehende Abschnitte) und der Lösung der verbleibenden gewöhnlichen Differentialgleichung für die Radialabhängigkeit. Eine Alternative bildet die Separation der Schrödingergleichung in parabolischen Koordinaten. In der Impulsdarstellung ist

die Schrödingergleichung eine Integralgleichung. Durch Ausnützung der erwähnten höheren Symmetrie ist es möglich, sie exakt zu lösen (diese Methode stammt von Weyl bzw. Fock). Mit Hilfe der algebraischen Eigenschaften der Operatoren \mathcal{K}, Q usw. kann ein Kalkül mit verallgemeinerten Leiteroperatoren gefunden werden, mit dem die Eigenzustände und Eigenwerte darstellungsunabhängig angegeben werden können. Die Eigenfunktionen im Ortsraum sind damit relativ einfach zu finden, die Übertragung auf den Impulsraum ist weniger einfach als beim harmonischen Oszillator (vgl. Anhang A1). Die Idee dieser Methode geht auf Dirac zurück. Viel später wurde das Verfahren von Schrödinger ausgebaut und verallgemeinert.

Wir führen hier nur die Resultate an und benützen als Abkürzungen die Rydbergenergie E_R und den Bohrschen Radius a_0 (vgl. 5.1). Die Eigenwerte für die Bindungszustände entsprechen der Balmerformel

$$E_n = -\frac{E_R}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad n \geq l + 1.$$

Der Energieeigenwert ist also durch die Hauptquantenzahl n festgelegt. Da l in E_n nicht vorkommt, gibt es für viele Werte von l den gleichen Energieeigenwert. Die Eigenzustände sind daher entartet. Der Entartungsgrad (= Zahl der Zustände mit gleicher Energie) ist leicht zu finden. Für festes n haben alle Zustände mit $0 \leq l \leq n - 1$ dieselbe Energie. Zu jedem Wert von l gibt es aber $2l + 1$ mögliche Werte von m . Insgesamt beträgt der Entartungsgrad daher

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

Die Eigenfunktionen im Ortsraum sind

$$\langle \mathbf{x} | n, l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) \Phi_{nl}(r).$$

Die Radialfunktion Φ ist ein Ausdruck der Form

$$\left(\frac{2r}{na_0} \right)^l \exp\left(-\frac{r}{na_0} \right) \cdot \text{Polynom vom Grad } (n - l - 1) \text{ in } \left(\frac{2r}{na_0} \right).$$

Der erste Faktor ist eine Folge des Zentrifugalterms im effektiven Potential und bestimmt das Verhalten bei kleinen Abständen, der exponentielle Abfall bei großen Abständen garantiert die Normierbarkeit.

Die untersten Eigenfunktionen sind

$$\begin{aligned}\Phi_{10}(r) &= \frac{2}{a_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ \Phi_{20}(r) &= \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\ \Phi_{21}(r) &= \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{2a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\ \Phi_{30}(r) &= \frac{2}{(3a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2}{3} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right).\end{aligned}$$

Für maximalen Drehimpuls $l = n - 1$ ist die Eigenfunktion relativ einfach

$$\Phi_{n,n-1}(r) = \frac{2}{n^2 a_0^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{(2n-1)!}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right).$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit $l \neq 0$ sind infolge des Faktors r^{2l} bei größeren Abständen konzentriert als für Zustände mit $l = 0$. Das ist eine Folge des abstoßenden Zentrifugalterms im effektiven Potential, der für kleine Abstände dominiert und als "Drehimpulsbarriere" wirkt. Im Bohrschen Modell wäre der Drehimpuls auf der n -ten Bahn $n\hbar$. Dieser Wert ist in der Schrödingertheorie nicht möglich, aber $l = n - 1$ entspricht dem nächstliegenden möglichen Wert. Ansonsten unterscheiden sich die mit der Schrödingertheorie berechneten Wahrscheinlichkeitsverteilungen vor allem für kleinere Werte von n von den Aussagen des Bohrschen Modells.

Nun betrachten wir das "wirkliche" Wasserstoffatom, d.h. wir untersuchen, wie sich die Struktur der Eigenwerte ändert, wenn der Spin des Elektrons mitgenommen wird. Eine genaue Rechnung erfordert eine relativistische Theorie. Die Diracgleichung ist für das $1/r$ -Potential exakt lösbar und erlaubt daher eine einigermaßen genaue Berechnung der Eigenwerte und Eigenfunktionen für den Wasserstoff. Für alle komplizierteren Atome ist man natürlich wie in der Schrödingertheorie auf Näherungen angewiesen. Die relativistische Theorie enthält alle mit dem Spin zusammenhängenden Effekte automatisch.

Ohne die relativistische Theorie wirklich durchzuführen, können wir jedoch bereits einen Überblick gewinnen, welche Resultate zu erwarten sind. Folgende Phänomene geben zu Korrekturen Anlaß (Aufzählung in der Reihenfolge ihrer Bedeutung):

- (1) die Tatsache, daß der Gesamtdrehimpuls nicht der Bahndrehimpuls \mathbf{L} , sondern $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ist;
- (2) die Wechselwirkung des magnetischen Spinmoments mit dem Bahnmoment (Spinbahnkopplung);
- (3) die relativistische Veränderlichkeit der Masse des Elektrons mit der Geschwindigkeit;
- (4) die Bahn des Teilchens ist nicht scharf, es “spürt” daher das Potential nicht nur an einer Stelle r , sondern es gibt Korrekturen, die höheren Ableitungen von V entsprechen (sog. Darwinterm);
- (5) die Wechselwirkung mit dem magnetischen Kernmoment;
- (6) in der Quantenfeldtheorie erfüllt die Feldstärke des elektromagnetischen Feldes und ihre zeitliche Änderung eine Unschärferelation. Ein stabiler Zustand mit Feldstärke Null (klassisches Vakuum, kein Strahlungsfeld) ist daher nicht möglich, es gibt selbst im leeren Raum Schwankungen der elektromagnetischen Feldstärken um den Mittelwert Null. Das Elektron im Atom “spürt” diese Feldschwankungen;
- (7) auch die Ladung des Elektrons schwankt in der Quantenfeldtheorie lokal um den Mittelwert Null. Eine in das Vakuum eingebrachte Ladung (z.B. die des Kerns) polarisiert diese Schwankungen. Durch diese Vakuumpolarisation wird das Coulombgesetz zwischen Kern und Elektron bei kleinen Abständen geändert. Das Elektron im Atom “spürt” das geänderte Abstandsverhalten.

Die Effekte (1) - (4) können aus der Diractheorie berechnet werden. Sie führen zu einer Aufspaltung der Niveaus (Feinstruktur), über die zu sprechen sein wird. Der sehr kleine Effekt (5) führt zu einer weiteren Aufspaltung (Hyperfeinstruktur). Die ebenfalls sehr kleinen Effekte (6) und (7) der Quantenfeldtheorie führen zu einer Energieverschiebung, durch die bestimmte Niveaus aufgespalten werden (Lambshift).

Da es hier nur um eine erste Übersicht gehen soll, betrachten wir nur die Auswirkungen von (1) und (2) und vernachlässigen alle anderen Korrekturen. Dazu müssen wir zwischen den magnetischen Quantenzahlen zum Bahndrehimpuls (m_l), Spin ($m_s = \pm 1/2$) und Gesamtdrehimpuls (m_j) unterscheiden.

Bei Mitbetrachtung des Spins wird die Zahl der Zustände verdoppelt, denn zu jedem Satz erlaubter Quantenzahlen n, l, m_l gibt es noch die beiden Werte $m_s = \pm 1/2$. Wird zunächst jede Spinwechselwirkung vernachlässigt, so erscheint der Spin einfach als “angeklebtes Etikett”

des Zustands, das mit der Dynamik nichts zu tun hat, denn der Spin kommt dann in H nicht vor. Die Eigenzustände von H sind dann

$$|n, l, m_l\rangle \otimes |1/2, \pm 1/2\rangle.$$

Da der Spin in H nicht vorkommt, bleiben die Eigenwerte unverändert und sind für allgemeines Zentralpotential $2(2l + 1)$ -fach entartet (bzw. für reines Coulombpotential: $2n^2$ -fach).

Die Spinbahnkopplung führt dazu, daß der Spin \mathbf{S} in der Hamiltonfunktion auftritt. Die Form des entsprechenden Zusatzterms kann ohne Diractheorie aus Invarianzbetrachtungen erraten werden. Der Term muß ein Skalar bei Drehungen und Spiegelungen sein, denn er darf keine Richtung auszeichnen. Er muß aus \mathbf{P} und \mathbf{S} aufgebaut sein und natürlich die potentielle Energie $V(\mathbf{X})$ enthalten (damit auch \mathbf{X}). \mathbf{P} ist ein polarer Vektor, \mathbf{S} als Drehimpuls ein axialer Vektor. Man braucht daher einen zweiten Axialvektor, d.h. ein Kreuzprodukt, um eine Invariante bilden zu können. Ohne höhere Potenzen der Operatoren kann man nur auf eine Weise eine solche bilden, in der V vorkommt, nämlich

$$H_{LS} = f \mathbf{S} \cdot (\nabla V(\mathbf{X}) \times \mathbf{P})$$

mit einer Konstanten f , deren Zahlwert natürlich aus diesen Überlegungen nicht bestimmt werden kann. Die Diractheorie liefert bei konsequenter Entwicklung nach v/c den Wert

$$f = \frac{1}{2(mc)^2}$$

Für ein Zentralpotential erhält man durch Gradientenbildung

$$H_{LS} = \frac{1}{2(mc)^2 R} \frac{\partial V}{\partial R} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L})$$

Da H_{LS} von der Einstellrichtung von \mathbf{S} relativ zu \mathbf{L} abhängt, muß dieser Beitrag eine Aufspaltung der Energieniveaus bewirken. Der Eigenwert von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ ist (vgl. Übungsbeispiel 5.27)

$$\frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

Daher werden alle Niveaus mit $l \neq 0$ in Dubletts aufgespalten. Daß der entsprechende Energieunterschied nicht groß ist, sieht man durch

Einsetzen von Zahlen: es tritt das Produkt der magnetischen Momente der Bahnbewegung und des Spins auf. Setzt man als charakteristischen Wert für den Bahnradius den ersten Bohrschen Radius ein, so erhält man als Größenordnung für den Spinbahnterm

$$\langle H_{LS} \rangle \sim (Z\alpha)^2 E_R \text{ mit der Feinstrukturkonstante } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Für Natrium gibt das den Faktor $7 \cdot 10^{-3}$ und das ist die Größenordnung des gemessenen Linienabstands des Dubletts. Die Aufspaltung ist also wirklich eine Feinstruktur der Spektrallinien. Die Hyperfeinstrukturaufspaltung ist mindestens um einen Faktor 10^{-3} kleiner, da das Kernmagneton um diesen Faktor kleiner als das Bohrsche Magneton ist. Für eine quantitative Berechnung der Feinstruktur genügt es nicht, den Spinbahnterm zu kennen, denn die unter (3) und (4) genannten Beiträge sind von derselben Größenordnung. Ohne diese Terme anzugeben, können wir aber die zu erwartende Struktur der Eigenwerte diskutieren.

Die Eigenzustände sind jetzt nicht mehr die Produkte der Spinzustände mit den Eigenzuständen des spinlosen Problems, denn H kommutiert nicht mehr mit L_3 , sondern nur mehr mit J_3 (m_l ist also keine "gute" Quantenzahl mehr, vgl. Addition von Drehimpulsen!). Dementsprechend wird man z.B. in der Ortsdarstellung Eigenzustände der Form

$$\langle \mathbf{x} | n; l, \frac{1}{2}, j, m_j \rangle$$

suchen. Dabei bedeutet n wieder die Hauptquantenzahl. In einem Produktansatz aus Radial- und Winkelanteilen kann man im Winkelanteil die Zustände $|l, \frac{1}{2}, j, m_j\rangle$ mit Hilfe der Drehimpulsaddition (vgl. 5.4) aus den Eigenzuständen $|l, m_l\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ aufbauen, deren Ortsdarstellung die Kugelfunktionen sind.

Die Energieeigenwerte sind daher durch n, l, j zu indizieren

$$E = E_{n,l,j}$$

Von m_j können sie nicht abhängen, weil die Richtung von \mathbf{J} wegen der Zentralsymmetrie irrelevant ist und es daher keine Energie kosten darf, sie zu ändern. Die spektroskopische Terminologie ist

$$nl_j \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Für l wird anstelle der Zahl ein (durch Tradition eingebürgerter) Buchstabe geschrieben: s für $l = 0$, p für $l = 1$, d für $l = 2$, f für $l = 3$, g für $l = 4$ usw. In dieser Terminologie sind die untersten Wasserstoffniveaus

$$1s_{1/2} [2s_{1/2}, \underbrace{2p_{1/2}}] 2p_{3/2} [\underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}}] [\underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}}] 3d_{5/2} \text{ usw.}$$

Wegen der höheren Symmetrie des $1/r$ -Potentials hängen die aus der relativistischen Diractheorie berechneten Eigenwerte nicht von l ab. Die in eckigen Klammern gruppierten Niveaus haben daher dieselbe Energie. Diese Entartung wird durch die quantenfeldtheoretischen Effekte (6) und (7) aufgehoben und es tritt eine sehr kleine, aber meßbare Verschiebung der Niveaus gegeneinander auf (Lambshift). Die Feinstrukturaufspaltung zwischen Zuständen, die sich nur in der Einstellrichtung des Spins unterscheiden, ist durch $\underbrace{\hspace{1cm}}$ angedeutet.

Übungen

Für einen kleinen Zusatzterm zu H

$$H \rightarrow H' = H + gH^{(1)} \quad g \ll 1$$

ist die Korrektur zum Eigenwert in erster Ordnung in g durch das Diagonalelement von $H^{(1)}$ bestimmt

$$E_{nlm} \rightarrow E_{nlm} + g\langle n, l, m | H^{(1)} | n, l, m \rangle + O(g^2)$$

(vgl. die Übungsbeispiele 3.12 u. 3.13). In den folgenden Beispielen ist diese Korrektur für ein wasserstoffähnliches Atom (Coulombpotential mit $e \rightarrow Ze$, $Z = \text{Kernladungszahl}$) zu untersuchen.

- 38) Berechne die Energieänderung infolge der Spinbahnkopplung

$$gH^{(1)} = H_{LS}$$

für einen Zustand mit maximalem Drehimpuls ($l = n - 1$).

- 39) Berechne die Energieänderung infolge der untersten relativistischen Korrektur

$$gH^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} \right)^2$$

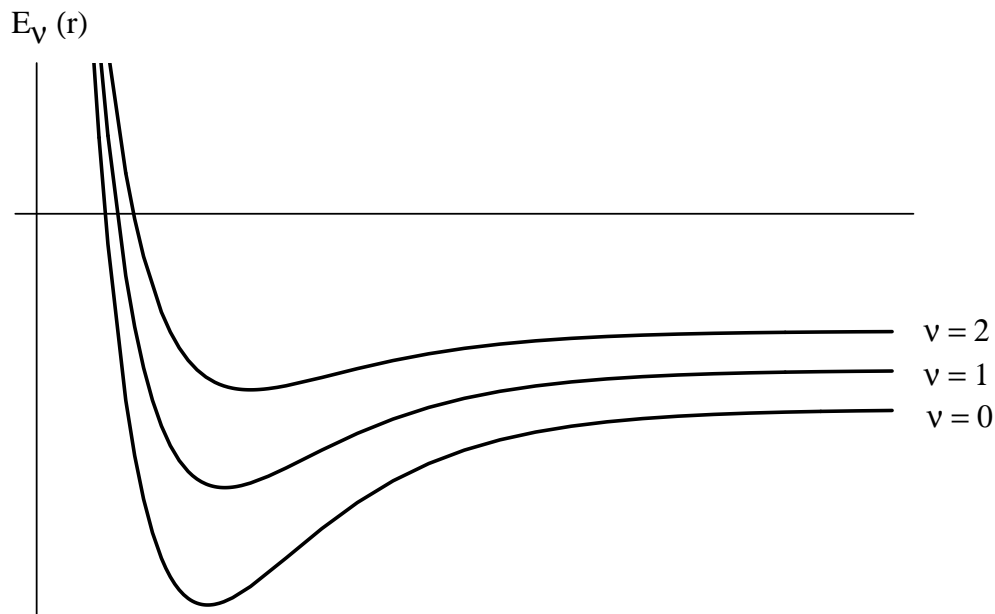
für einen Zustand mit maximalem Drehimpuls.

Hinweis: es ist günstig, sie durch die Matrixelemente von V und V^2 auszudrücken und den Virialsatz zu benutzen.

5.7 Rotationen und Schwingungen zweiatomiger Moleküle

Die für ein Zentralpotential verwendeten Methoden ermöglichen Aussagen über das Energiespektrum zweiatomiger Moleküle. Natürlich darf man nicht erwarten, daß man das Spektrum damit vollständig bestimmen kann. Das einfachste gebundene System aus zwei Atomen ist das Ion $H_2^{(+)}$ von Wasserstoff. Im Schwerpunktsystem ist das zwar i.W. ein Einteilchenproblem (ein Elektron bewegt sich im Coulombfeld der beiden Protonen), aber das Potential ist nicht zentral. Für Moleküle, die aus komplizierten Atomen aufgebaut sind, muß man ein entsprechend schwieriges Mehrkörperproblem lösen, was über die bisher betrachtete Problematik noch weiter hinausführt. Ein Problemkreis, der sich jedoch erfassen läßt, ist der Einfluß von Rotationen des ganzen Moleküls und von Schwingungen der beiden Atome gegeneinander auf das Spektrum. Als Ausgangspunkt für ein geeignetes Näherungsverfahren (sog. adiabatische oder Born-Oppenheimer-Näherung) denken wir uns die beiden Kerne zunächst in einem bestimmten Abstand r festgehalten. Wir denken uns das (komplizierte) Eigenwertproblem für die Bewegung der Elektronen im Coulombfeld der Protonen (einschließlich aller Wechselwirkungen der Elektronen) gelöst und die entsprechenden Energieniveaus E_0 (Grundzustand), E_1 (1. Anregungszustand), $\dots E_\nu$ berechnet. Diese Niveaus müssen von dem (als Parameter hineinsteckten) Abstand r abhängen. Für jedes Niveau $E_\nu(r)$ wird es einen Wert $r_{0\nu}$ (sog. Gleichgewichtsabstand) geben, für den die Energie E_ν am kleinsten ist, während sie für kleinere und größere Werte von r zunimmt. Der Minimalwert $E_\nu(r_{0\nu})$, die Lage $r_{0\nu}$ des Minimums und die Form der Abhängigkeit von r werden davon abhängen, welches Niveau ν man betrachtet. Die auf der folgenden Seite abgebildeten Kurven geben eine solche Abhängigkeit qualitativ wieder.

Nun wollen wir uns dafür interessieren, was passiert, wenn man zuläßt, daß sich die Kerne gegeneinander bewegen (bzw. die Atome: die Hüllen werden die Bewegung mitmachen). Sie haben dann eine kinetische Energie, die zu der durch $E_\nu(r)$ gegebenen potentiellen Energie dazukommt. Solange diese kinetische Energie genügend klein ist, wird sie nicht ausreichen, um das Molekül in einen höheren "Elektronenzustand" zu versetzen. Wir können dann jeden "Elektronenzustand" ν für sich untersuchen, d.h. wir können ν festhalten. In der folgenden Betrachtung lassen wir den Index ν weg; die Untersuchung muß für jeden einzelnen Zustand ν mit dem entsprechenden $E_\nu(r)$ durchgeführt werden. Die Bewegung der Atome untersuchen wir näherungsweise als



Bewegung von zwei Teilchen in einem durch $E(r) = V(r)$ gegebenem Potential (das man entweder aus der Lösung des oben angedeuteten Eigenwertproblems erhält oder in Form eines phänomenologischen Ansatzes hineinsteckt). Außerdem lassen wir zu, daß das Molekül als Ganzes rotiert, daß also in der kinetischen Energie der Drehimpulsbeitrag nicht verschwindet. Im Schwerpunktsystem der beiden Atome erhalten wir dann ein zentralsymmetrisches Einteilchenproblem mit dem Potential $V(r)$. Die in Abschnitt 5.5 entwickelten Methoden können daher angewandt werden. Mit

$$\langle \mathbf{x} | \epsilon, l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{1}{\lambda^{3/2} q} g_l(q)$$

lautet die Schrödingergleichung für g_l

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + U_{eff}(q) - \epsilon \right) g_l = 0$$

mit dem effektiven Potential

$$U_{eff}(q) = \frac{l(l+1)}{q^2} + U(q), \quad U(q) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V(\lambda q).$$

Dabei ist

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

die reduzierte Masse der beiden Atome und λ eine noch offene Skalenkonstante.

Für zu große Werte der Drehimpulsquantenzahl l hat U_{eff} wegen des positiven Zentrifugalterms kein Minimum und das Molekül dissoziiert als Folge der Zentrifugalkraft. Wir betrachten daher niedrigere Werte von l , für die das Molekül gebunden bleibt. Die Lage q_0 des Minimums stimmt nicht genau mit dem Gleichgewichtsabstand des ruhenden Moleküls überein. Sie ist durch

$$U'_{eff}(q = q_0) = 0 \quad \left(' = \frac{d}{dq} \right)$$

bestimmt und hängt von l ab: $q_0 = q_0(l)$. Wir entwickeln U_{eff} in der Nähe dieser Stelle:

$$U_{eff}(q) = U_{eff}(q_0) + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 U''_{eff}(q_0) + \dots$$

Der erste Term bedeutet einen konstanten Zusatz zum Eigenwert ϵ . Der zweite Term entspricht dem Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators (die Koordinate ist die Auslenkung $q - q_0$, die Federkonstante ist durch $U''_{eff}(q_0)$ bestimmt; durch geeignete Wahl von λ könnte man sie zu 1 machen). Das Eigenwertspektrum und die Eigenfunktionen haben wir bereits in Abschnitt 5.2 bestimmt. Mit dem Resultat $\epsilon_n = (n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$ können wir die Energieeigenwerte des Moleküls in folgender Form schreiben

$$E_{nl} = V(r_0) + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

Dabei entspricht r_0 der oben bestimmten Lage des Minimums von U_{eff}

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) (r = r_0) = 0.$$

Die Schwingungsfrequenz ω ist durch

$$\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) (r = r_0) = m\omega^2$$

bestimmt und $I = mr_0^2$ entspricht einem effektiven Trägheitsmoment der Rotationsbewegung.

Infolge der Schwingungs- und Rotationsbewegung spaltet daher jedes elektronische Molekülniveau (das durch $V(r_0)$ bestimmt ist) in eine Gruppe von Niveaus auf, die durch die Werte der Vibrationsquantenzahl n und der Rotationsquantenzahl l charakterisiert sind. Die genaue Form der Aufspaltung hängt von der relativen Größe der entsprechenden "Energiequanten" ($V(r_0)$, $\hbar\omega$, $\hbar^2/2I$) ab. Die Bindungsenergie $-V(r_0)$ liegt für 2-atomige Moleküle bei einigen eV, das Oszillatorquant $\hbar\omega$ ist 10-30 mal kleiner, die Einheit für die Rotationsenergie $\hbar^2/2I$ ist $10^3 - 10^4$ mal kleiner. Die Elektronenniveaus spalten daher in dicht beieinander liegende Vibrationsniveaus auf, die ihrerseits eine Feinstruktur infolge der Rotationsniveaus haben. Die empirisch beobachtete Bandenstruktur der Molekülspektren kommt dadurch zustande, daß die einzelnen Rotationsniveaus so dicht liegen, daß sie als unaufgelöstes Band beobachtet werden.

Da das Rotationsquant $\hbar^2/2I$ sehr klein ist, macht es nichts aus, wenn man die l -Abhängigkeit in q_0 bzw. ω , I vernachlässigt, d.h. mit U statt U_{eff} rechnet.

In der Entwicklung von U_{eff} nach Potenzen von $q - q_0$ ist die Vernachlässigung höherer als zweiter Potenzen nur erlaubt, wenn die Amplitude der Schwingung nicht zu groß ist. Das bedeutet, daß die Vibrationsquantenzahl n nicht zu groß sein darf, damit die hier betrachtete Näherung konsistent bleibt. Für größere Werte müssen anharmonische Terme mitgenommen werden. Eine Trennung in Vibrations- und Rotationsterme ist dann nicht mehr möglich.

Die Quantennatur der Molekularschwingungen und -rotationen äußert sich in der spezifischen Wärme von molekularen Gasen. Nach dem Gleichverteilungssatz der klassischen statistischen Mechanik ist die spezifische Wärme gleich der Zahl der Freiheitsgrade des Moleküls mal $k_B/2$. Dabei bedeutet k_B die Boltzmannkonstante

$$k_B = 8.617347 \cdot 10^{-5} \text{ eV}/^\circ\text{K}.$$

Ein zweiatomiges Molekül hat 6 Freiheitsgrade: drei für die Translationsbewegung, zwei für die Rotation (die Drehung um die Molekülachse kostet keine Energie) und einen für die Schwingung. Da die Schwingung im Mittel zur kinetischen und potentiellen Energie gleich viel beiträgt

(Virialsatz!), ist der Schwingungsfreiheitsgrad doppelt zu zählen. Die spezifische Wärme sollte für Gase aus zweiatomigen Molekülen daher gleich $7k_B/2$ sein. Experimentell findet man bei normalen Temperaturen $5k_B/2$ und bei tieferen Temperaturen $3k_B/2$. Die Quantentheorie kann diesen Befund erklären. Ist bei einer festen Temperatur T die mittlere Energie der Translationsbewegung $3k_B T/2 < \hbar\omega_0$, so können im Mittel keine Schwingungen der Atome angeregt werden. Das Molekül verhält sich starr, der Schwingungsfreiheitsgrad ist "eingefroren", es hat nur 5 Freiheitsgrade. Da die entsprechende Temperatur für die meisten Gase relativ hoch liegt, ist der experimentelle Befund verständlich. Bei niedrigen Temperaturen wird die Translationsenergie kleiner als das "Rotationsquant" $\hbar^2/2I$ und die Rotation "friert ein", sodaß nur die Translationsbewegung zur spezifischen Wärme beiträgt.

Für mehratomige Moleküle sind die Verhältnisse komplizierter. Es gibt i.a. drei Hauptträgheitsachsen (und zugehörige Trägheitsmomente, vgl. M 3.2), um die Rotationen stattfinden können. Auch für die Schwingungen gibt es mehrere Möglichkeiten, die den klassischen Normalschwingungen entsprechen. Verwendet man die zugehörigen Normalkoordinaten, so sind die Schwingungen (für kleinere Auslenkungen) entkoppelt.

Übungen

- 40) Die Entwicklung von U (bzw. U_{eff}) um das Minimum kann vermieden werden, indem man U_{eff} durch eine geeignete (mit Parametern versehene) Funktion ersetzt, für welche die Schrödingergleichung exakt gelöst werden kann. In der Funktion enthaltene Parameter treten dann im Spektrum auf und ermöglichen eine Anpassung an gemessene Spektren. Damit erhält man Aufschlüsse über das Molekülpotential. Das folgende Beispiel ist besonders einfach:

$$V(r) = -\frac{a}{r} + \frac{b}{r^2} \quad a, b > 0$$

Bestimme das Spektrum mit Hilfe von Übungsaufgabe 33 aus dem für das Coulombpotential. Für welche Parameterwerte resultiert die Aufspaltung in ein Vibrations- bzw. Rotationsspektrum? Bestimme die auftretenden Parameter ($V(r_0), \omega, I$) in Termen von a, b .

Hinweis: Das Coulombspektrum ist bezüglich l entartet. Durch den Term $\sim b$ wird die Entartung aufgehoben. Um die Technik von 5.30 anwenden zu können, muß man vorher die Hauptquantenzahl n des Coulombproblems durch die sog. radiale Quantenzahl N ausdrücken ($n = N - l - 1, N = 0, 1, 2, \dots$). Bei der Lösung des Coulombproblems tritt zunächst stets N auf.

Ergänzung: Die Lösung der Schrödingergleichung für das oben angegebene Potential findet eine Anwendung in der relativistischen Theorie des Coulombproblems für ein (spinloses) Teilchen. Die Parameter a, b haben in diesem Fall natürlich eine ganz andere physikalische Bedeutung (und ganz andere numerische Werte).

5.8 Wahrscheinlichkeitsdichte und -stromdichte

Als Funktion von (t, \mathbf{x}) beschreibt die Ortsdarstellung $\langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle$ eines (zeitabhängigen) Zustands einen lokalen Vorgang in Raum und Zeit (“Schrödingerwelle”). Über die Wahrscheinlichkeitsinterpretation besteht die Möglichkeit, daraus eine Größe zu konstruieren, die als “Wahrscheinlichkeitsdichte” interpretiert werden kann. Wir zeigen nun, daß diese Interpretation die Züge aufweist, die für lokale Phänomene in Raum und Zeit charakteristisch sind (vgl. M 3.1, ED 1.1, 2.1, 2.9). Der Einfachheit halber betrachten wir nur ein Teilchen in einem Potential V . Die Betrachtung kann auf mehrere Teilchen verallgemeinert werden. Man muß aber “damit leben”, daß der Ortsraum für n Teilchen $3n$ Dimensionen hat (vgl. 4.4).

Die “Wellenfunktion”

$$\langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle =: \psi(\mathbf{x}, t)$$

erfüllt die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x}, t) - V\psi(\mathbf{x}, t) = 0.$$

Der reelle Ausdruck

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \Psi(t) | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle$$

hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte: das Integral über den Ortsraum

$$\int \rho(\mathbf{x}, t) d^3x = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$$

entspricht der Normierung der Wahrscheinlichkeit.

Da die Wahrscheinlichkeit erhalten ist

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 0,$$

sollte es für ρ eine lokale Bilanzgleichung (Kontinuitätsgleichung) geben, die den Erhaltungssatz sichert. Es sollte also eine Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ geben, für die

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

ist. Es ist leicht nachzurechnen, daß diese Kontinuitätsgleichung aus der Schrödingergleichung folgt, wenn der Strom die Form

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) = \\ &= \frac{1}{2m} (\langle \Psi(t) | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{P} | \Psi(t) \rangle + \\ &\quad + \langle \Psi(t) | \mathbf{P} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle) \end{aligned}$$

hat.

Wie aus dem letzten Ausdruck zu sehen ist, entspricht diese Wahrscheinlichkeitsstromdichte einer Art "Strömungsgeschwindigkeit" des durch ψ beschriebenen Wellenvorgangs. Durch Betrachten von Beispielen läßt sich das erhärten. Für ein freies Teilchen

$$\langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}t\right)$$

erhält man z.B.

$$\rho = \frac{1}{(2\pi)^3}, \quad \mathbf{j} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Eine ebene Schrödingerwelle kann man sich daher als einen Teilchenstrom vorstellen, wobei die mittlere Dichte 1 Teilchen pro Volumen $(2\pi)^3$ beträgt und die Teilchen die mittlere Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ haben.

Mit Hilfe von ρ läßt sich ein Zusammenhang mit der klassischen Physik herstellen. Dazu setzen wir die Wellenfunktion als Exponentialfunktion an

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(S(\mathbf{x}, t) + iK(\mathbf{x}, t))\right), \quad S = S^*, K = K^*.$$

Durch Einsetzen in die Schrödingergleichung erhält man eine nichtlineare, komplexe Differentialgleichung. Aus ihrem Real- bzw. Imaginärteil erhält man zwei Gleichungen zwischen K und S . Die Rechnung ist eine etwas mühevollere Differenzierungsübung. Das Resultat kann in folgender Form geschrieben werden:

$$\frac{\partial K}{\partial t} + \frac{1}{m}(\nabla S) \cdot (\nabla K) = \frac{\hbar}{2m} \Delta S$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = \frac{1}{2m}((\nabla K)^2 - \hbar\Delta K)$$

Setzt man den Ansatz für ψ in die oben angegebenen Ausdrücke für ρ, \mathbf{j} ein, so erhält man

$$\rho = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}K\right), \quad \mathbf{j} = \frac{1}{m}\rho\nabla S$$

und die erste Differentialgleichung ist i.W. die Kontinuitätsgleichung. Aus der Form von \mathbf{j} ist ersichtlich, daß die Richtung von \mathbf{j} den Wellentrajektorien entspricht.

Die zweite Gleichung ist mit der klassischen Hamilton-Jacobigleichung eng verwandt. Für die klassische Hamiltonfunktion

$$H_{kl}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}_{kl}^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{kl})$$

lautet die Hamilton-Jacobigleichung (vgl. M 4.10) für die Wirkungsfunktion S_{kl}

$$\frac{\partial S_{kl}}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S_{kl})^2 + V = 0.$$

Die quantenmechanische Gleichung unterscheidet sich davon durch den Term auf der rechten Seite. Setzt man S als Potenzreihe in \hbar^2 an

$$S = S_0 + \hbar^2 S_2 + \dots$$

so sieht man aus der ersten oben angegebenen Differentialgleichung, daß eine Entwicklung von K mit einem Term $\sim \hbar$ beginnt. Die rechte Seite der zweiten Gleichung beginnt daher mit einem Term $\sim \hbar^2$ und man erhält für S_0 die klassische Hamilton-Jacobigleichung. Ihre Lösung kann daher als unterste Näherung für die Quantenmechanik verwendet werden. Diese Entwicklung heißt die quasiklassische oder WKB-Näherung (die Buchstaben stehen für die Namen Wentzel, Kramers, Brillouin). Die höheren Terme müssen durch iterative Lösung der Gleichungen für K und S bestimmt werden. Dabei stellt sich heraus, daß S nur gerade und K nur ungerade Potenzen von \hbar enthält. Ob die Reihe konvergiert (bzw. wenn das der Fall ist, wie rasch), hängt vom betrachteten Potential ab. Der Faktor $1/\hbar$ im Exponentialansatz ist aber ein wesentliches Relikt der Quantentheorie: "ganz klassisch" geht es nicht! Der Zugang über S läßt sich zu einem selbständigen Zugang zur Quantentheorie

ausbauen, der v.a. von Feynman entwickelt wurde. Die WKB-Näherung werden wir in einem späteren Abschnitt betrachten.

Wesentliche Unterschiede zur klassischen Physik ergeben sich aus der Tatsache, daß ψ selbst keine Meßgröße ist. Um die Unterschiede deutlich zu machen, betrachten wir den stationären Fall. Die Zeitabhängigkeit ist dann in einem Phasenfaktor enthalten, den wir abspalten können (in der klassischen Physik ist das Analogon dazu eine Beschreibung durch die “reduzierte” Wirkung W_{kl} anstelle von S_{kl} , vgl. M 4.10). Die stationäre Schrödingergleichung ist

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) - E \right) \psi(\mathbf{x}) = 0$$

In der klassischen Physik ist das Analogon der Energiesatz

$$\frac{1}{2m} \mathbf{p}_{kl}^2 + V(\mathbf{x}_{kl}) - E = 0$$

Die klassische Bewegung ist nur in Bereichen für \mathbf{x}_{kl} “erlaubt” (d.h. möglich), in denen der Impuls \mathbf{p}_{kl} reell ist, d.h. in Bereichen mit $E \geq V(\mathbf{x}_{kl})$. In der Quantentheorie gibt es auch in “klassisch verbotenen” Gebieten eine Lösung $\psi(\mathbf{x})$ und damit eine von Null verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho(\mathbf{x})$. Eine Konsequenz davon ist der sogenannte “quantenmechanische Tunneleffekt”. Sind zwei klassisch erlaubte Bereiche durch einen Potentialwall getrennt, so kann ein Teilchen in der klassischen Mechanik nur dann aus einem Bereich in den anderen gelangen, wenn seine kinetische Energie größer als die potentielle Energie am höchsten Punkt des Walls ist. Bei kleinerer Energie wird es vom Wall reflektiert. In der Quantentheorie gibt es im letzteren Fall auch jenseits des Walls eine (durchgelassene) Schrödingerwelle. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen den Wall “durchtunnelt”, ist endlich. In Analogie zur Optik kann man in einfachen Fällen einen Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten als Verhältnis der entsprechenden Komponenten des Wahrscheinlichkeitsstroms definieren (vgl. Übungen).

Übungen

- 41) Berechne ρ und \mathbf{j} für zwei in entgegengesetzter Richtung laufende ebene Wellen mit verschiedener Amplitude. Was ergibt sich für gleiche Amplitude?
- 42) Berechne die Komponenten von \mathbf{j} in Polarkoordinaten $(j_r, j_\theta, j_\varphi)$ für ein Teilchen in einem Coulombpotential. Welches magnetische Bahnmoment ergibt sich für ein Elektron?
- 43) Betrachte die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem Bereich mit konstantem Potential V_0 . Berechne ρ und j_x für $E < V_0$.
- 44) Die eindimensionale Bewegung eines Teilchens im Potential

$$V = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \text{ und } x > a \\ V_0 > 0 & \text{für } 0 < x < a \end{cases} .$$

ist für $E < V_0$ zu untersuchen. Dabei soll von links ($x < 0$) eine ebene Welle auf den Wall zulaufen. Die durch

$$R = \frac{j_x \text{ (reflektiert)}}{j_x \text{ (einlaufend)}}, \quad T = \frac{j_x \text{ (durchgelassen)}}{j_x \text{ (einlaufend)}}$$

definierten Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten sind zu berechnen und zu diskutieren.

6. Quantenmechanische Näherungsverfahren

Wie in der klassischen Physik sind auch in der Quantentheorie nur verhältnismäßig wenige physikalische Probleme exakt lösbar. Es ist daher notwendig, Näherungsverfahren zu entwickeln, mit denen man möglichst große Klassen von Problemen untersuchen kann. Wir besprechen in diesem Kapitel einige Verfahren, die praktische Bedeutung erlangt haben. Anwendungen sind z.T. im Text, z.T. in den Übungen enthalten. Sie beziehen sich auf Problemstellungen, die schon im vorhergehenden Kapitel untersucht wurden, d.h. also auf Probleme mit wenigen relevanten Freiheitsgraden. Die Näherungsverfahren selbst sind aber so konstruiert, daß sie auch für kompliziertere Probleme verwendet werden können.

6.1 Stationäre Störungstheorie

Für eine Reihe quantenmechanischer Eigenwertprobleme besteht der Hamiltonoperator aus zwei Teilen $H = H^{(0)} + H^{(1)}$, von denen der eine ($H^{(0)}$) exakt diagonalisierbar ist. Stellt der zweite Teil $H^{(1)}$ in irgendeinem Sinn eine kleine Korrektur zu $H^{(0)}$ dar, so kann man die Eigenwerte und Eigenzustände von H aus denen von $H^{(0)}$ berechnen. Das entsprechende Näherungsverfahren heißt (zeitunabhängige oder stationäre) Störungstheorie. Wir nehmen also an, daß die Eigenwerte $E_n^{(0)}$ und Eigenzustände $|n\rangle$ von $H^{(0)}$ bekannt sind

$$H^{(0)}|n\rangle = |n\rangle E_n^{(0)}.$$

Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß das Spektrum von $H^{(0)}$ nicht entartet sein soll. Die Eigenzustände bilden dann ein orthogonales, vollständiges System

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}$$

Wir suchen die Eigenwerte E_n und Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ von H mit Hilfe einer unitären Transformation U , die H im Raum der ungestörten Eigenzustände $|n\rangle$ diagonalisiert

$$\langle n|U^\dagger H U|n'\rangle = E_n \delta_{nn'}, \quad |\psi_n\rangle = U|n\rangle \exp(i\alpha).$$

α ist dabei eine physikalisch irrelevante Phase, die wir so wählen, daß

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

ist. Das hat zur Folge, daß die Diagonalelemente von $U - \mathbf{1}$ verschwinden und ist für die Rechnung zweckmäßig. Diese Phasenwahl ist allerdings nur für **einen** Eigenzustand $|n\rangle$ möglich ($\alpha = \alpha(n)$).

Um die Eigenwerte E_n und die Matrixelemente $\langle n' | U | n \rangle$ approximativ zu bestimmen, schreiben wir

$$H^{(1)} =: gW$$

und fassen $U = U(g)$ und $E_n = E_n(g)$ als Funktionen eines kleinen, numerischen Parameters g auf. Offensichtlich ist $U(g=0) = \mathbf{1}$ und $E_n(g=0) = E_n^{(0)}$. Wir entwickeln nach Potenzen von g

$$U = \mathbf{1} + gU_1 + g^2U_2 + \dots$$

$$U^\dagger H U = H^{(0)} + gS_1 + g^2S_2 + \dots$$

und erhalten

$$S_1 = U_1^\dagger H^{(0)} + H^{(0)} U_1 + W$$

$$S_2 = U_2^\dagger H^{(0)} + H^{(0)} U_2 + U_1^\dagger H^{(0)} U_1 + U_1^\dagger W + W U_1$$

usw. Entwickeln wir in der Diagonalitätsbedingung auch den Eigenwert nach g

$$E_n = E_n^{(0)} + gE_n^{(1)} + g^2E_n^{(2)} + \dots,$$

so können wir die Koeffizienten von g, g^2, \dots vergleichen und erhalten

$$E_n^{(j)} = \langle n | S_j | n \rangle, \quad \langle n | S_j | n' \rangle = 0 \quad n \neq n', \quad n = 1, 2, \dots$$

Als zusätzliche Information müssen wir die aus der Unitarität folgenden Beziehungen

$$U_1 + U_1^\dagger = 0$$

$$U_2 + U_2^\dagger + U_1 U_1^\dagger = 0$$

usw. (vgl. Übungsbeispiel 2.14) berücksichtigen. Eliminieren wir U_1^\dagger aus S_1 , so erhalten wir

$$S_1 = [H^{(0)}, U_1] + W$$

Damit wird

$$E_n^{(1)} = \langle n|W|n\rangle$$

$$\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right) \langle n|U_1|n'\rangle + \langle n|W|n'\rangle = 0$$

Damit sind die erste Korrektur zum Eigenwert und die entsprechenden Matrixelemente erster Ordnung von U bestimmt. Die höheren Korrekturen können (mit wachsendem Aufwand) analog berechnet werden. Dabei ist es vorteilhaft, rekursiv vorzugehen. Für S_2 bedeutet das z.B., daß man zuerst U_2^\dagger mit der Unitaritätsbeziehung eliminiert, das Resultat in Termen von S_1 ausdrückt und die Resultate der ersten Näherung verwendet.

Insgesamt erhält man bis zu Termen 2. Ordnung für den Eigenwert

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n|H^{(1)}|n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n|H^{(1)}|n'\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} + \dots$$

Der erste Korrekturterm stimmt mit dem Resultat überein, das man mit Hilfe des Hellmann-Feynman-Theorems erhält (vgl. Übungsaufgaben 3.12, 3.13). Der zweite Term ist jedoch auch bei schwacher Störung wichtig, wenn die Diagonalelemente von $H^{(1)}$ verschwinden.

Die Matrixelemente von U sind bis zu Termen 2. Ordnung ($m \neq n$)

$$\langle m|U|n\rangle = \frac{-1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(\langle m|H^{(1)}|n\rangle \left(1 + \frac{\langle n|H^{(1)}|n\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \right) - \sum_{n' \neq n} \frac{\langle m|H^{(1)}|n'\rangle \langle n'|H^{(1)}|n\rangle}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \right) + \dots$$

Die Störungstheorie ist für die Bestimmung von Eigenwerten umso besser geeignet, je kleiner die Matrixelemente von $H^{(1)}$ relativ zu den Energiedifferenzen zwischen den Niveaus des ungestörten Problems sind. Liegen zwei dieser Niveaus nahe beieinander, so muß die Störungstheorie modifiziert werden. Bei Entartungen im ungestörten Spektrum muß man zuerst anstelle der Zustände mit gleichen Eigenwerten $E_n^{(0)}$ eine solche Linearkombination einführen, daß die Matrixelemente von $H^{(1)}$ zwischen den neuen Zuständen verschwinden und dann das Störungsverfahren anwenden; es gibt dann keine verschwindenden Energienener. Die Entartung wird dabei i.a. durch die Störung aufgehoben, d.h. die Eigenwerte des gestörten Problems sind voneinander verschieden.

Bei kleiner Störung bleiben aber die ursprünglich gleichen Niveaus nahe beisammen.

Die hier beschriebene Methode der näherungsweise Diagonalisierung mit einer kanonischen Transformation kann auch für andere Operatoren als H verwendet werden, sofern die entsprechenden Voraussetzungen erfüllt sind.

6.2 Variationsverfahren

Die Bestimmung von Eigenwerten und Eigenfunktionen mit einem Variationsverfahren geht auf Lord Rayleigh (J.W. Strutt) zurück und wurde 1909 von W. Ritz zu einer allgemeinen mathematischen Methode ausgebaut. In der Quantentheorie gehören Variationsverfahren vor allem seit der Entwicklung leistungsfähiger Rechner zu den wichtigsten und am meisten verwendeten Methoden. Wir diskutieren die Grundidee für ein stationäres Einteilchenproblem (die Verfahren sind aber in hohem Maß verallgemeinerungsfähig).

Ausgangspunkt ist die Tatsache, daß der niedrigste Eigenwert E_0 eine untere Schranke für den Mittelwert der Energie in einem beliebigen stationären Zustand $|\psi\rangle$ bildet. Einen Beweis für diese Aussage erhält man durch Einschieben des vollständigen Systems der exakten Eigenzustände $|E_n\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|H|E_n\rangle\langle E_n|\psi\rangle = \\ &= \sum_n E_n \langle\psi|E_n\rangle\langle E_n|\psi\rangle = \\ &= \sum_n (E_0 + E_n - E_0) \langle\psi|E_n\rangle\langle E_n|\psi\rangle = \\ &= E_0 + \sum_n (E_n - E_0) |\langle E_n|\psi\rangle|^2 \geq E_0 \end{aligned}$$

Dabei haben wir angenommen, daß $|\psi\rangle$ normiert und das Spektrum nicht entartet ist. Zu einem Näherungsverfahren für E_0 kommt man, indem man für $|\psi\rangle$ einen Ansatz macht, der von einem oder mehreren Parametern β abhängt (sog. Probezustand, trial state)

$$|\psi\rangle = |\psi_0(\beta)\rangle \quad \langle\psi_0(\beta)|\psi_0(\beta)\rangle = 1$$

und die Parameter β so variiert, daß der Erwartungswert von H minimal wird

$$\langle \psi_0(\beta) | H | \psi_0(\beta) \rangle = \text{Min.}, \quad \delta_\beta \langle \psi_0(\beta) | H | \psi_0(\beta) \rangle = 0$$

Mit den daraus bestimmten “optimalen” Werten $\beta = \beta_0$ erhält man einen Näherungswert $E_0(\beta_0)$ für E_0

$$E_0(\beta_0) = \langle \psi_0(\beta_0) | H | \psi_0(\beta_0) \rangle \geq E_0$$

Der entsprechende Zustand $|\psi_0(\beta_0)\rangle$ gibt eine Näherung für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$. Die Näherung ist umso besser, je mehr Eigenschaften des exakten Grundzustands in den Ansatz $|\psi_0(\beta)\rangle$ “eingebaut” werden. Dazu gehören insbesondere allfällige Symmetrieeigenschaften. Meist wird man den Ansatz für $|\psi_0(\beta)\rangle$ in einer speziellen Darstellung machen, also z.B. in der Ortsdarstellung eine Probefunktion $\langle \mathbf{x} | \psi_0(\beta) \rangle$ ansetzen. Der Ansatz sollte dann das asymptotische Verhalten der strengen Lösung einigermaßen gut beschreiben. Im allgemeinen ist der resultierende Fehler in den Eigenwerten wesentlich kleiner als im Eigenzustand. Das kann man aus der oben angegebenen Formel für $\langle \psi | H | \psi \rangle$ sehen: da $\langle E_n | \psi \rangle$ in den Erwartungswert quadratisch eingeht, verursacht ein Fehler von $\sim 10\%$ im Eigenzustand nur einen Fehler von $\sim 1\%$ im Eigenwert.

Das Verfahren kann auf angeregte Zustände übertragen werden. Man kann sich jedoch leicht davon überzeugen, daß der exakte Eigenwert E_n nur dann eine untere Schranke darstellt, wenn der entsprechende Ansatz $|\psi_n(\beta)\rangle$ zu allen niedrigeren Zuständen $|\psi_0(\beta_0)\rangle, |\psi_1(\beta_1)\rangle \cdots |\psi_{n-1}(\beta_{n-1})\rangle$ (die man vorher bestimmen muß) orthogonal ist. Das ist mit einfachen Ansätzen nicht immer leicht zu erreichen.

Ohne Orthogonalität kommt man durch, wenn man anstelle von $\langle \psi | H | \psi \rangle$ den Ausdruck

$$Z_n(\beta) := \langle \psi_n(\beta) | H^2 | \psi_n(\beta) \rangle - (\langle \psi_n(\beta) | H | \psi_n(\beta) \rangle)^2$$

betrachtet (der für exakte Eigenzustände verschwindet) und die optimalen Parameterwerte aus

$$Z_n(\beta) = \text{Min.}, \quad \delta_\beta Z_n(\beta) = 0$$

bestimmt. Der Näherungs-Eigenwert ist wie oben

$$E_n(\beta_n) = \langle \psi_n(\beta_n) | H | \psi_n(\beta_n) \rangle.$$

Der Wert von Z_n am Minimum ermöglicht eine grobe Abschätzung des Fehlers δE_n im Eigenwert. Setzen wir

$$\langle \psi_n(\beta_n) | H^2 | \psi_n(\beta_n) \rangle = (E_n + \delta E_n)^2 \approx E_n^2 + 2E_n \delta E_n$$

so ist

$$Z_n(\beta_n) \approx 2E_n \delta E_n, \quad \delta E_n \approx \frac{Z_n(\beta_n)}{2E_n(\beta_n)}.$$

Nachteilig ist an der Methode, daß der Erwartungswert von H^2 zwischen Probezuständen komplizierter zu berechnen ist als der von H .

In einfachen Fällen kann man die Berechnung von Erwartungswerten vereinfachen, indem man als Probezustände solche verwendet, die aus exakten Eigenzuständen eines geeigneten anderen quantenmechanischen Problems durch eine Transformation hervorgehen, deren Parameter man als Variationsparameter verwendet. Wir führen das an einem einfachen Beispiel vor. Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V.$$

Die Eigenzustände $|n\rangle$ und Eigenwerte α_n von

$$H' = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + W$$

sollen exakt bekannt sein

$$H'|n\rangle = |n\rangle\alpha_n, \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}.$$

Wir betrachten als Probezustände

$$|\psi_n(\beta)\rangle = U_D^\dagger(\beta)|n\rangle, \quad U_D(\beta) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\beta D\right)$$

mit dem Dilatationsoperator (vgl. Übungsbeispiel 4.7)

$$D = \frac{1}{2}(\mathbf{X} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{X}).$$

Mit Hilfe der Resultate der Übungsbeispiele 4.7 und 4.13 kann man die Wirkung der Dilatation auf Funktionen von \mathbf{P} bzw. \mathbf{X} ausrechnen

$$\begin{aligned} U_D(\beta)F(\mathbf{P})U_D^\dagger(\beta) &= F(\mathbf{P}/\lambda), \\ U_D(\beta)F(\mathbf{X})U_D^\dagger(\beta) &= F(\lambda\mathbf{X}), \quad \lambda = \exp(\beta). \end{aligned}$$

Der Erwartungswert kann daher zwischen den Zuständen $|n\rangle$ berechnet werden

$$\begin{aligned} \langle \psi_n(\beta) | H | \psi_n(\beta) \rangle &= \langle n | U_D H U_D^\dagger | n \rangle = \\ &= \langle n | \frac{1}{2m\lambda^2} \mathbf{P}^2 + V(\lambda \mathbf{X}) | n \rangle \\ &= \langle n | \frac{1}{\lambda^2} (H' - W(\mathbf{X})) + V(\lambda \mathbf{X}) | n \rangle = \\ &= \frac{1}{\lambda^2} \alpha_n + \langle n | V(\lambda \mathbf{X}) - \frac{1}{\lambda^2} W(\mathbf{X}) | n \rangle, \end{aligned}$$

was in der Regel einfacher ist. Man kann sich davon überzeugen, daß zwischen den mit $|\psi_n(\beta_0)\rangle$ berechneten Erwartungswerten der Virialsatz gilt. Die Näherungszustände erfüllen daher Relationen, die auch für die exakten Eigenzustände gelten, was zu kleinen Fehlern führt.

Verwendet man als Ausgangszustände für zentralsymmetrische Potentiale die Eigenzustände des Wasserstoffatoms, so läuft das Verfahren darauf hinaus, daß als Variationsparameter i.W. der Bohrsche Radius a_0 benützt wird. Das Verfahren kann im Prinzip auf andere Transformationen verallgemeinert werden. Das hat aber nur dann einen Sinn, wenn die Wirkung der Transformation auf H bekannt ist.

Bei eindimensionalen Problemen bieten sich als Basiszustände $|n\rangle$ die Eigenzustände des harmonischen Oszillators an. Man muß aber beachten, daß die Erwartungswerte ungerader Potenzen von Q zwischen diesen Zuständen verschwinden

$$\langle n | Q^{2k+1} | n \rangle = 0 \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

(das ist am einfachsten mit Hilfe des Paritätsoperators zu zeigen). Sind solche Terme in H wichtig, so kann das zu relativ großen Fehlern führen. Darauf muß man insbesondere bei Problemen achten, bei denen die Parität nicht erhalten ist (vgl. Übungen).

Übungen

- 1) Zeige, daß für die nach dem zuletzt beschriebenen Verfahren näherungsweise bestimmten Eigenwerte und Eigenzustände das Hellmann-Feynman-Theorem (Übungsbeispiel 3.12) erfüllt ist.
- 2) Für den anharmonischen Oszillator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (\mathcal{P}^2 + \mathcal{Q}^2) + \frac{\alpha}{4} \mathcal{Q}^4, \quad [\mathcal{Q}, \mathcal{P}] = i\mathbf{1}, \quad \alpha > 0$$

sind die Eigenwerte mit dem zuletzt angedeuteten Variationsverfahren zu bestimmen. Das Verhalten des n -ten Eigenwertes ist für kleine und große Werte von α zu untersuchen.

- 3) Entwickle eine geeignete (und möglichst einfache) Verallgemeinerung des zuletzt beschriebenen Variationsverfahrens, die für Probleme geeignet ist, bei denen die Parität nicht enthalten ist. Die folgenden beiden Aufgaben können als Anwendungsbeispiele dienen.
- 4) Bestimme die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + g \left(X + \frac{1}{b} \exp(-bX) \right) \quad bg > 0$$

Dieses Potential (Toda-Potential) ist in der Gitterdynamik von Bedeutung: beschreibt man die Wechselwirkung zwischen benachbarten Atomen einer linearen Kette durch dieses Potential (wobei X dem Abstand der Atome entspricht), so ist das entstehende (periodische) System für N Teilchen im Rahmen der klassischen Mechanik integrabel.

- 5) Für eine Reihe physikalischer Anwendungen sind Potentiale mit zwei Minima (sog. double well) von Interesse. Als Beispiel dafür sind für den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}^2 - 4\mathcal{Q}^2 + \alpha\mathcal{Q}^3 + \mathcal{Q}^4, \quad [\mathcal{Q}, \mathcal{P}] = i\mathbf{1}, \quad \alpha \geq 0$$

die Eigenwerte näherungsweise zu bestimmen (numerisch für $\alpha = 0$ und $\alpha = 0.4$). Von der Form des Potentials her ist zu erwarten, daß niedrig liegende Zustände (in etwa solche, die unterhalb des Potentialmaximums liegen) eventuell anders behandelt werden sollten,

als hohe Anregungszustände. Die Zahl der (in diesem Sinn) niedrigen Zustände ist von Interesse.

Zum Vergleich: ein entsprechend skaliertes harmonischer Oszillator hätte die Niveaus $2n + 1 + k$, $n = 0, 1, 2, \dots$ wobei k dem tieferen Minimum des double-well-Potentials entspricht.

Einige numerisch bestimmte Eigenwerte sind

$\alpha = 0$	$\alpha = 0.4$
$E_0 = -1.7104$	$E_0 = -2.6153$
$E_1 = -1.2479$	$E_1 = -0.7202$
$E_{20} = 101.599$	$E_{20} = 101.229$

6) Charmonium.

Die Bindung von zwei Charm-Quarks gleicher Masse m_q ($m_q c^2 = 1.65 \text{ GeV}$) aneinander ist zu untersuchen. Die Kräfte zwischen den Teilchen sollen durch das sog. Trichterpotential

$$V(R) = -\frac{A}{R} + BR - C$$

beschrieben werden. Geeignete Zahlen sind

$$A = 0.27, \quad B = 0.25 \text{ (GeV)}^2, \quad C = 0.76 \text{ GeV}$$

wobei R in Einheiten $(\text{GeV})^{-1}$ gemessen ist. Die Ruheenergie $E_r = E + 2m_q c^2$ der folgenden Zustände:

- a) $l = 0$, Grundzustand (ψ - Teilchen)
- b) $l = 0, 1$. Anregungszustand (ψ' - Teilchen)
- c) $l = 1$, unterster Zustand,

ist näherungsweise zu berechnen.

7) Muonatome.

In Muonatomen bewegt sich anstelle eines Elektrons ein negatives Muon μ^- um den Kern. Wegen der größeren Masse des Muons ist der Bohrsche Radius rund 200 mal kleiner und das Teilchen "spürt" die Ladungsverteilung des Kerns. Der Einfluß der Elektronenhülle ist im Vergleich dazu gering. Für die Berechnung von Energieniveaus kann daher mit dem Potential einer ausgedehnten Ladungsverteilung ρ mit der Gesamtladung Ze ($Z = \text{Kernladungszahl}$) gerechnet werden. Als einfachstes Modell für ρ soll eine Verteilung

$$\rho(R) = a \exp(-\lambda R)$$

verwendet werden. Die untersten drei Energieniveaus sollen für muonischen Wasserstoff, muonisches Kalzium und muonisches Blei berechnet werden. Daten:

$$m(\mu) = 206.77m(e)$$

H : $Z = 1$, Ladungsradius 0.86 fm, Massenzahl 1

Ca : $Z = 20$, Ladungsradius 4.5 fm, Massenzahl 40

Pb : $Z = 82$, Ladungsradius 6.7 fm, Massenzahl 208

6.3 Die quasiklassische Näherung

In Abschnitt 5.8 war bereits angedeutet worden, welche Gesichtspunkte dieser Näherung zugrundeliegen. Wir betrachten der Einfachheit halber ein stationäres, eindimensionales Problem. Nach Abspaltung der Zeitabhängigkeit

$$\psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \varphi(x) \quad \text{bzw.} \quad S(x, t) = -Et + W(x)$$

lautet der Exponentialansatz für φ

$$\varphi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(W(x) + iK(x))\right).$$

Aus der Schrödingergleichung für φ bzw. φ^* erhält man (vgl. 5.8) als Gleichungen zur Bestimmung von W und K

$$\frac{1}{2m}(W')^2 + V - E = \frac{1}{2m}((K')^2 - \hbar K'')$$

$$W'K' = \frac{\hbar}{2}W''.$$

Dabei bedeutet $'$ die Ableitung nach x . Wir lösen diese Gleichungen durch Reihenentwicklung nach Potenzen von \hbar (wobei wir beachten, daß K wegen der zweiten Gleichung $\sim \hbar$ sein muß):

$$W = W_0 + \hbar^2 W_2 + \hbar^4 W_4 + \dots$$

$$K = \hbar K_1 + \hbar^3 K_3 + \dots$$

In niedrigster Näherung erhalten wir aus der ersten Gleichung

$$W'_0 = \pm \sqrt{2m(E - V)} =: \pm p(x), \quad W_0 = \pm \int^x p(x') dx'$$

und aus der zweiten

$$K'_1 = \frac{p'}{2p}, \quad K_1 = \frac{1}{2} \ln p(x), \quad \exp(-K_1) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}.$$

Durch Fortsetzung des Iterationsverfahrens erhält man (allerdings mit rasch wachsendem Rechenaufwand) weitere Glieder der Reihen für W bzw. K . Das Resultat für W_2 hat die Form

$$W_2' = \frac{3}{8} \frac{(p')^2}{p^3} - \frac{p''}{4p^2} = \frac{m}{4p^3} \left(V'' + \frac{5m}{2} \left(\frac{V'}{p} \right)^2 \right).$$

Daraus ist ersichtlich, daß die unterste Näherung nur dann gut ist, wenn sich das Potential nicht zu rasch ändert.

In unterster Näherung (auf die wir uns von nun an beschränken) liefert das Verfahren daher zwei partikuläre Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm}(x) &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right) = \\ &= \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{1}{2} \ln p(x) \right). \end{aligned}$$

Die Phase der beiden Lösungen ist im Bereich $E > V(x)$ reell. In diesem Gebiet ist eine klassische Bewegung möglich ("erlaubter" Bereich, vgl. M 2.1). Dieser Bereich wird durch einen der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung begrenzt. Ist $x = a$ ein oberer Umkehrpunkt, so ist die Phase der Lösungen im ganzen Gebiet $x < a$ reell. Die allgemeine Lösung in diesem Bereich ist

$$\varphi(x < a) = A_+ \varphi_+ + A_- \varphi_-$$

mit beliebigen Konstanten A_{\pm} .

An der oberen Grenze $x = a$ ist φ_{\pm} wegen $p(a) = 0$ divergent. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die WKB-Näherung in der Umgebung von $x = a$ nicht möglich ist. Die Gleichungen für W und K können aber auch für $x > a$ gelöst werden. In diesem Fall ist $(W')^2 < 0$ und daher W imaginär. Man erhält zwei partikuläre Lösungen mit reellen Exponentialfunktionen. Aus physikalischen Gründen muß eine mit wachsendem x exponentiell zunehmende Lösung ausgeschlossen werden: eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit, die bei Fortschreiten in das klassisch "verbotene" Gebiet hinein zunähme, wäre Unsinn. Die allgemeine Lösung in diesem Bereich ist daher

$$\varphi(x > a) = \frac{B}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| \right).$$

Zur Lösung von Problemen, für die beide Bereiche gebraucht werden (z.B. für die Untersuchung von "Tunneleffekten") muß man Beziehungen zwischen den Konstanten B, A_{\pm} herstellen, die der betrachteten physikalischen Situation entsprechen. Da die WKB-Näherung in der Nähe des Umkehrpunktes nicht konvergiert, ist ein stetiger Anschluß an dieser Stelle nicht unmittelbar durchführbar.

Von mehreren möglichen Verfahren zur Lösung des Anschlußproblems skizzieren wir eines, das wenig Aufwand erfordert. Wir betrachten die analytische Fortsetzung der WKB-Lösungen zu komplexen Werten von x und untersuchen ihr Verhalten in der Nähe des Umkehrpunktes. Dazu setzen wir

$$x = a + r \exp(i\alpha), \quad r \ll a.$$

Wir entwickeln $V(x)$ in der Nähe des Umkehrpunktes

$$V(x) = V(a) + V'(a)(x - a) + \dots, \quad V'(a) > 0$$

und betrachten die in den einzelnen Lösungen auftretenden Ausdrücke. Wir beginnen mit der Lösung im "klassisch verbotenen" Gebiet:

$$\begin{aligned} \int_a^x \sqrt{2m(V - E)} dx' &\approx \sqrt{2mV'(a)} \int_a^x dx' \sqrt{x' - a} = \\ &= \frac{2}{3} \sqrt{2mV'(a)} r^{3/2} \exp\left(i \frac{3\alpha}{2}\right), \end{aligned}$$

$$\frac{1}{(2m(V - E))^{1/4}} \approx (2mV'(a)r)^{-1/4} \exp\left(-i \frac{\alpha}{4}\right).$$

Für die beiden Lösungen φ_{\pm} im "klassisch erlaubten" Gebiet betrachten wir die reelle Achse ($\alpha = 0$) und erhalten analog

$$\begin{aligned} \pm i \int_a^x p(x') dx' &\approx \frac{2}{3} \sqrt{2mV'(a)} r^{3/2} (\pm i) \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} &\approx (2mV'(a)r)^{-1/4}. \end{aligned}$$

Verfolgen wir die Lösung im "verbotenen Gebiet" entlang eines Weges C_+ , bei dem der Umkehrpunkt auf einem kleinen Halbkreis in der oberen Hälfte der komplexen Ebene umgangen wird ($C_+ : 0 \leq \alpha \leq \pi$), so erreichen wir dabei für $\alpha \rightarrow \pi$ i.W. φ_- :

$$C_+ : \varphi(x > a) \rightarrow \frac{B}{2} \varphi_-(x) \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right).$$

Auf einem entsprechenden Weg C_- in der unteren Halbebene ($C_- : 0 \geq \alpha \geq -\pi$) erreichen wir φ_+ :

$$C_- : \varphi(x > a) \rightarrow \frac{B}{2} \varphi_+(x) \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right).$$

Daraus erhält man die Konstanten A_{\pm} in Termen von B :

$$A_{\pm} = \frac{B}{2} \exp\left(\pm \frac{i\pi}{4}\right).$$

Die richtig angepaßte Lösung kann daher als \cos geschrieben werden. Ist der Umkehrpunkt $x = a$ ein unterer Umkehrpunkt (sodaß das "klassisch verbotene" Gebiet links von $x = a$ liegt), so läßt sich die angestellte Betrachtung analog durchführen. Eine Formel, die für beide Typen von Umkehrpunkten gilt, ist

$$\varphi(V > E) \rightarrow \varphi(E > V)$$

mit

$$\begin{aligned} \varphi(V > E) &= \frac{B}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| \right) \\ \varphi(E > V) &= \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Nun betrachten wir Energieeigenwerte in quasiklassischer Näherung. Als Maß für einen Energieeigenwert benützen wir die Anzahl n der Nullstellen (Knoten) der Wellenfunktion $\varphi(x)$. Diese ist aus der in die komplexe Ebene analytisch fortgesetzten Wellenfunktion berechenbar. An jeder (einfachen) Nullstelle x_0 von $\varphi(x)$ hat φ'/φ einen Pol mit dem Residuum 1, wie man aus der Entwicklung

$$\varphi(x) = A(x - x_0) + \dots, \quad \varphi'(x) = A + \dots$$

sieht. Integriert man im Komplexen über einen geschlossenen Weg, der alle Nullstellen umfaßt, so erhält man mit der Integralformel von Cauchy

$$2\pi i n = \oint \frac{\varphi'(x')}{\varphi(x')} dx'$$

Um die Formel auf die WKB-Näherung anzuwenden, genügt es, die Lösung im “klassisch erlaubten” Gebiet zwischen zwei Umkehrpunkten $b \leq x \leq a$ zu betrachten: in den anschließenden “verbotenen” Gebieten ist die Lösung exponentiell gedämpft und hat keine Nullstellen. Außerdem genügt es, nur eine der beiden partikulären Lösungen zu betrachten: die Anzahl der Nullstellen muß für beide die gleiche sein. Aus der oben angegebenen Exponentialform für φ_{\pm} erhält man

$$\frac{\varphi'_{\pm}}{\varphi_{\pm}} = \frac{i}{\hbar} p(x) - \frac{p'(x)}{2p(x)}$$

Der zweite Term hat an den Umkehrpunkten einfache Pole mit dem Residuum $1/2$. Das Integral ist

$$-\frac{1}{2} \oint \frac{p'(x)}{p(x)} dx = -\frac{2\pi i}{2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = -i\pi.$$

Insgesamt erhalten wir daher die “Quantenbedingung”

$$2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) = \oint p(x) dx.$$

Das Integral auf der rechten Seite entspricht dabei einem vollen Umlauf auf der klassischen Bahn, d.h. der Bewegung von einem Umkehrpunkt zum anderen und wieder zurück: im Komplexen tragen die beiden Wegstücke wegen des Wurzelvorzeichens mit gleichem Vorzeichen bei. Die angegebene “Quantenbedingung” wurde von Bohr und Sommerfeld vor der Entwicklung des quantenmechanischen Formalismus als Ausdruck des Korrespondenzprinzips vorgeschlagen.

Insgesamt ermöglicht die WKB-Näherung Einblicke in den Zusammenhang zwischen Quantentheorie und klassischer Physik. Es darf aber nicht vergessen werden, daß die Konvergenz des Verfahrens (d.h. die dafür erforderliche Eigenschaft des Potentials) eine wesentliche Voraussetzung für die Gültigkeit der gezogenen Konsequenzen ist. Ein besonders praktisches Verfahren zur Lösung quantenmechanischer Probleme ist die WKB-Näherung nur gelegentlich: in einer Reihe von Fällen ist die Lösung des quantenmechanischen Problems einfacher als die klassische Lösung.

6.4 Teilchen in elektromagnetischen Feldern

Nun untersuchen wir die Bewegung geladener Teilchen in “äußeren” = von außen vorgegebenen elektromagnetischen Feldern. Eine Beschreibung eines solchen Feldes als äußeres Feld ist eine Näherung, bei der vorausgesetzt wird, daß in dem betrachteten System Teilchen + Feld die Rückwirkung der Teilchen auf das Feld vernachlässigt werden kann. Das ist für makroskopische Felder, die von Spulen, Kondensatoren oder anderen elektromagnetischen Anordnungen erzeugt werden, wenigstens dann zu erwarten, wenn die Zahl der Teilchen, die sich im Feld bewegen, nicht makroskopisch ist. Damit wir die im Abschnitt 5.1 erwähnte Methode heranziehen können, bei der nur die Teilchenfreiheitsgrade quantenmechanisch behandelt werden, müssen wir aber auch annehmen, daß eine klassische Beschreibung der dem Feld entsprechenden Freiheitsgrade erlaubt ist. Streng genommen ist jedes Feld, also auch das elektromagnetische, ein physikalisches System, das der Quantentheorie gehorchen muß. Das bedeutet, daß die Feldstärken (und daher auch die Potentiale) durch Operatoren beschrieben werden müssen, die nicht vertauschbar sind. Es müssen dann Operatorlösungen der Maxwell'schen Gleichungen gesucht werden. In vielen praktischen Fällen stellt es aber eine sehr gute Näherung dar, wenn man die Quantennatur des elektromagnetischen Feldes vernachlässigt. Für den statischen Teil des Feldes (z.B. das Coulombfeld von Ladungen) ist das sogar streng erlaubt, denn nur zum Wellenanteil des Feldes gibt es Quanten (Photonen); der andere Anteil benimmt sich auch in der Quantenfeldtheorie klassisch. Physikalisch erscheint es plausibel, daß man aber auch in anderen Situationen eine klassische Beschreibung des Feldes benutzen kann. Es würde der physikalischen Alltagserfahrung widersprechen, wenn man z.B. bei der Beschreibung eines Atoms oder Elektrons im Feld eines großen Elektromagneten das Feld dieses Magneten quantisieren müßte. Das Korrespondenzprinzip läßt erwarten, daß sich makroskopische elektromagnetische Felder klassisch benehmen, daß es sich bei ihnen also um Systeme handelt, die in so hohen Quantenzuständen sind, daß man von Interferenzphänomenen absehen kann. Eine strenge Begründung dieser Annahme muß von der Quantenfeldtheorie geliefert werden.

Wir betrachten ein Teilchen mit der Ladung q , das sich in einem elektromagnetischen Feld bewegt, das durch ein skalares Potential Φ und ein Vektorpotential \mathbf{A} beschrieben wird. Diese Größen sind Funktionen von Raum und Zeit, wobei ein Raumzeitpunkt die Stelle bedeu-

tet, an der das Teilchen (als "Probeladung", deren Rückwirkung auf das Feld vernachlässigt wird) das Feld spürt. In der Quantentheorie ist aber der Ort ein Operator \mathbf{X} , wir müssen daher in den (vorgegeben angenommenen) Potentialfunktionen

$$\Phi = \Phi(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{X}, t)$$

schreiben. Wie diese Größen in den Hamiltonoperator einzubauen sind, ergibt sich aus dem klassischen Hamiltonformalismus. Dabei muß aber beachtet werden, daß das Teilchen im Magnetfeld eine geschwindigkeitsabhängige Kraft (Lorentzkraft) spürt. Der kanonische Impuls (\mathbf{p}) ist daher mit dem kinetischen Impuls ($\mathbf{p}_{kin} = m\dot{\mathbf{x}}$) nicht identisch. Da in der Quantentheorie der kanonische Impuls den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen genügt, muß man die Hamiltonfunktion des Teilchens zuerst durch kanonische Koordinaten und Impulse ausdrücken und dann diese durch Operatoren ersetzen. Das "Kochrezept" dafür lautet, daß man die Energie in Anwesenheit des Feldes aus der ohne Feld erhält, indem man im kinetischen Term

$$\mathbf{p}_{kin} \longrightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}$$

ersetzt und die Energie $q\Phi$ der Ladung im skalaren Potentialfeld addiert. Für ein Teilchen ohne Spin erhalten wir durch unsere Übersetzung ($\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{P}, \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{X}$)

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{X}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{X}, t) + V$$

V steht dabei für ein Potential, das nicht vom äußeren Feld herrührt (z.B. das Potential des Kerns für ein Elektron in einem Atom). Bei Ausführen des Quadrats im kinetischen Term muß man beachten, daß \mathbf{P} mit \mathbf{A} nicht vertauschbar ist

$$[P_k, A_l(\mathbf{X}, t)] = \frac{\hbar}{i} \nabla_k A_l$$

Schafft man \mathbf{P} nach rechts, so erhält der Hamiltonoperator die Form

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V + q\Phi - \frac{q}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + \frac{i\hbar q}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A})$$

Mit diesem Hamiltonoperator ist die Bewegungsgleichung für den Zustand

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

zu lösen. Sind die Felder zeitabhängig, so ist das quantenmechanische Problem nichtstationär: H hängt über \mathbf{A} , Φ explizit von der Zeit ab.

Ein wesentlicher Unterschied zu den klassischen (Newtonschen) Bewegungsgleichungen fällt sofort auf: in den klassischen Gleichungen kommen nur die Feldstärken vor, in der quantenmechanischen Bewegungsgleichung hingegen die Potentiale. Das ist eine notwendige (und daher unvermeidbare) Folge der kanonischen Quantelung. In der Quantentheorie haben daher Eichtransformationen der Potentiale (vgl. ED 2.7) eine besondere Bedeutung. Um sie zu erkennen, untersuchen wir die Auswirkung einer Eichtransformation mit einer beliebigen Eichfunktion $\Lambda(\mathbf{X}, t)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\longrightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla \Lambda \\ \Phi &\longrightarrow \Phi' = \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

Durch Einsetzen sieht man, daß bei dieser Transformation der Hamiltonoperator H seine Form verändert

$$H \longrightarrow H' \neq H$$

(das wäre in der klassischen Mechanik im Hamiltonformalismus auch der Fall). Darauf muß man z.B. achten, wenn man Störungstheorie treiben will: hat man H in einer Eichung in $H^{(0)} + H^{(1)}$ zerlegt, so sollte man bei der Durchführung des Störungsverfahrens in dieser Eichung bleiben; bei Umeichung kann sich die Zerlegung ändern.

Physikalische Resultate dürfen aber (auch in der Quantentheorie) nicht von der verwendeten Eichung abhängen. Das ist dann der Fall, wenn sich bei der betrachteten Eichtransformation der Zustandsvektor um einen Phasenfaktor ändert

$$|\Psi(t)\rangle \longrightarrow |\Psi'(t)\rangle = \exp(iF(\mathbf{X}, t)) |\Psi(t)\rangle$$

Mit einiger Rechnung kann man zeigen, daß die Bewegungsgleichung bei der Transformation ihre Form nicht ändert, wenn

$$F = -\frac{q}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{X}, t)$$

ist.

Hat das Teilchen einen Spin, so muß die Wechselwirkungsenergie des magnetischen Spinnmoments mit dem äußeren Magnetfeld $-\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$ hinzugefügt werden. Für ein Elektron ($q = -e$) in einem Atom muß außerdem die Wechselwirkung des Spinnmoments mit dem Bahnmoment hinzugenommen werden. Insgesamt erhalten wir für ein Elektron in einem Zentralpotential den auf Pauli zurückgehenden Hamiltonoperator

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V + \frac{1}{2(mc)^2} \frac{1}{R} \frac{\partial V}{\partial R} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) - e\Phi + \frac{e}{mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 - \frac{i\hbar e}{2mc} \nabla \cdot \mathbf{A}$$

Dabei ist \mathbf{S} der Spindrehimpuls

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

Der Zustandsvektor hat daher zwei Komponenten im Raum der Paulimatrizen, die durch $\boldsymbol{\sigma}$ verkoppelt werden.

Eine Alternative zur Lösung der Bewegungsgleichungen mit Hilfe der kanonischen Variablen \mathbf{P}, \mathbf{X} und der Potentiale \mathbf{A}, Φ erhält man mit Hilfe der Operatoren

$$\Pi_k = P_k - \frac{q}{c} A_k \quad k = 1, 2, 3$$

Sie bilden das quantentheoretische Gegenstück der kinetischen Impulskomponenten \mathbf{p}_{kin} . Bei Eichtransformation werden sie (im Gegensatz zu P_k) geändert

$$\Pi_k \longrightarrow \Pi'_k = \Pi_k + \frac{q}{c} \nabla_k \Lambda.$$

Mit X_k und Funktionen von X_k haben die Π_k die gleichen (Heisenbergschen) Vertauschungsrelationen wie P_k . Untereinander sind sie aber nicht vertauschbar. Durch Ausrechnen erhält man

$$[\Pi_k, \Pi_l] = \frac{i\hbar q}{c} \epsilon_{klm} B_m$$

mit der magnetischen Feldstärke

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Ein Operator, der eine Ergänzung im Sinn der Relativitätstheorie darstellt, ist

$$\Pi_0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi.$$

Bei Eichtransformationen ändert er sich gemäß

$$\Pi_0 \longrightarrow \Pi'_0 = \Pi_0 - \frac{q}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}.$$

Die Vertauschungsrelation mit Π_k ist

$$[\Pi_0, \Pi_k] = i\hbar q E_k$$

mit der elektrischen Feldstärke

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \Phi.$$

Die Vertauschungsrelationen der Π -Operatoren sind daher eichinvariant. (In der Ortsdarstellung ließe sich aus Π_0 und Π_k sogar ein Vierervektor konstruieren. Das hätte aber in der hier untersuchten nichtrelativistischen Quantentheorie keinen Sinn, in der die Lorentztransformation keine Invarianztransformation ist.) In Termen von Π hat die Bewegungsgleichung die Form

$$\Pi_0 |\Psi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} \Pi^2 + V \right) |\Psi(t)\rangle.$$

In speziellen Fällen kann man mit Hilfe der algebraischen Eigenschaften der Π -Operatoren zu darstellungsunabhängigen Lösungen kommen.

Als Beispiel für den Nutzen von Eichtransformationen in der Quantentheorie betrachten wir die sog. Dipolnäherung für ein Strahlungsfeld und gehen dazu von der Strahlungseichung aus ($\nabla \cdot \mathbf{A} = \Phi = 0$). Die Dipolnäherung bedeutet, daß man die Ortsabhängigkeit von \mathbf{A} gegenüber der Zeitabhängigkeit vernachlässigt $\mathbf{A} \approx \mathbf{A}(t)$.

In der klassischen Theorie bedeutet das eine "nichtrelativistische" Näherung, bei der das magnetische Feld gegenüber dem elektrischen vernachlässigt wird

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \approx 0, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \neq 0.$$

In der Quantentheorie ist \mathbf{X} ein Operator. Für ein Teilchen in einem Atom nimmt aber der Erwartungswert von \mathbf{X} wegen des exponentiellen Abfalls der Wellenfunktion für wachsendes r rasch ab. Ein

Maß für den Bereich, in dem der Erwartungswert von \mathbf{X} wesentlich von Null abweicht, ist der Bohrsche Radius a_0 . Für eine elektromagnetische Welle ist das Argument von \mathbf{A}

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} - \omega t \quad \text{mit } |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$$

Die Dipolnäherung ist daher erlaubt, wenn

$$\frac{\omega a_0}{c} \ll 1 \quad \text{oder} \quad \frac{2\pi a_0}{\lambda} \ll 1$$

ist (λ bedeutet dabei die Wellenlänge der Strahlung). Für sichtbares Licht ist der Ausdruck von der Größenordnung 10^{-3} . Die Dipolnäherung ist in diesem Fall also gerechtfertigt.

Für $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$ kann man das Vektorpotential wegeichen. Mit

$$A = \mathbf{X} \cdot \mathbf{A}(t)$$

wird

$$\mathbf{A}' = 0, \quad \Phi' = \frac{1}{c} \mathbf{X} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\mathbf{X} \cdot \mathbf{E}$$

Der neue Hamiltonoperator ist

$$H' = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(\mathbf{X}) - q\mathbf{X} \cdot \mathbf{E}(t)$$

Er enthält die Wechselwirkung des elektrischen Dipolmoments $q\mathbf{X}$ des Teilchens mit dem elektrischen Feld. Offensichtlich ist der Wechselwirkungsterm eichinvariant. Seine Form ist aber nur im Rahmen der Dipolnäherung korrekt, die einen beschränkten Gültigkeitsbereich hat, der durch V bestimmt wird. Allgemein darf man natürlich magnetische Felder gegen elektrische nicht vernachlässigen. Für ein freies Teilchen ($V = 0$) in einem Strahlungsfeld hätte die Näherung z.B. keinen Sinn.

In einigen Fällen ist das durch H definierte quantenmechanische Problem exakt lösbar (vgl. die Übungen). Dabei handelt es sich aber um Bewegungen im äußeren Feld allein ($V = 0$). Für ein Elektron in einem Atom steht das Coulombpotential einer strengen Lösung im Weg. Das Coulombfeld ist bei Abständen von der Größenordnung des Atomradius sehr viel stärker als die meisten im Labor realisierbaren elektromagnetischen Felder. Die Wechselwirkung mit dem äußeren Feld kann daher mit Hilfe der Störungstheorie untersucht werden. Als Beispiel betrachten wir die Aufspaltung von Energieniveaus eines Wasserstoffatoms in

einem konstanten Magnetfeld \mathbf{B} (Zeemaneffekt). Als Vektorpotential verwenden wir

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{X}), \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

In der Pauligleichung vernachlässigen wir den in \mathbf{A} quadratischen Term. Im Wechselwirkungsterm formen wir $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ um:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{X}) \cdot \mathbf{P} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{X} \times \mathbf{P}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$$

Damit wird der Wechselwirkungsterm

$$\frac{e}{mc}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}) = -\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}$$

mit dem effektiven magnetischen Moment

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2mc}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = -\frac{e}{2mc}(\mathbf{J} + \mathbf{S})$$

Verlangen wir

$$\boldsymbol{\mu} = G\mathbf{J}$$

so ist der Eigenwert von G der Landéfaktor g . Der Operator G ist leicht auszurechnen:

$$G = \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{\mathbf{J}^2} = -\frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{J}^2} \right) = -\frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2}{2\mathbf{J}^2} \right)$$

In erster Ordnung Störungstheorie ist die Aufspaltung

$$\Delta E_{n;l,j} = -\langle n; l, \frac{1}{2}, j, m_j | \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu} | n; l, \frac{1}{2}, j, m_j \rangle$$

Wählen wir die Feldrichtung als z -Achse, so erhalten wir

$$\Delta E_{n;l,j} = \frac{e\hbar B}{2mc} g m_j$$

mit dem Landéfaktor

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}$$

(vgl. ED S. 150).

Übungen

- 8) Ein geladenes Teilchen bewegt sich in einem homogenen elektrischen Feld $\mathbf{E} = (0, 0, \mathcal{E})$. Bestimme die Eigenwerte der Energie und die Eigenfunktionen (Impuls- und Ortsdarstellung). Vergleiche mit der klassischen Bewegung.
- 9) Ein Elektron (Masse m , Ladung $-e$, Spin $1/2$) bewegt sich in einem homogenen Magnetfeld B . Die Eigenwerte der Energie (Landau-niveaus) sind algebraisch zu bestimmen. Für welche Feldstärken (Größenordnung) sind Quanteneffekte von Bedeutung? Die Entartung der Energieniveaus ist zu diskutieren. Was bedeutet sie physikalisch? Die Bestimmung der Eigenfunktionen in der Orts- und Impulsdarstellung ist zu skizzieren. Ein zweckmäßiger Ansatz für \mathbf{A} ist

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-Y, X, 0) \quad \mathbf{B} = (0, 0, B)$$

- 10) Ein Teilchen (Masse m , Ladung $-e$, Spin 0) bewegt sich im Feld einer ebenen und monochromatischen elektromagnetischen Welle. Die Eigenzustände (bzw. Eigenfunktionen) sind zu bestimmen. Das Resultat ist physikalisch zu interpretieren. Das Vektorpotential (in Strahlungseichung) kann in der Form

$$\mathbf{A} = a(A_1(\xi), A_2(\xi), 0), \quad \xi = \omega\left(t - \frac{X_3}{c}\right)$$

angenommen werden, wobei A_1, A_2 gegebene Funktionen sind. Die Welle läuft dabei in 3-Richtung und hat die Frequenz ω , die Zahl a ist ein Maß für ihre Intensität. Für lineare Polarisierung in 1-Richtung ist $A_2 = 0$, für zirkuläre Polarisierung ist $A_1^2 + A_2^2 = 1$.

- 11) Ein geladenes Teilchen bewegt sich in einem elektromagnetischen Feld (Φ, \mathbf{A}) . Berechne die Zeitableitungen der Mittelwerte

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|X_k|\psi(t)\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\Pi_k|\psi(t)\rangle$$

und interpretiere das Resultat.

- 12) Untersuche die WKB-Näherung für ein geladenes Teilchen in einem elektromagnetischen Feld (Φ, \mathbf{A}) . Diskutiere das Verhalten bei Eichtransformationen.

- 13) Ein Wasserstoffatom wird in ein homogenes elektrisches Feld $\mathbf{E} = (0, 0, \mathcal{E})$ gebracht. Berechne die Energieaufspaltung des Zustands mit $n = 2$ in erster Ordnung Störungstheorie (linearer Starkeffekt).
- 14) Ein Teilchen (Masse m , Ladung q) bewegt sich in einem Zentralpotential und steht mit einem elektrischen Wechselfeld

$$\mathbf{E}(t) = \mathcal{E}(\sin \omega t, \cos \omega t, 0)$$

in Dipolwechselwirkung.

Durch eine geeignete Transformation ist das Problem in ein stationäres überzuführen.

Als Modell ist das Potential

$$V = \frac{m\Omega^2}{2} \mathbf{X}^2$$

zu betrachten. Zur Zeit $t = 0$ soll sich das "Atom" im Grundzustand befinden und das elektrische Feld eingeschaltet werden. Die Übergangswahrscheinlichkeit in den n -ten angeregten Zustand zur Zeit t ist zu berechnen.

Das Problem ist exakt lösbar. Es wäre interessant, eine brauchbare Näherungsmethode für ein Coulombpotential zu entwickeln.

6.5 Zeitabhängige Störungstheorie

In vielen praktisch relevanten Fällen besteht der Hamiltonoperator aus zwei Termen, von denen einer zeitunabhängig ist

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}(t).$$

Die zeitabhängige Störungstheorie ermöglicht eine näherungsweise Lösung der dynamischen Gleichung

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

die dann brauchbar ist, wenn $H^{(1)}$ in einem genügend gut präzisierbaren Sinn eine kleine Störung des durch $H^{(0)}$ beschriebenen Systems darstellt. Die Störungstheorie wurde ursprünglich von Dirac für Probleme der Emission bzw. Absorption von Strahlung durch Atome entwickelt. Sie hat sich als außerordentlich verallgemeinerungsfähig erwiesen und soll daher hier in einer dafür geeigneten Form dargestellt werden.

Dazu gehen wir von den im Abschnitt 4.5 beschriebenen Fassungen der Dynamik in verschiedenen Bildern aus. Wie auf S. 122/123 angedeutet, soll in $H^{(1)}(t)$ eine Funktion der Zeit enthalten sein, die den Ein- bzw. Ausschaltmechanismus der Störung beschreibt. Die zu lösende dynamische Gleichung bezieht sich auf das Schrödingerbild $|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi_s(t)\rangle$. Wir transformieren in das Wechselwirkungsbild

$$|\Psi_s(t)\rangle = U_0(t, t_0) |\Psi_w(t)\rangle, \quad U_0 = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H^{(0)}\right)$$

und müssen die dynamische Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_w(t)\rangle = H_w^{(1)}(t) |\Psi_w(t)\rangle$$

mit

$$H_w^{(1)}(t) = U_0^\dagger(t, t_0) H_s^{(1)}(t) U_0(t, t_0)$$

lösen. In Termen des Heisenbergbildes ist

$$|\Psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_h\rangle, \quad U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$$

Daher ist t_0 die Zeit, in der das Schrödingerbild mit dem Heisenbergbild übereinstimmt. Setzen wir (vgl. Abschnitt 4.5)

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0)U_1(t, t_0)$$

so erhalten wir

$$|\Psi_w(t)\rangle = U_1(t, t_0)|\Psi_h\rangle, \quad U_1(t_0, t_0) = \mathbf{1}, \quad U_1^\dagger U_1 = \mathbf{1}.$$

Statt der dynamischen Gleichung für $|\Psi_w(t)\rangle$ können wir daher die Operatorgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_1(t, t_0) = H_w^{(1)}(t)U_1(t, t_0)$$

untersuchen. Zusammen mit der Anfangsbedingung

$$U_1(t_0, t_0) = \mathbf{1}$$

ist diese mit der Integralgleichung

$$U_1(t, t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_w^{(1)}(t')U_1(t', t_0)dt'$$

gleichbedeutend. Wir suchen die Lösung in Form einer Reihenentwicklung (Störungsreihe):

$$U_1 = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U_1^{(n)}.$$

Durch Iteration

$$U_1^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_w^{(1)}(t')U_1^{(n-1)}(t', t_0)dt'$$

erhalten wir

$$U_1^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_w^{(1)}(t_1)H_w^{(1)}(t_2) \cdots H_w^{(1)}(t_n)$$

Dabei ist zu beachten, daß die einzelnen Faktoren $H_w^{(1)}$ i.A. nicht vertauschbar sind, weil sie sich auf verschiedene Zeiten beziehen. Die Abfolge der oberen Integrationsgrenzen macht es außerdem notwendig, die Integrationen der Reihe nach (von rechts nach links) "abzuarbeiten". Diese Komplikation kann man mit einer formalen Vorschrift vermeiden. Dazu definieren wir als zeitgeordnetes Produkt $T(A(t_1)A(t_2) \cdots A(t_n))$

jene Reihenfolge der Faktoren, bei der die Zeit von rechts nach links zunimmt. Für zwei Faktoren bedeutet das z.B.

$$\begin{aligned} T(A(t_1)A(t_2)) &= \begin{cases} A(t_1)A(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ A(t_2)A(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases} \\ &= \theta(t_1 - t_2)A(t_1)A(t_2) + \theta(t_2 - t_1)A(t_2)A(t_1) \end{aligned}$$

Dabei ist θ die Stufenfunktion, vgl. ED A1 (analog für mehr Faktoren). Mit Hilfe elementarer Umformungen der auftretenden Integrale (vgl. Übungen) kann man die folgende Form erreichen

$$U_1^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{(i\hbar)^n} \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n T \left(H_w^{(1)}(t_1) \cdots H_w^{(1)}(t_n) \right).$$

Ein formaler Ausdruck für die Summe der Störungsreihe ist

$$U_1(t, t_0) = T \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_w^{(1)}(t') dt'\right) \right).$$

Die Brauchbarkeit der Reihenentwicklung für U_1 hängt natürlich davon ab, ob bzw. wie rasch sie konvergiert.

Zur Illustration betrachten wir durch eine zeitabhängige Störung verursachte Übergänge zwischen Eigenzuständen des ungestörten Systems. Zur Zeit $t = 0$ soll sich das System in einem Eigenzustand $|a\rangle$ von $H^{(0)}$ befinden

$$|\Psi_H\rangle = |a\rangle, \quad H^{(0)}|a\rangle = |a\rangle E_a.$$

Wir denken uns die Störung zur Zeit $t_0 = 0$ abrupt eingeschaltet und fragen nach der Wahrscheinlichkeit $W_{ba}(t)$ dafür, das System zur Zeit t im Eigenzustand $|b\rangle$ von $H^{(0)}$ anzutreffen. Wir beschränken uns dabei auf die **erste Näherung** und nehmen an, daß $|b\rangle \neq |a\rangle$ ist. Im Matrixelement

$$\langle b|\Psi_s(t)\rangle = \langle b|U_0(t, 0) \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_w(t') dt' \right) |a\rangle$$

können Faktoren U_0 nach links bzw. rechts herausgezogen werden. Der erste Term verschwindet wegen $\langle b|a\rangle = 0$.

Mit der Abkürzung

$$\omega_{ba} = \frac{1}{\hbar}(E_b - E_a)$$

erhalten wir die “goldene Regel der Störungstheorie”

$$W_{ba}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle b | H_S^{(1)}(t') | a \rangle \exp(i\omega_{ba}t') dt' \right|^2.$$

Dabei ist vorausgesetzt, daß die (normierten) Eigenzustände zum diskreten Spektrum gehören. Für kontinuierliches Spektrum ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang in einen Energiebereich Δ um E_b das Integral

$$W_{\Delta,a}^{(1)}(t) = \int_{\Delta} W_{ba}^{(1)}(t) \rho(b, E_b) dE_b.$$

Dabei ist die Termdichte $\rho(b, E_b)$ die Zahl der Endzustände $|b\rangle$ pro Einheitsintervall der Energie (vgl. 4.4). Die “goldene Regel” findet sehr viele Anwendungen (daher der Name), man darf aber nicht vergessen, daß es sich um den untersten Term einer Reihenentwicklung handelt. Um mit ihr brauchbare Resultate zu erhalten, muß die Reihe genügend rasch konvergieren.

Für die Untersuchung des Zeitverhaltens von $W^{(1)}$ kommt es auf die im Integral enthaltenen Zeitskalen an. Der Exponentialfaktor oszilliert mit der Frequenz ω_{ba} . Das Verhalten des Integrals hängt davon ab, wie stark sich $H_S^{(1)}(t)$ im Verlauf einer Periode

$$T \sim \frac{1}{\omega_{ba}} \approx \frac{\hbar}{E_b - E_a}$$

ändert. Wir betrachten hier nur den Fall relativ kleiner Änderungen: die in $H_S^{(1)}(t)$ enthaltene Zeitkonstante (die für die Wechselwirkung charakteristisch ist) soll groß gegen T sein. In diesem Fall darf das Matrixelement $\langle b | H_S^{(1)} | a \rangle$ vor das Integral gezogen werden. Das verbleibende Integral ist elementar durchführbar und wir erhalten mit der Funktion

$$f(x, t) = \left(\frac{2}{x} \sin \frac{xt}{2} \right)^2$$

die Formel

$$W_{ba}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle b | H_S^{(1)} | a \rangle|^2 f(\omega_{ba}, t)$$

Für schwach zeitabhängiges $H_S^{(1)}$ ist das eine Näherung, für eine zeitunabhängige Störung ist das Resultat exakt.

Das Zeitverhalten wird in jedem Fall durch die Funktion f bestimmt. In Abhängigkeit von x hat sie Maxima für

$$x = 0, \pm 8.9868/t, \pm 15.4505/t, \pm 21.8082/t \dots,$$

an denen sie die Werte

$$t^2 (1, 0.04719, 0.01648, 0.00834 \dots)$$

annimmt. Den wichtigsten Beitrag liefert das Hauptmaximum bei $x = 0$, das mit wachsender Zeit nicht nur immer höher, sondern auch immer schärfer wird: die Halbwertsbreite ist $2\pi/t$. Für sehr große Zeiten wächst f unbeschränkt. Nach Division durch t erhält man einen endlichen Grenzwert:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} f(x, t) = 2\pi\delta(x).$$

Für sehr große t ist also

$$f(x, t) \approx 2\pi t \delta(x).$$

In erster Ordnung Störungstheorie erhalten wir daher ein resonanzartiges Zeitverhalten, das mit wachsender Zeit immer schärfer ausgeprägt ist. Die ungestörte Energie bleibt dabei näherungsweise (bis auf Fehler $\sim 2\pi/t$) erhalten.

Wir nehmen nun an, daß E_b zum kontinuierlichen Spektrum gehört und untersuchen $W_{\Delta,a}^{(1)}$ nach genügend langer Zeit. Das Hauptmaximum von f trägt zum Integral wesentlich stärker bei als die Nebenmaxima. Je nachdem, ob das Hauptmaximum im Intervall Δ enthalten ist oder nicht, resultiert daher eine andere Zeitabhängigkeit. Ist E_a (und damit das Hauptmaximum) in Δ enthalten, so liefert die Umgebung von $\omega_{ba} = 0$ den Hauptbeitrag. Für große t wächst f und damit auch $W_{\Delta,a}^{(1)}$ mit der Zeit unbegrenzt. Eine auch für sehr große Zeiten vernünftige Größe ist in diesem Fall die Übergangsrate (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit)

$$R_{\Delta,a}^{(1)} = \frac{d}{dt} W_{\Delta,a}^{(1)}(t)$$

Setzen wir das angegebene Verhalten von f für große Zeiten ein, so erhalten wir

$$R_{\Delta,a} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b|H_S^{(1)}|a\rangle|^2 \rho(b, E_a) \quad \text{mit } E_b = E_a.$$

Ist das Hauptmaximum in Δ nicht enthalten, so handelt es sich um Übergänge, bei denen die ungestörte Energie nicht erhalten bleibt. Wir betrachten Übergänge in einen Energiebereich $(E - \varepsilon/2, E + \varepsilon/2)$, der von E_a deutlich getrennt und nicht zu breit ist

$$E - E_a \gg \varepsilon,$$

wobei aber im Bereich genügend viele Nebenmaxima enthalten sein sollen

$$\varepsilon \gg 2\pi\hbar/t.$$

Wir nehmen an, daß sich das Matrixelement und die Termdichte im Integrationsgebiet nicht wesentlich ändern, sodaß sie vor das Integral gezogen werden können. Ersetzen wir in f den für große t rasch oszillierenden Faktor durch seinen Mittelwert, so erhalten wir

$$W_{\Delta,a}^{(1)} \approx \frac{2\varepsilon}{(E - E_a)^2} |\langle b|H_S^{(1)}|a\rangle|^2 \rho(b, E).$$

In diesem Fall ist also die Übergangswahrscheinlichkeit selbst zeitunabhängig.

Übungen

15) Führe die Umformung in ein zeitgeordnetes Produkt (vgl. Text) explizit durch.

16) Zeige, daß U_1 die Gruppeneigenschaft hat

$$U_1(t_3, t_2)U_1(t_2, t_1) = U_1(t_3, t_1).$$

17) Schreibe U_1 als Grenzwert ($m \rightarrow \infty$) eines Produktes von m exponentiellen Operatoren.

18) Die im Text angegebenen Näherungsformeln für die Übergangswahrscheinlichkeit können besser begründet werden. Berechne dazu das unbestimmte Integral von f über x und bestimme damit Beiträge zu $W_{\Delta, a}^{(1)}$.

- Welchen Beitrag liefert das Hauptmaximum?
- Welchen Beitrag liefern alle möglichen Energiewerte?
- Wie groß ist der Fehler, wenn man in beiden Fällen f durch die Näherungsformel für große t ersetzt?
- Welchen Beitrag liefern alle Nebenmaxima?
- Begründe die letzte Formel im Text.

19) Untersuche die Übergangswahrscheinlichkeit in 1. Ordnung Störungstheorie für eine harmonische Störung

$$H_s^{(1)}(t) = A \cos \omega t.$$

Diskutiere die physikalische Bedeutung der auftretenden Resonanzen.

20) Ein Wasserstoffatom wird von einer elektromagnetischen Welle

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{e} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t), \quad \mathbf{e}^2 = 1, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{e} = 0 \quad c^2 \mathbf{k}^2 = \omega^2$$

bestrahlt. Die Übergangswahrscheinlichkeit aus dem Grundzustand in das Kontinuum (Ionisierung) ist in erster Ordnung in A_0 zu berechnen. Das Resultat ist quantitativ zu diskutieren. Für den Endzustand ist dabei ein Impulszustand $|\mathbf{k}'\rangle$ eines freien Teilchens in einem großen Volumen L^3 zu verwenden:

$$\mathbf{p}' = \hbar \mathbf{k}', \quad \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle = \exp(i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}) / L^{3/2}$$

7. Streuprobleme

7.1 Grundlagen

In diesem Kapitel geht es um die quantentheoretische Behandlung von Streuprozessen. Dabei handelt es sich um Vorgänge, die analog zu klassischen Stoßproblemen verlaufen. Wir betrachten die Wechselwirkung von Objekten, von denen jedes genügend gut lokalisiert angenommen werden darf, wenn es von allen anderen Objekten genügend weit entfernt ist, sodaß wir von Teilchen sprechen können (prinzipiell können das auch zusammengesetzte Objekte - Moleküle, Atome, Kerne usw. - sein). Zu einer sehr frühen Zeit ("am Anfang", idealisiert $t \rightarrow -\infty$) sollen zwei Teilchen in so großer Entfernung voneinander vorhanden sein, daß ihre Wechselwirkung vernachlässigt werden kann. Die Teilchen sollen sich aufeinander zubewegen. Sind sie einander genügend nahe gekommen, so wird es zu Wechselwirkungen kommen: die Teilchen können Impuls und Energie aufeinander übertragen, es können Reaktionen stattfinden (Umwandlung von Molekülen, Atomen, Kernen, Erzeugung neuer Teilchen). Nach genügend langer Zeit ("am Ende", idealisiert $t \rightarrow +\infty$) sollen sich alle Produkte wieder so weit voneinander entfernt haben, daß alle Wechselwirkungen vernachlässigbar sind. Es ist klar, daß eine solche Situation nur eintreten kann, wenn die Wechselwirkungen zwischen den Ausgangs- bzw. Endprodukten des betrachteten Prozesses für große Abstände der betreffenden Teilchen genügend stark abnehmen.

Innerhalb der Quantenmechanik bildet die Streutheorie ein großes Teilgebiet, über das umfangreiche Spezialbücher vorliegen. Hier sollen nur einige wesentliche Konzepte und Methoden vorgestellt werden. Dazu betrachten wir als einfachsten Fall die elastische Streuung von zwei Teilchen aneinander. Da die Energie erhalten bleibt, gibt es in diesem Fall nur **eine** Möglichkeit für die Endkonfiguration: die beiden Teilchen laufen als freie Teilchen voneinander weg, die Summe ihrer Energien ist gleich groß wie am Anfang.

In diesem Zusammenhang spricht man von **einem** Ausgangskanal. Finden bei der Streuung Umwandlungsprozesse statt, so gibt es mehrere Ausgangskanäle (bei Streuung eines Nukleons an einem Kern kann

es z.B. zur elastischen Streuung, zur Absorption des Nukleons und zum Aufbruch des Kerns kommen). Die allgemeine quantenmechanische Streutheorie umfaßt auch diese Fälle (auch die Verallgemeinerung auf mehrere Eingangskanäle ist möglich). Wir betrachten diese Verallgemeinerungen nicht, verwenden aber in einigen Abschnitten dieses Kapitels Konzepte, die verallgemeinerungsfähig sind.

Zur Untersuchung der elastischen Streuung von zwei Teilchen können wir wie bei der entsprechenden klassischen Betrachtung (vgl. M 2.6, 2.7) vorgehen. Die dort verwendeten Begriffsbildungen sind sogar besonders leicht zu übertragen: einem Strahl von freien einlaufenden Teilchen entspricht z.B. in der Quantentheorie ein Impulszustand eines freien Teilchens. Wir beschreiben die Streuung im Schwerpunktsystem der Stoßpartner, d.h. wir betrachten ein (fiktives) Teilchen mit der (reduzierten) Masse m , das am Potential $V(\mathbf{X})$ gestreut wird. Der Einfachheit wegen betrachten wir Teilchen ohne Spin oder andere "innere" Freiheitsgrade; eine Ausweitung der Theorie auf allgemeinere Fälle ist aber durchaus möglich.

Ausgangspunkt für unsere Untersuchung ist die in M 2.7 angegebene Formel für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{\text{Anzahl d. Reaktionen pro Sek. u. Streuzentrum}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro cm}^2 \text{ u. Sek.}} = \frac{Z}{N}.$$

Wir untersuchen nun, welche quantenmechanischen Größen dem Zähler Z bzw. Nenner N entsprechen. Statt des Quotienten von Anzahlen müssen wir in der Quantentheorie einen entsprechenden (geeignet normierten) Quotienten von Wahrscheinlichkeiten verwenden (das entspricht sogar der ursprünglichen, statistischen Begriffsbildung des Wirkungsquerschnitts).

Sind die tatsächlich einlaufenden Teilchen**strahlen** genügend "verdünnt", so darf die Wechselwirkung der Strahlteilchen untereinander vernachlässigt werden; wir können annehmen, daß es sich um freie Teilchen mit gleichem Impuls handelt. Der Nenner hat die Dimension eines Wahrscheinlichkeitsstromes (Wahrscheinlichkeit pro cm^2 u. Sek.). Für freie Teilchen mit dem Impuls \mathbf{p} ist die Komponente dieses Stromes in Flugrichtung (vgl. Abschnitt 5.8)

$$N = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p}{m} = \frac{v}{(2\pi)^3}$$

Dabei ist v der Betrag der Geschwindigkeit des fiktiven Teilchens vor der Streuung (also der Betrag der Relativgeschwindigkeit der wirklich einlaufenden Teilchen). Der Faktor $(2\pi)^{-3}$ entspricht einer Normierung auf 1 Teilchen pro cm^3 .

Im Zähler steht die gesamte Wahrscheinlichkeitsrate (Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit) für den Streuprozess, im Schwerpunktsystem also die Rate, die sich auf alle Übergänge bezieht, die von einem festen Anfangsimpuls \mathbf{p} eines freien Teilchens zu einem Endimpuls \mathbf{p}' eines freien Teilchens mit gleicher Energie führen. Das bedeutet

$$\mathbf{p}^2 = \mathbf{p}'^2, \quad \mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$$

($\mathbf{p} = \mathbf{p}'$ würde bedeuten, daß "nichts passiert", also keine Streuung stattfindet). \mathbf{p}' kann sich von \mathbf{p} daher nur durch die Richtung unterscheiden. "Alle Übergänge" bedeutet daher Integration über die Winkel zwischen \mathbf{p}' und \mathbf{p} . Schreiben wir den totalen Querschnitt als Integral über den Raumwinkel

$$\sigma = \int d\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dZ}{N},$$

so bedeutet dZ die Übergangsrate zu Impulsen in $d\Omega$. Als Übergangsrate ist dZ das Betragsquadrat einer komplexen Amplitude. Wir setzen daher

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2$$

Die Streuamplitude A hängt von $p = \hbar k$ und den Winkeln (θ, φ) zwischen \mathbf{p}' und \mathbf{p} ab $A = A(k, \theta, \varphi)$ und muß durch Lösung des quantenmechanischen Streuproblems ermittelt werden. Im hier betrachteten Fall ist also die Bewegung eines (fiktiven) Teilchens im Potential $V(\mathbf{X})$ zu untersuchen.

In der Ortsdarstellung bedeutet die Streuung, daß die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ in großer Entfernung vom Streuzentrum aus einer (durchlaufenden) ebenen Welle $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ und einer auslaufenden Kugelwelle besteht

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \frac{\exp(ikr)}{r} A \right) \Big|_{r \rightarrow \infty}$$

Die Übergangsrate entspricht dem radialen Wahrscheinlichkeitsstrom durch das Flächenelement $r^2 d\Omega$

$$dZ = (j_r r^2 d\Omega)_{r \rightarrow \infty}$$

(wobei nur der zweite Term in ψ zu betrachten ist: der erste bedeutet, daß keine Streuung = kein Übergang stattfindet). Durch Nachrechnen kann man sich davon überzeugen, daß der Koeffizient A der Kugelwelle tatsächlich die oben definierte Streuamplitude ist. Diese kann also aus dem asymptotischen Verhalten der Lösung der (stationären) Schrödingergleichung im Ortsraum bestimmt werden. Dieser Zugang zur Streutheorie erscheint aber nicht besonders günstig: die Bedingung, die zur Auswahl der "richtigen" (d.h. der Streuproblematik entsprechenden) Lösung der Schrödingergleichung führt, ist der Ortsdarstellung angepaßt und damit nicht darstellungsunabhängig. Das ist nicht nur ein "technischer Einwand": eine Verallgemeinerung auf komplizierte Situationen (z.B. mehrere Teilchen bzw. Kanäle) ist schwierig.

7.2 Die Lippmann-Schwinger-Gleichung

Wir versuchen daher eine darstellungsunabhängige Fassung der Streuproblematik, die möglichst eng an die kurz skizzierte "Ortsraummethode" anschließt. Dazu verwenden wir das Heisenbergbild (vgl. 4.5): wir suchen einen stationären Zustand $|\Psi\rangle = |\Psi_h\rangle$ als Lösung der Eigenwertgleichung

$$H|\Psi\rangle = |\Psi\rangle E,$$

wobei dieser Zustand aber so zu bestimmen ist, daß er der Problematik des Streuprozesses entspricht. Er muß also eine Situation beschreiben, bei der "am Anfang" einlaufende Teilchen vorhanden sind, die so weit voneinander entfernt sind, daß ihre Wechselwirkung vernachlässigt werden kann (in dem hier betrachteten Fall ist im Schwerpunktsystem nur ein solches Teilchen vorhanden, das weit vom Streuzentrum entfernt ist). Als Heisenbergzustand ist aber $|\Psi\rangle$ zeitunabhängig, d.h. der Zustand beschreibt die ganze "Geschichte" des Streuvorgangs: anfangs freie Teilchen laufen aufeinander zu, kommen in den Wirkungsbereich ihrer Wechselwirkungen, Reaktionen finden statt, am Ende laufen die entstehenden Produkte wieder auseinander. Trotzdem kann man den Zustand durch die Variablen der Anfangskonfiguration (die der freien Teilchen vor der Streuung) charakterisieren, sofern es sich dabei um Eigenwerte bewegungskonstanter Operatoren handelt - eine andere Charakterisierung wäre nicht sinnvoll. Wir werden den so charakterisierten Streuzustand mit $|\Psi^{(+)}\rangle$ bezeichnen.

Um eine Gleichung für ihn zu erhalten, zerlegen wir H in einen freien und einen Wechselwirkungsterm

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}$$

und formen die Eigenwertgleichung um

$$\begin{aligned} (E - H^{(0)}) |\Psi\rangle &= H^{(1)} |\Psi\rangle \\ |\Psi\rangle &= |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H^{(0)}} H^{(1)} |\Psi\rangle. \end{aligned}$$

Dabei erfüllt $|\Phi\rangle$ die wechselwirkungsfreie Eigenwertgleichung

$$(E - H^{(0)}) |\Phi\rangle = 0.$$

Die erhaltene Gleichung ist aber noch nicht eindeutig. Die Diagonalelemente der rechts auftretenden freien Resolvente $(E - H^{(0)})^{-1}$ sind singular, wenn E mit einem Eigenwert von $H^{(0)}$ übereinstimmt. Setzt man die Resolvente zu komplexen Werten von E fort, so führt eine Aussage über das Verhalten in der Nähe der reellen Achse zu einer Auswahl unter den Lösungen der Gleichung (vgl. in diesem Zusammenhang z.B. ED A5). Wir wählen für den Streuzustand $|\Psi^{(+)}\rangle$ die Vorschrift

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H^{(0)} + i0} H^{(1)} |\Psi^{(+)}\rangle.$$

Diese Gleichung heißt Lippmann-Schwinger-Gleichung. Wegen des Nenners hat sie in speziellen Darstellungen die Form einer Integralgleichung.

Von der Richtigkeit der Auswahl durch die Vorschrift $+i0$ im Nenner kann man sich in folgender Weise überzeugen. Für ein Teilchen hat die Lippmann-Schwinger-Gleichung in der Ortsdarstellung die Form

$$\langle \mathbf{x} | \Psi^{(+)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \Phi \rangle + \int \langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H^{(0)} + i0} | \mathbf{x}' \rangle d^3 x' \langle \mathbf{x}' | H^{(1)} | \Psi^{(+)} \rangle.$$

Der erste Term entspricht der durchlaufenden Welle, der zweite der Streuwelle. Um das zu zeigen, beachten wir, daß die freie Resolvente in der Impulsdarstellung diagonal ist

$$\langle \mathbf{k} | \frac{1}{E - H^{(0)} + i0} | \mathbf{k}' \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\kappa^2 - k^2 + i0} \quad \text{mit } E = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2.$$

Daraus kann man die Ortsdarstellung berechnen (vgl. Übungen). Das Resultat hat (als Folge der Vorschrift $+i0$) die Form einer auslaufenden Kugelwelle. Für $r = |\mathbf{x}| \gg r' = |\mathbf{x}'|$ kann man diese durch ihr asymptotisches Verhalten ersetzen (wobei aber vorausgesetzt werden muß, daß $\langle \mathbf{x}' | H^{(1)} | \Psi^{(+)} \rangle$ für große r' genügend rasch abfällt). Mit $|\Phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ erhält man für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Psi^{(+)} \rangle$ schließlich (vgl. Übungen) den oben angegebenen asymptotischen Ausdruck, wobei die Streuamplitude durch

$$A(k, \theta, \varphi) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | H^{(1)} | \Psi^{(+)} \rangle \quad \text{mit } k' = k = \kappa$$

gegeben ist.

Die Lösung des Streuproblems ist damit auf die Lösung der (darstellungsunabhängigen) Lippmann-Schwinger-Gleichung zurückgeführt. Alternativen dazu werden im nächsten Abschnitt untersucht. Ohne weitere formale Schritte läßt sich jedoch sofort eine einfache Näherungslösung angeben. Durch Iteration erhalten wir

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H^{(0)} + i0} H^{(1)} |\Phi\rangle + \dots$$

Für ein Teilchen erhalten wir mit $|\Phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ als erste Näherung für die Streuamplitude die Bornsche Näherung

$$A^{(1)}(k, \theta, \varphi) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | H^{(1)} | \mathbf{k} \rangle$$

Man braucht also lediglich das Matrixelement von $H^{(1)}$ in der Impulsdarstellung zu berechnen.

Für ein Zentralpotential $H^{(1)} = V(R)$, $R = |\mathbf{X}|$ hängt die Streuamplitude nur vom Impulsübertrag

$$\Delta k = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} = \sqrt{2k^2(1 - \cos \theta)} = 2k \sin^2 \theta / 2$$

ab. Durch Fouriertransformation erhält man

$$A^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2 \Delta k} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(r \Delta k).$$

Wir betrachten als Anwendungsbeispiel das Yukawapotentia

$$V(r) = \frac{a}{r} \exp(-\lambda r).$$

Durch Ausrechnen des Integrals erhält man

$$A^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{a}{(\Delta k)^2 + \lambda^2}.$$

Der Parameter $1/\lambda$ heißt die Reichweite des Potentials. Für $\lambda \rightarrow 0$ erhält man das Coulombpotential als Grenzfall. Für den Wirkungsquerschnitt erhält man die Rutherfordformel (vgl. M 2.7)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{a}{2E}\right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \theta/2}$$

Daß die klassische Formel aus der Quantentheorie in erster Näherung herauskommt (daß also im Wirkungsquerschnitt \hbar herausfällt), kann als “Zufall” angesehen werden. Man könnte meinen, daß bei Betrachtung höherer Bornscher Näherungen Quanteneffekte auftreten. Das ist jedoch nicht der Fall: die exakte Streuamplitude unterscheidet sich von $A^{(1)}$ nur durch einen Phasenfaktor, der in $|A|^2$ herausfällt (vgl. Anhang A1). Das ist bei Betrachtung relativistischer Effekte (Spin, v/c -Korrekturen) nicht mehr der Fall.

Berechnet man höhere Bornsche Näherungen für das Yukawapotential und läßt im Resultat $\lambda \rightarrow 0$ gehen, so erhält man divergente Beiträge. Dies ist eine Folge der unendlichen Reichweite des Coulombpotentials. Die ganze hier behandelte Streutheorie setzt voraus, daß die Wechselwirkung bei großen Abständen rasch genug abfällt, andernfalls könnte es in großer Entfernung vom Streuzentrum kein freies Teilchen als durchlaufende ebene Welle geben. Die Anforderungen an den Abfall von $V(r)$ für große Abstände, die man durch genauere Untersuchung erhalten kann, werden vom Coulombpotential nicht erfüllt. Die exakte Coulomb-Streulösung enthält (als Folge der großen Reichweite des Potentials) keine “reine” ebene Welle, sondern eine, deren Phase durch einen Zusatzterm $\sim \ln kr$ “deformiert” ist. Daß trotzdem ein Streuproblem definiert ist, kann physikalisch eingesehen werden: auch für das Coulombpotential sind die klassischen Bahnasymptoten gerade.

Für die meisten Streuprobleme der Praxis ist es unrealistisch, mit dem Coulombpotential zu rechnen. Da die Materie in größeren Bereichen elektrisch neutral ist, “sieht” ein geladenes Teilchen in größeren

Abständen vom Streuzentrum kein Coulombfeld, sondern ein durch entgegengesetzte Ladungen abgeschirmtes Feld. Für ein geladenes Teilchen, das an einem Atom gestreut wird, sorgt z.B. die Atomhülle für diese Abschirmung (eine Überlagerung weniger Yukawapotentiale mit geeigneten Parametern, a, λ bildet eine gute Näherung). Bei der Streuung geladener Hadronen an Kernen muß man jedoch mit dem Coulombpotential "leben".

Übungen

- 1) (a) Berechne die Ortsdarstellung der freien Resolvente

$$\langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H^{(0)} + i0} | \mathbf{x}' \rangle \quad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right).$$

- (b) Bestimme um ihr asymptotisches Verhalten für

$$r = |\mathbf{x}| \gg r' = |\mathbf{x}'|.$$

- (c) Finde damit die im Text angegebene Form der Streuamplitude.

- 2) Untersuche die Bornsche Näherung für eine sphärische Potentialstufe bzw. einen entsprechenden Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} a & r < r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases}$$

($a > 0$ Stufe, $a < 0$ Topf). Betrachte insbesondere das Verhalten für $r_0 \Delta k \ll 1$.

- 3) Untersuche die Streuung an einem beliebigen Zentralpotential mit endlicher Reichweite bei kleinem Impulstransfer in Bornscher Näherung. Drücke die Streuamplitude und den Wirkungsquerschnitt durch die Momente von V

$$V_n = \int_0^\infty dr r^n V(r)$$

aus.

7.3 Formale Streutheorie

Wir betrachten in diesem Abschnitt einige formale Hilfsmittel, die für die Streutheorie nützlich sind. Zunächst betrachten wir noch einmal die Lippmann-Schwinger-Gleichung. Ersetzen wir in ihr $+i0$ durch $-i0$, so erhalten wir eine Gleichung für einen anderen Zustandsvektor $|\Psi^{(-)}\rangle$, der aber ebenso zur Formulierung des Streuproblems geeignet ist. Mit der gleichen Technik wie in Abschnitt 7.2 sieht man (für ein Teilchen und in der Ortsdarstellung), daß $\langle \mathbf{x} | \Psi^{(-)} \rangle$ asymptotisch aus einer durchlaufenden ebenen Welle und einer einlaufenden Kugelwelle besteht. Die Beschreibungen durch $|\Psi^{(+)}\rangle$ und $|\Psi^{(-)}\rangle$ sind physikalisch äquivalent. Die erstere bedeutet, daß man die Streuzustände durch die Anfangskonfiguration (z.B. \mathbf{k}) charakterisiert, bei der letzteren verwendet man die Endfiguration (z.B. \mathbf{k}'). Man kann das einsehen, indem man im letzteren Fall von der Lippmann-Schwinger-Gleichung für $\langle \Psi^{(-)} |$ ausgeht und die Analyse durchführt: es tritt dann wieder $+i0$ auf und man erhält asymptotisch auslaufende Kugelwellen. Die Streuamplitude wird

$$A = - \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 m \langle \Psi^{(-)} | H^{(1)} | \mathbf{k} \rangle.$$

Nun charakterisieren wir die Steuzustände $|\Psi^{(\pm)}\rangle$ etwas genauer. Wir ziehen dazu Eigenwerte a geeigneter Operatoren in der entsprechenden Darstellung heran

$$|\Psi^{(\pm)}\rangle = |a, \pm\rangle, \quad |\Phi\rangle = |a\rangle$$

mit

$$H|a, \pm\rangle = |a, \pm\rangle E_a, \quad H^{(0)}|a\rangle = |a\rangle E_a.$$

Die Zustände $|a, \pm\rangle$ bzw. $|a\rangle$ sollen daher zum gleichen Eigenwert von H bzw. $H^{(0)}$ gehören. Die Lippmann-Schwinger-Gleichungen sind

$$|a, \pm\rangle = |a\rangle + \frac{1}{E_a - H^{(0)} \pm i0} H^{(1)} |a, \pm\rangle.$$

Setzen wir

$$|a, \pm\rangle = \Omega_{\pm} |a\rangle,$$

so haben die **Mølleroperatoren** Ω_{\pm} die Eigenschaft

$$H \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} H^{(0)}$$

Die Lippmann-Schwinger-Gleichungen können formal aufgelöst werden. Dazu wenden wir auf beiden Seiten $(E_a - H^{(0)} \pm i0)$ an und erhalten

$$(E_a - H^{(0)} \pm i0) (|a, \pm\rangle - |a\rangle) = H^{(1)}|a, \pm\rangle.$$

Addieren wir auf beiden Seiten $H^{(1)}|a\rangle$ und lösen nach $|a, \pm\rangle$ auf, so erhalten wir

$$|a, \pm\rangle = \left(\mathbf{1} + \frac{1}{E_a - H \pm i0} H^{(1)} \right) |a\rangle.$$

Solange man die Eigenzustände von H nicht kennt, ist diese Auflösung praktisch nicht sehr nützlich. Man kann aber damit einige Eigenschaften der Streuzustände zeigen. Die wichtigste ist die Orthogonalität

$$\langle a, \pm | b, \pm \rangle = \langle a | b \rangle = \delta_{a,b},$$

die mit Hilfe der Lippmann-Schwinger-Gleichungen leicht zu beweisen ist. Die Zustände $|a, \pm\rangle$ bilden aber nur dann ein vollständiges System, wenn das Spektrum von H keine diskreten Eigenwerte (d.h. keine Bindungszustände) enthält. Gibt es Bindungszustände $|n\rangle$, so müssen diese in der Vollständigkeitsrelation mitgenommen werden:

$$\mathbf{1} = \int |a, \pm\rangle d\rho(a) \langle a, \pm| + \sum_n |n\rangle \langle n|.$$

Für die Mølleroperatoren folgt aus der Orthogonalität die Isometrie

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} \Omega_{\pm} = \mathbf{1}$$

Hingegen sind sie i.A. nicht unitär: aus der Vollständigkeitsrelation liest man ab, daß

$$\Omega_{\pm} \Omega_{\pm}^{\dagger} = \mathcal{P}_s$$

ist, wobei \mathcal{P}_s den Projektionsoperator auf die Streuzustände bedeutet.

Multipliziert man die aufgelösten Lippmann-Schwinger-Gleichungen mit $H^{(1)}$, so tritt auf der rechten Seite ein besonders wichtiger Operator auf. Wir setzen

$$H^{(1)}|a, \pm\rangle =: T|a\rangle$$

und betrachten T zunächst als Funktion der komplexen Variablen z , deren Randwerte an der reellen Achse ($E_a \pm i0$) sind. Aus der rechten Seite der aufgelösten Gleichungen liest man ab, daß T die Form

$$T(z) = H^{(1)} + H^{(1)} \frac{1}{z - H} H^{(1)}$$

hat. Multipliziert man die ursprüngliche Form der Lippmann-Schwinger-Gleichungen mit $H^{(1)}$, so kann man für den (ins Komplexe fortgesetzten) T -Operator die folgende Gleichung ablesen

$$T(z) = H^{(1)} + H^{(1)} \frac{1}{z - H^{(0)}} T(z)$$

(Lippmann-Schwinger-Gleichung für T). Durch Iteration erhält man eine (der Störungstheorie entsprechende) Reihe:

$$T(z) = H^{(1)} + H^{(1)} \frac{1}{z - H^{(0)}} H^{(1)} + H^{(1)} \frac{1}{z - H^{(0)}} H^{(1)} \frac{1}{z - H^{(0)}} H^{(1)} + \dots$$

Für $z = (E_a + i0)$ wird

$$\langle a | T(E_a + i0) | b \rangle = \langle a | H^{(1)} \Omega_+ | b \rangle$$

Wählen wir als Zustände $|a\rangle$ die Impulszustände $|\mathbf{k}\rangle$, so erhalten wir damit für die Streuamplitude

$$\begin{aligned} A &= - \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \text{m} \left(\langle \mathbf{k}' | T(E_k + i0) | \mathbf{k} \rangle \text{ mit } E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, k' = k \right) = \\ &=: - \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \text{m} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle \end{aligned}$$

Die Streuamplitude ist also aus der Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung für die Matrix mit den Elementen $\langle \mathbf{k}' | T(z) | \mathbf{k} \rangle$ zu berechnen, wobei man erst zuletzt $k = k', z = E_k + i0$ setzen muß. Die Verwendung dieser sog. "off-shell T -Matrix" ist (sofern man die entsprechende Lippmann-Schwinger-Gleichung lösen kann) deshalb zweckmäßig, weil die Matrix (im Gegensatz zu ihrem Randwert, der "on-shell T -Matrix" $\langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle$) in z analytisch ist. Setzt man die angegebene Reihenentwicklung für T in die Streuamplitude ein, so erhält man als ersten Term die Bornsche Näherung. Die weiteren Terme geben Korrekturen dazu.

Der Operator T ist nicht unitär. Definiert man durch

$$S_{ab} := \langle a, - | b, + \rangle = \langle a | S | b \rangle$$

einen Operator S (Heisenbergsche S -Matrix), so läßt sich mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation leicht nachweisen, daß S unitär ist

$$SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbf{1}$$

In Termen der Mølleroperatoren ist

$$S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$$

Der Operator bildet die \pm -Zustände aufeinander ab

$$|b, +\rangle = \sum_a |a, -\rangle S_{ab}$$

Wir betrachten nun noch den Zusammenhang von S und T . Mit Hilfe der formalen Auflösung für $\langle a, - |$ erhalten wir

$$\begin{aligned} S_{ab} &= \langle a, - | b, + \rangle = \langle a | \left(1 + H^{(1)} \frac{1}{E_a - H + i0} \right) | b, + \rangle \\ &= \langle a | b, + \rangle + \frac{1}{E_a - E_b + i0} \langle a | T | b \rangle \end{aligned}$$

Aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung für $|b, +\rangle$ erhält man

$$\begin{aligned} \langle a | b, + \rangle &= \delta_{ab} + \frac{1}{E_b - E_a + i0} \langle a | H^{(1)} | b, + \rangle \\ &= \delta_{ab} - \frac{1}{E_a - E_b - i0} \langle a | T | b \rangle \end{aligned}$$

Mit der Formel (vgl. ED A1)

$$\frac{1}{x + i0} - \frac{1}{x - i0} = -2\pi i \delta(x)$$

erhält man nach Einsetzen

$$S_{ab} = \delta_{ab} - 2\pi i \delta(E_a - E_b) T_{ab}$$

S ist also in der Energie diagonal und daher mit $H^{(0)}$ vertauschbar

$$[S, H^{(0)}] = 0.$$

Übungen

- 4) Untersuche die beiden Resolventen

$$G(z) := (z - H)^{-1}, \quad G_0(z) = (z - H^{(0)})^{-1}$$

für eine komplexe Variable z .

- Finde zwei Lippmann-Schwinger-Gleichungen für G .
 - Finde eine Darstellung von G in Termen von G_0 und T .
 - Zeige, daß $H^{(1)}G = TG_0$, $GH^{(1)} = G_0T$ ist.
- 5) Betrachte die Streuung eines Teilchens an einem separablen Potential (vgl. Übungsaufgabe 5.37)

$$\langle \mathbf{k}' | H^{(1)} | \mathbf{k} \rangle = \sum_s f_s^{(1)}(\mathbf{k}') f_s^{(2)}(\mathbf{k})$$

Löse die Lippmann-Schwinger-Gleichung für die off-shell T -Matrix in der Impulsdarstellung.

- 6) Berechne die T -Matrix und die Streuamplitude für den Yamaguchi-Ansatz

$$\langle \mathbf{k}' | H^{(1)} | \mathbf{k} \rangle = -ag(k')g(k), \quad g(k) = \frac{b}{k^2 + \kappa^2}.$$

- Untersuche das Verhalten für niedrige bzw. hohe Energie.
- Untersuche die Korrekturen zur Bornschen Näherung für kleine bzw. große Werte von a .
- Untersuche die Singularitäten von $T(z)$ in der z -Ebene.

Eine **zeitabhängige** Fassung der Streutheorie kann in folgender Weise durchgeführt werden. Man geht von den allgemeinen Formeln für die Zeitentwicklung von Zuständen (Abschnitt 4.5) im Schrödingerbild aus und betrachtet den Zusammenhang mit dem Heisenberg- bzw. Wechselwirkungsbild. Im Zeitpunkt $t = t_0$ sollen die drei Bilder übereinstimmen (man kann z.B. $t_0 = 0$ wählen). "Streutheorie" bedeutet dann eine Aussage über den Schrödingerzustand zu sehr früher bzw. sehr später Zeit ($T \rightarrow -\infty$ bzw. $T \rightarrow +\infty$) in der Form

$$|\psi_s(T)\rangle(T \rightarrow -\infty) = U_0(T, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle(T \rightarrow -\infty)$$

$$|\psi_s(T)\rangle(T \rightarrow +\infty) = U_0(T, 0)|\psi_{\text{out}}\rangle(T \rightarrow +\infty)$$

Dabei ist $U_0(T, 0)$ der freie Zeitentwicklungsoperator. Die asymptotischen Zustände $|\psi_{\text{in}}\rangle$ bzw. $|\psi_{\text{out}}\rangle$ sind feste Hilbertvektoren. Die Mølleroperatoren sind

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{\dagger}(T, 0)U_0(T, 0)$$

und die S -Matrix bildet die asymptotischen Zustände aufeinander ab

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = S|\psi_{\text{in}}\rangle.$$

Mathematisch muß die Existenz der Grenzwerte im Sinn der **starken** Konvergenz von Operatoren:

$A \rightarrow B$ wenn die Norm von $(A - B)|\psi\rangle$ für jeden festen Zustand $|\psi\rangle$ verschwindet

gezeigt werden (das ist möglich, wenn die Wechselwirkung für große Abstände genügend stark abnimmt). In den folgenden Beispielen soll die Existenz von Ω_{\pm} (in diesem Sinn) vorausgesetzt werden.

7) Beweise die folgenden Formeln:

$$(a) H\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}H^{(0)}$$

$$(b) \Omega_{\pm}^{\dagger}\Omega_{\pm} = \mathbf{1}$$

8) Zeige, daß

$$S = \lim_{T \rightarrow \infty} U_1(-T, T)$$

ist, wobei U_1 den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild bedeutet (vgl. Abschnitt 4.5).

7.4 Streuphasen

Für die Streuung eines (spinlosen) Teilchens an einem Zentralpotential

$$H^{(1)} = V(R), \quad R = |\mathbf{X}|$$

folgt aus der Drehvarianz, daß S in der Drehimpulsdarstellung (vgl. 5.4) diagonal ist

$$\langle k', l', m' | S | k, l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k' - k) S_l(k).$$

Aus der Unitaritätsrelation für S erhält man damit die Bedingung

$$S_l(k) S_l^*(k) = 1.$$

S_l ist daher nur ein Phasenfaktor. Wir setzen

$$S_l(k) = \exp(2i\delta_l(k))$$

und verwenden die dadurch definierten (reellen) Streuphasen $\delta_l(k)$ zur Charakterisierung des Streuvorgangs (der Ansatz ist auch bei inelastischer Streuung möglich, jedoch sind die Streuphasen dann komplex). Durch Einsetzen der Umrechnungsformel von Abschnitt 5.4 zwischen Impuls- und Drehimpulsdarstellung erhält man

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{k^2} \delta(k' - k) \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta', \varphi') Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) S_l(k).$$

Dabei sind (ϑ', φ') die Winkel von \mathbf{k}' , (ϑ, φ) diejenigen von \mathbf{k} mit der Richtung (z -Achse), bezüglich der die Drehimpulsquantelung definiert ist. Wählen wir diese Richtung $\|\mathbf{k}$, so ist

$$\vartheta = 0, \quad Y_{lm}^*(0, \varphi) = \delta_{m,0} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}, \quad Y_{l0}(\vartheta', \varphi') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta').$$

Der Winkel ϑ' ist der Winkel zwischen \mathbf{k}' und \mathbf{k} , d.h. der Streuwinkel $\vartheta' = \theta$. Damit wird

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{4\pi k^2} \delta(k' - k) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) S_l(k) P_l(\cos \theta).$$

Für die \hat{T} -Matrix bzw. die Streuamplitude enthält man analoge Entwicklungen ohne die δ -Funktion. Die Entwicklungskoeffizienten lassen

sich in einfacher Weise durch die Streuphasen ausdrücken. Für die Streuamplitude erhält man

$$A(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos \theta)$$

mit

$$a_l(k) = \frac{i}{2k} (1 - S_l(k)) = \frac{1}{k} \exp(i\delta_l(k)) \sin \delta_l(k)$$

Der differentielle Streuquerschnitt hat die Form einer Doppelsumme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \cos(\delta_l - \delta_{l'}).$$

Für den totalen Querschnitt erhält man (z.B. mit der Orthogonalitätsrelation der Y_{l0})

$$\sigma = \sum_l \sigma_l \quad \text{mit} \quad \sigma_l = 4\pi(2l+1)|a_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k).$$

Der praktische Nutzen dieser Zerlegung des Streuquerschnitts in Beiträge von Partialwellen liegt darin, daß man damit eine zweckmäßige Parametrisierung experimenteller Daten erreicht. Das ist besonders dann notwendig, wenn man das Potential nicht kennt und aus den empirischen Daten bestimmen möchte. Haben die Kräfte kurze Reichweite, so läßt sich zeigen, daß bei nicht zu großer Energie nur wenige Partialwellen beitragen. Das sieht man z.B. aus der Bornschen Näherung, in der bei kleiner Energie die Winkelabhängigkeit herausfällt (d.h. es trägt nur $l=0$ bei) und bei etwas größerer Energie ein Term $\sim \Delta k^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$ auftritt ($l=1 : P_1 = \cos \theta$). Man wird daher versuchen, eine experimentelle Kurve für den Wirkungsquerschnitt durch Überlagerung einer bestimmten Anzahl von Partialwellen (umso mehr, je höher die Energie ist) wiederzugeben und auf diese Weise die untersten Streuphasen aus den experimentellen Daten zu bestimmen (Phasenanalyse). Diese Bestimmung ist meist nicht eindeutig, d.h. es kann mehrere Gruppen von Phasen geben, mit denen man die experimentelle Kurve bis zu einer bestimmten Energie gleich gut wiedergeben kann. Jedenfalls lernt man etwas über das Potential, und zwar umso mehr, je mehr Phasen man bestimmen kann.

Ein wichtiger Zusammenhang ergibt sich, indem man die Entwicklung von σ mit der von A vergleicht. Daraus folgt

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} A(k, 0).$$

Dieser Zusammenhang zwischen dem totalen Querschnitt und der Amplitude für Vorwärtsstreuung ($\theta = 0$) heißt **optisches Theorem** und ist eine direkte Folge der Unitarität von S .

7.5 Resonanzverhalten

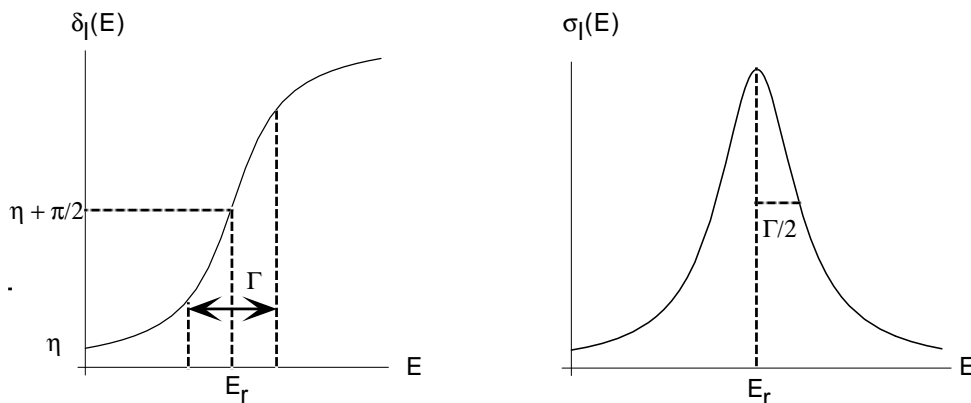
Der Maximalwert für einen Partialwellenquerschnitt $\sigma_l = \sigma_l(k)$ wird angenommen, wenn die entsprechende Phase $\delta_l(k)$ für einen bestimmten Wert k_r durch $\pi/2$ geht:

$$\begin{aligned} \delta_l(k_r) &= \pi/2 \\ \sigma_l(k_r) &= (\sigma_l)_{\text{Max}} = \frac{4\pi(2l+1)}{k_r^2} \end{aligned}$$

Eine solche Stelle k_r heißt **Resonanz**, die zugehörige Energie $E_r = \hbar^2 k_r^2 / 2m$ heißt Resonanzenergie. Da der Wirkungsquerschnitt für die entsprechende Partialwelle dort besonders groß wird, ist auch die Wahrscheinlichkeit besonders groß, d.h. für den betreffenden Eigenwert E_r "spüren" die Teilchen mit dem entsprechenden Drehimpuls l das Streuzentrum besonders stark. Ohne Beweis (der durch Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung erfolgen müßte) sei bemerkt, daß eine solche Situation dann zustande kommt, wenn das **effektive** Potential (inklusive Zentrifugalterm, vgl. 5.5) eine durch einen Potentialwall vom übrigen Raum getrennte Mulde aufweist. Eine solche wird z.B. sehr oft durch eine Kombination von Drehimpulsterm und anziehendem Potential erzeugt. Klassisch könnte ein Teilchen, das innerhalb des Potentialwalls ist, diesen nicht verlassen, wenn seine kinetische Energie kleiner als die Höhe des Walls ist. In der Quantentheorie besteht dafür eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit, da die Wellenfunktion des entsprechenden Problems auch außerhalb des Walls nicht verschwindet. Es bilden sich daher keine stationären Zustände aus, sondern quasistationäre, d.h. es gibt Energieniveaus endlicher Breite (sog. virtuelle Niveaus), die bei unendlich hohem Wall unendlich scharf wären. Läuft nun ein Teilchen von außen mit einer kinetischen Energie gegen den

Wall, die kleiner als die Höhe des Walls ist, so besteht eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit, daß es den Wall "durchtunnelt", denn die Wellenfunktion verschwindet im Inneren nicht. Für bestimmte Energie- und Drehimpulswerte wird die Wellenfunktion im Inneren sogar besonders groß, nämlich dann, wenn Energie und Drehimpuls gerade einem der quasistationären Zustände entsprechen, d.h. wenn die Energie des einfallenden Teilchens "in Resonanz" mit einem der virtuellen Zustände ist. In einer zeitabhängigen Beschreibung "bleibt" das betrachtete Teilchen dann besonders lang im Inneren des Walls, ehe es auf der anderen Seite herauskommt. Die Resonanz ist umso ausgeprägter, je schärfer das virtuelle Energieniveau ist.

Wir betrachten nun eine resonante Partialwelle und versuchen, die Abhängigkeit der Streuphasen von der Energie durch eine einfache Formel wiederzugeben. Die in der Formel enthaltenen Parameter kann man entweder als empirische Charakteristika auffassen (also ihre Werte durch Anpassung an experimentelle Daten ermitteln), oder man kann versuchen, die angenommene Form der Abhängigkeit und die Zahlenwerte der Parameter durch Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung zu bestimmen (wobei die genaue Form der Wechselwirkung, d.h. das Potential bekannt sein muß). Qualitativ erwartet man eine Energieabhängigkeit in folgender Form:



Das dargestellte Verhalten für δ_l entspricht einem deutlich ausgeprägten Maximum von σ_l . Für einen weniger steilen Verlauf ist das Maximum weniger scharf. Der weitere Anstieg der Phase oberhalb von $\pi/2$ (bis zu einem Wert nahe von π) ist wesentlich; biegt die Phase

oberhalb $\pi/2$ sehr bald um, so erhält man im Wirkungsquerschnitt nur einen Anstieg und kein Maximum. Eine zweckmäßige Parametrisierung dieses Verhaltens ist

$$\delta_l \approx \eta + \arctan \frac{\Gamma}{2(E_r - E)}$$

wobei η in der Nähe der Resonanz langsam veränderlich ist. Vernachlässigt man η , so erhält man nahe der Resonanz

$$a_l \approx \frac{1}{k} \frac{\Gamma/2}{E_r - E - i\Gamma/2}$$

Für den Wirkungsquerschnitt erhält man die **Breit-Wigner-Formel**

$$\sigma_l \approx \sigma_l(E_r) \frac{\Gamma^2}{4(E_r - E)^2 + \Gamma^2}$$

Die Größe Γ ist ein Maß für die Schärfe des Maximums im Wirkungsquerschnitt. Das Matrixelement von S wird

$$S_l(E) \approx \frac{E_r - E + i\Gamma/2}{E_r - E - i\Gamma/2}$$

Die S -Matrix hat daher bei Vorliegen einer Resonanz eine Nullstelle in der oberen und einen Pol in der unteren Hälfte der komplexen E -Ebene. Diese Struktur kann für Potentiale endlicher Reichweite mathematisch gerechtfertigt werden.

8. Ununterscheidbare Teilchen

Befinden sich unter den Bestandteilen eines Systems mehrere ununterscheidbare Teilchen, so treten bei einer Beschreibung mit der Quantentheorie charakteristische Züge auf, zu denen es kein klassisches Gegenstück gibt. Da fast alle Kerne und Atome, alle Moleküle und alle daraus aufgebauten Objekte ununterscheidbare Teilchen enthalten, sind diese charakteristischen Aspekte für Aufbau und Struktur der Materie von grundlegender Bedeutung. Im folgenden Kapitel sollen diese Aspekte näher untersucht und wichtige Methoden zu ihrer Beschreibung skizziert werden. Dem Umfang nach bildet die getroffene Auswahl einen Mindestkatalog von formalen Werkzeugen, die man für die Untersuchung quantenmechanischer Mehrkörperprobleme verwenden kann. Will man damit in der Natur vorkommende Systeme untersuchen, so ist der für eine brauchbare Näherungslösung erforderliche rechentechnische Aufwand für eine einführende Darstellung zu groß. Die Konsequenzen der Quantentheorie für ununterscheidbare Teilchen können daher hier nur in Form von eher qualitativen Betrachtungen verfolgt werden, aus denen nur die wichtigsten quantitativen Trends ersichtlich sind.

8.1 Zustände für ununterscheidbare Teilchen

Als Ausgangspunkt für unsere Untersuchung betrachten wir einen Zustand für ein Teilchen (Nr. λ) eines Systems von n ununterscheidbaren, freien Teilchen. Wir charakterisieren den Zustand durch einen Satz von Quantenzahlen (= Eigenwerte eines vollständigen Systems vertauschbarer Operatoren für ein Teilchen). Wir schreiben für den ganzen Satz von Eigenwerten nur einen (kleinen) Buchstaben, entsprechend für den Satz von Operatoren einen Großbuchstaben:

$$Q_\lambda |q\rangle_\lambda = |q\rangle_\lambda q$$

λ indiziert dabei den Einteilchen-Zustandsraum des Teilchens Nr. λ . q bedeutet einen festen Satz von Quantenzahlen; wenn eine Unterscheidung von verschiedenen Werten der Quantenzahlen nötig ist, tun wir dies durch einen Index. Beispiele:

- a) Spinzustände: $Q_\lambda = (\mathbf{S}^2, S_3)_\lambda$ Spin (des Teilchens) Nr. λ
 $|q_i\rangle_\lambda$ bedeutet den i ten Eigenwert in einer geeigneten Abzählung, z.B. für Spin 1/2:

$$|q_1\rangle_\lambda = \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_\lambda, \quad |q_2\rangle_\lambda = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_\lambda$$

b) Durch Impuls und Spin charakterisierte Zustände eines Teilchens

$$Q_\lambda = (\mathbf{P}, \mathbf{S}^2, S_3)_\lambda, \quad |q_i\rangle_\lambda = |\mathbf{k}, s, m_s\rangle_\lambda$$

i indiziert hier kontinuierliche **Werte** für \mathbf{k} und diskrete für m_s (analog für Ortszustände).

c) Zustände eines Teilchens in einem Zentralpotential

$$|q_i\rangle_\lambda = |n, l, s, j, m_j\rangle_\lambda$$

i indiziert hier die **Werte** der Hauptquantenzahl n und der Drehimpulsquantenzahlen: Bahndrehimpuls l , Spin s , Gesamtdrehimpuls (j, m_j).

Aus diesen Zuständen konstruieren wir durch direkte Produktbildung Mehrteilchenzustände. Die **Nummer** des Teilchens deuten wir dabei durch die **Stellung** im Zustandsvektor an. $|q_a, q_b, q_c\rangle$ bedeutet also (als Beispiel) den Dreiteilchenzustand, in dem Teilchen Nr. 1 die Quantenzahl(en) q_a , Teilchen Nr. 2 die Quantenzahl(en) q_b und Teilchen Nr. 3 die Quantenzahl(en) q_c hat. Als direktes Produkt geschrieben ist

$$|q_a, q_b, q_c\rangle = |q_a\rangle_1 \otimes |q_b\rangle_2 \otimes |q_c\rangle_3$$

Die konstruierten Zustände beziehen sich auf Teilchen ohne Wechselwirkung untereinander; im oben betrachteten Beispiel c) unterliegen sie alle dem gleichen Zentralpotential. Für wechselwirkende Teilchen können die Zustände als Basiszustände verwendet werden (analog wie z.B. die Impuls- oder die Ortszustände für ein Teilchen in einem Potential).

Für gleichartige Teilchen (z.B. lauter Elektronen) tritt in der Quantentheorie ein neuer Aspekt auf: da man solche Teilchen (definitionsgemäß) nicht voneinander unterscheiden kann, darf es physikalisch nichts ausmachen, wenn man zwei von ihnen (z.B. Nr. λ und Nr. λ') vertauscht. Das bedeutet aber, daß man die entsprechenden Quantenzahlen vertauscht: der durch Vertauschung aus

$$|\dots (q_j)_\lambda \dots (q_k)_{\lambda'} \dots\rangle$$

entstehende Zustand ist

$$\begin{aligned} |\dots (q_k)_\lambda \dots (q_j)_{\lambda'} \dots\rangle &= P(\lambda, \lambda') |\dots (q_j)_\lambda \dots (q_k)_{\lambda'} \dots\rangle = \\ &= P(j, k) |\dots (q_j)_\lambda \dots (q_k)_{\lambda'} \dots\rangle \end{aligned}$$

Dabei bedeutet $P(a, b)$ den Operator, der die Vertauschung bewirkt. Dieser Zustand muß mit dem ursprünglichen physikalisch äquivalent sein, d.h. die Zustände dürfen sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden. Der Vertauschungsoperator $P(\lambda, \lambda')$ muß mit jedem möglichen Hamiltonoperator H kommutieren

$$[H, P(\lambda, \lambda')] = 0,$$

denn es darf keine Energie kosten, wenn man ununterscheidbare Objekte vertauscht. $P(\lambda, \lambda')$ ist daher eine Erhaltungsgröße und mit H simultan diagonalisierbar. Das Quadrat von P ist der Einheitsoperator (zweimaliges Vertauschen führt den Zustand in sich über)

$$P(\lambda, \lambda')^2 = \mathbf{1}.$$

Die Eigenwerte sind daher ± 1 . Der Eigenwert eines Zustands ist für diesen ein "ewiges" Charakteristikum, weil P erhalten ist.

Betrachten wir zunächst als einfachsten Fall zwei Teilchen. Es gibt dann nur einen Vertauschungsoperator $P(1, 2)$. Seine Eigenzustände sind

$$\begin{aligned} |q_1, q_2\rangle_S &= (\mathbf{1} + P(1, 2)) |q_1, q_2\rangle f_S && \text{Eigenwert } +1 \\ |q_1, q_2\rangle_A &= (\mathbf{1} - P(1, 2)) |q_1, q_2\rangle f_A && \text{Eigenwert } -1 \end{aligned}$$

Dabei ist f_S bzw. f_A ein Normierungsfaktor. Der Eigenwert (also der Symmetriecharakter des Zweiteilchenzustands bei Vertauschung) ist eine permanente Eigenschaft, die durch keine Wechselwirkung verändert werden kann. Er kann daher als Charakteristikum für die **Teilchensorte** aufgefaßt werden. Teilchen, deren Zweiteilchenzustand symmetrisch ($_S$, Eigenwert $+1$) ist, heißen **Bosonen** (Boseteilchen, Teilchen mit Bose-Einsteinstatistik). Beispiele dafür sind: Lichtquanten, Pionen, Deuteronen, α -Teilchen, Wasserstoffmoleküle usw. Teilchen, deren Zweiteilchenzustand antisymmetrisch ($_A$, Eigenwert -1) ist, heißen **Fermionen** (Fermiteilchen, Teilchen mit Fermi-Dirac-Statistik). Beispiele sind: Neutrinos, Elektronen, Protonen, Neutronen, Muonen, Tritiumkerne usw. Zwei Fermionen können nie in einem Zustand angetroffen werden, in dem sie in allen Quantenzahlen übereinstimmen. Diese Aussage heißt **Pauliprinzip**. Pauli hat das Prinzip vor der Entwicklung des quantenmechanischen Formalismus als Postulat formuliert und damit wesentliche Züge

des periodischen Systems der Elemente erklärt. Im hier betrachteten Zusammenhang ist das Prinzip eine Konsequenz der Antisymmetrie: für gleiche Quantenzahlen verschwindet jede Amplitude

$$\langle \psi | q_1, q_1 \rangle_A = 0.$$

Erfahrungsgemäß hängt die Zugehörigkeit von Teilchen zu einer der beiden Klassen mit dem Spin der Teilchen zusammen: Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen, solche mit halbzahligen Spin sind Fermionen. Dieser Zusammenhang zwischen Spin und Statistik kann im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie unter sehr wenigen und allgemeinen Voraussetzungen bewiesen werden. Der erste Beweis stammt von W. Pauli (1940). Später konnten die Voraussetzungen, aus denen der Zusammenhang folgt, erheblich eingeschränkt (und der Gültigkeitsbereich der Aussage entsprechend erweitert) werden. Vgl. dazu z.B. R. Streater, A.S. Wightman, Die Prinzipien der Quantenfeldtheorie, BI Hochschultaschenbuch 435/435a.

Für mehr als zwei Teilchen gibt es mehrere Vertauschungsoperatoren, die zwar alle mit H kommutieren, aber nicht notwendigerweise miteinander, wie man schon am einfachsten Beispiel sieht:

$$\begin{aligned} P(1, 2)P(2, 3)|q_1, q_2, q_3\rangle &= P(1, 2)|q_1, q_3, q_2\rangle = \\ &= |q_2, q_3, q_1\rangle \\ P(2, 3)P(1, 2)|q_1, q_2, q_3\rangle &= |q_3, q_1, q_2\rangle \end{aligned}$$

Es wären daher komplizierte Symmetrieeigenschaften der Mehrteilchenzustände denkbar. Tatsächlich sind in der Natur nur Zustände realisiert, die bei Vertauschung zweier **beliebiger** ununterscheidbarer Teilchen symmetrisch (für Bosonen) bzw. antisymmetrisch (für Fermionen) sind. Diese empirische Tatsache ist kein "Wunder", sondern plausibel: man kann sich z.B. vorstellen, daß es einen Dreiteilchenzustand gibt, bei dem zwei Teilchen sehr nahe beisammen sind und das dritte sehr weit weg von ihnen ist. Es wäre dann (besonders wenn die Teilchen aufeinander Kräfte mit kurzer Reichweite ausüben) sehr schwer verständlich, wenn die Hinzunahme des dritten Teilchens den Symmetriecharakter des Zustands bei Vertauschung der beiden benachbarten Teilchen verändern würde. Dieser Schluß kann für beliebige Mehrteilchenzustände angewandt werden und zeigt, daß die tatsächliche Situation in diesem Sinn die plausibelste ist. Mehrteilchenzustände mit den richtigen

Symmetrieeigenschaften können mit Hilfe von Permutationsoperatoren gefunden werden. Für einen n -Teilchenzustand gibt es $n!$ Möglichkeiten für die Anordnung der im Zustand auftretenden Sätze von Quantenzahlen. Wir bezeichnen mit $P(\nu)$ den Permutationsoperator, der die ν -te Permutation herstellt. Jede Permutation von n Objekten kann durch eine Folge von Vertauschungen von je zwei Objekten zustandegebracht werden. Daher kann $P(\nu)$ aus Produkten von Operatoren $P(i, j)$ aufgebaut werden. Je nachdem, ob die Anzahl der Vertauschungen von zwei Objekten gerade oder ungerade ist, kann man der Permutation ein Vorzeichen $\varepsilon(\nu) = \pm 1$ zuordnen. Die gesuchten Zustände mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned} P(i, j)|\dots q_i \dots q_j \dots\rangle_S &= |\dots q_i \dots q_j \dots\rangle_S \quad (\text{f. Bosonen}) \\ P(i, j)|\dots q_i \dots q_j \dots\rangle_A &= -|\dots q_i \dots q_j \dots\rangle_A \quad (\text{f. Fermionen}) \end{aligned}$$

sind dann in folgender Weise zu erhalten:

$$\begin{aligned} |q_1 \dots q_n\rangle_S &= S|q_1 \dots q_n\rangle = f \sum_{\nu} P(\nu)|q_1 \dots q_n\rangle \\ |q_1 \dots q_n\rangle_A &= A|q_1 \dots q_n\rangle = f \sum_{\nu} \varepsilon(\nu)P(\nu)|q_1 \dots q_n\rangle \end{aligned}$$

Die Summe läuft dabei über alle $n!$ Permutationen, unter denen sich auch die Einheit (d.h. es wird nicht permutiert) befindet. f ist dabei ein Normierungsfaktor. Um ihn zu bestimmen, betrachten wir zunächst Bosonen. Der Symmetrisierungsoperator S ist reell $S^\dagger = S$, wie aus seiner Definition unmittelbar ersichtlich ist. Da eine Permutation der Teilchen an den symmetrisierten Zuständen $|\dots\rangle_S$ nichts ändert, vertauscht S mit jedem Permutationsoperator und es ist

$$P(\nu)S = SP(\nu) = S.$$

Als Folge davon ist

$$S^2 = f \sum_{\nu} P(\nu)S = fn!S$$

(das ist anschaulich zu verstehen: das Symmetrisieren eines bereits symmetrischen Ausdrucks bewirkt, daß jeder Term $n!$ mal angeschrieben wird). Mit diesem Resultat erhalten wir

$${}_S\langle a, b, \dots | a, b, \dots \rangle_S = \langle a, b, \dots | S^2 | a, b, \dots \rangle = fn! \langle a, b, \dots | a, b, \dots \rangle_S$$

Die linke Hälfte der Klammer ist der Zustand

$${}_1\langle a| \otimes {}_2\langle b| \otimes \dots$$

Die rechte Hälfte ist

$$|a, b, \dots\rangle_S = f (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 \otimes \dots + |a\rangle_2 \otimes |b\rangle_1 \otimes \dots + \dots).$$

Im Skalarprodukt bleibt daher nur der erste Term übrig und wir erhalten

$${}_S\langle a, b, \dots | a, b, \dots\rangle_S = n! f^2 \langle a|a\rangle_1 \langle b|b\rangle_2 \dots$$

Für normierte Einteilchenzustände gibt das ($a \neq b$)

$$f = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

Für Fermionen erhält man dasselbe Resultat.

Für die so konstruierten Zustände ist es nicht mehr möglich zu sagen, welchem der n Teilchen eine durch q_j bestimmte Eigenschaft zukommt, denn es treten alle Permutationen solcher Zuordnungen auf. Der Ununterscheidbarkeit der Teilchen ist damit Rechnung getragen.

Die mit diesen Zuständen berechneten Wahrscheinlichkeiten unterscheiden sich beträchtlich von denen, die man für unterscheidbare Teilchen erhalten würde. Um das einzusehen, betrachten wir die Übergangswahrscheinlichkeit von einem beliebigen Zustand für zwei Teilchen

$$|\psi, \varphi\rangle = |\psi\rangle_1 |\varphi\rangle_2$$

zu einem der Zustände $|a, b\rangle_S$ bzw. $|a, b\rangle_A$

$$W_S(a, b|\psi, \varphi) = |{}_S\langle a, b|\psi, \varphi\rangle|^2 \quad (\text{analog f. } A),$$

und vergleichen sie mit der Wahrscheinlichkeit, die man für unterscheidbare Teilchen erhalten würde

$$W(a, b|\psi, \varphi) = |\langle a, b|\psi, \varphi\rangle|^2 = |{}_1\langle a|\psi\rangle_1 \cdot {}_2\langle b|\varphi\rangle_2|^2.$$

Dabei nehmen wir an, daß die Quantenzahlen a, b gleiche (oder nahe benachbarte) Werte haben sollen. Man kann sich z.B. ein Streuexperiment vorstellen, bei dem die beiden anfangs sehr weit voneinander entfernten Teilchen in einem Zähler gezählt werden, der sehr klein ist,

sodaß er die Teilchen nur registriert, wenn sie praktisch am gleichen Ort sind. Durch Einsetzen der Zustände findet man

$$W_S(a, a|\psi, \varphi) = 2W(a, a|\psi, \varphi)$$

$$W_A(a, a|\psi, \varphi) = 0$$

Für zwei Bosonen ist also die Wahrscheinlichkeit doppelt so groß wie für unterscheidbare Teilchen, für zwei Fermionen wird sie Null. Für n Bosonen ist

$$W_S(n) := W_S(a, a, \dots, a|\psi_1, \dots, \psi_n) = n! W(n)$$

Fügt man ein weiteres Boson hinzu, das anfangs im Zustand $|\psi_{n+1}\rangle$ war, so wird

$$\begin{aligned} W_S(n+1) &= (n+1)! |{}_1\langle a|\psi_{n+1}\rangle_1|^2 W(n) \\ &= (n+1) |{}_1\langle a|\psi_{n+1}\rangle_1|^2 W_S(n) \end{aligned}$$

$W_S(n)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, n Bosonen im Zustand mit gleichen Quantenzahlen a anzutreffen, $|\dots|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das hinzugefügte Teilchen **allein** in diesem Zustand anzutreffen. Insgesamt wird die Wahrscheinlichkeit beim Hinzufügen eines Bosons wegen des Faktors $(n+1)$ umso größer, je mehr Bosonen schon vorher in dem Zustand waren. Diese Tatsache ist der Grund für das Auftreten makroskopischer Quanteneffekte bei niedrigen Temperaturen. Am absoluten Nullpunkt sind alle Teilchen eines Gases (wechselwirkungsfreier) Bosonen im Grundzustand: das Gas ist vollständig kondensiert. Bei genügend niedriger Temperatur befindet sich noch eine makroskopische Anzahl von Bosonen im Kondensat. Senkt man die Temperatur von größeren Werten ab, so “fallen” bei Unterschreiten einer kritischen Temperatur makroskopisch viele Teilchen in den Grundzustand, es tritt Bosekondensation ein. Das Kondensat ist an seinen besonderen Eigenschaften zu erkennen. Z. B. kann die Tatsache, daß Helium bei niedrigen Temperaturen supraflüssig wird, als Bosekondensation verstanden werden. Bei Fermionsystemen gibt es diesen Kondensatstyp nicht.

Die “Tendenz zum Kollektiv” bei Bosonsystemen stellt einen scharfen Gegensatz zum “extremen Individualismus” bei Fermionsystemen dar. In der Quantenstatistik ergeben sich daraus charakteristische Unterschiede zwischen Systemen “mit Bosestatistik” und solchen “mit Fermistatistik”. Sowohl diese Unterschiede als auch diejenigen zur klassischen Statistik werden in Teil IV dieser Vorlesungsausarbeitung untersucht.

8.2 Vereinfachte Theorie des Heliumatoms

Als einfachstes Beispiel für ein Mehrkörperproblem und die Wirkung des Pauliprinzips betrachten wir das Heliumatom. Vernachlässigen wir alle spinabhängigen Kräfte, so hat der Hamiltonoperator (für ruhenden Kern) die Form

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P}^{(1)2} + \mathbf{P}^{(2)2} \right) - 2e^2 \left(\frac{1}{|\mathbf{X}^{(1)}|} + \frac{1}{|\mathbf{X}^{(2)}|} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{X}^{(1)} - \mathbf{X}^{(2)}|}.$$

Der Spin kommt in H nicht vor und ist daher als “angeklebtes Etikett” anzusehen, d.h. wir schreiben den Spinanteil der Zustände als Faktor, auf den H nicht wirkt. Der Austauschoperator $P(1, 2)$ kann dann als Produkt von zwei Operatoren geschrieben werden $P(1, 2) = R(1, 2) S(1, 2)$, von denen der eine $S(1, 2)$ nur die Spins der Teilchen vertauscht und der andere $R(1, 2)$ nur auf alle übrigen Eigenschaften wirkt. Diese beiden Anteile kommutieren miteinander und mit H . Der Spinaustauschoperator kommutiert nicht mit den Spinoperatoren der beiden Elektronen, wohl aber mit dem Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}.$$

Der Operator $R(1, 2)$ kommutiert nicht mit den Bahndrehimpulsen der beiden Elektronen, wohl aber mit dem gesamten Bahndrehimpuls \mathbf{L} . Ein System vertauschbarer Operatoren besteht daher aus

$$H, P(1, 2), S(1, 2), \mathbf{L}^2, L_3, \mathbf{S}^2, S_3$$

und die Eigenvektoren von H können durch die entsprechenden Quantenzahlen gekennzeichnet werden.

Wir untersuchen zunächst den Spinanteil der Zustände, der durch die Quantenzahlen von \mathbf{S}^2, S_3 und $S(1, 2)$ charakterisiert wird. Die entsprechenden Zustandsvektoren $|s, m_s\rangle$ bauen wir aus den Spinzuständen

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle =: |\uparrow\rangle, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle =: |\downarrow\rangle$$

der beiden Elektronen auf. Das kann z.B. mit den Regeln der Drehimpulsaddition (vgl. Abschnitt 5.4) geschehen. In der dort benützten Bezeichnungsweise ist

$$|s, m_s\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, s, m_s \right\rangle$$

und ist aus

$$\left| \left(\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle_2$$

aufzubauen. Man erhält damit vier orthogonale Zustände, die automatisch Eigenzustände zu $S(1, 2)$ sind. In der "Pfeil"-Bezeichnungsweise haben sie folgende Form

(a) Gesamtspin 1 ($s = 1$), Eigenwert $+1$ von $S(1, 2)$:

$$\begin{aligned} |1, +1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle_S \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

(b) Gesamtspin 0 ($s = 0$), Eigenwert -1 von $S(1, 2)$:

$$|0, 0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle_A.$$

Nun betrachten wir den zweiten Faktor, aus dem sich der gesamte Zustandsvektor zusammensetzt. Dieser Faktor ist vom Spin nicht gänzlich unabhängig, denn der gesamte Zustandsvektor muß wegen des Pauliprinzips Eigenzustand zu $P(1, 2)$ mit dem Eigenwert -1 sein: für $S = 1$ muß daher der zweite Faktor antisymmetrisch sein, für $S = 0$ symmetrisch.

Um einen Überblick zu erhalten, vernachlässigen wir zunächst auch noch die Wechselwirkung der Elektronen. Dann ist der Hamiltonoperator die Summe der entsprechenden Einteilchenoperatoren und die Elektronen bewegen sich bis auf die Symmetrieeffekte unabhängig voneinander. Als Eigenwerte erhält man die Summe der entsprechenden Wasserstoffeigenwerte

$$E(n_1, n_2) = -4E_R \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Als gesamte Zustandsvektoren erhält man dann

$$|n_1, n_2, l, m_l, s, m_s\rangle = |n_1, n_2, l, m_l, s\rangle \otimes |s, m_s\rangle$$

wobei der erste Faktor aus den Produkten der Einteilchenvektoren

$$|(n, l, m_l)_1\rangle_1 \otimes |(n, l, m_l)_2\rangle_2$$

so aufzubauen ist, daß ein Eigenzustand zu \mathbf{L}^2, L_3 (mit $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$) mit der richtigen Austauschsymmetrie entsteht. Wir betrachten hier nur die Zustände mit

$$\mathbf{L}^{(1)} = 0, (n, l, m_l)_1 = (1, 0, 0)$$

Im zweiten Faktor beziehen sich die Quantenzahlen dann auf den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(2)}$. Für festes (n, l, m_l) gibt es drei Triplett-niveaus

$$|1, n, l, m_l, 1\rangle = |(1, 0, 0), (n, l, m_l)\rangle_A$$

und ein Singulett-niveau

$$|1, n, l, m_l, 0\rangle = |(1, 0, 0), (n, l, m_l)\rangle_S$$

die miteinander entartet sind. Der Grundzustand $(1, 0, 0)_1(1, 0, 0)_2$ existiert nur als Singulettzustand, weil die antimetrische Kombination identisch verschwindet: als Folge des Pauliprinzip “passen” in die unterste Bohrsche Bahn nur zwei Elektronen, die sich in der Spinrichtung unterscheiden.

Nun untersuchen wir, was sich an diesem Bild ändert, wenn man die Coulombwechselwirkung der Elektronen

$$H_w = \frac{e^2}{|\mathbf{X}^{(1)} - \mathbf{X}^{(2)}|}$$

nicht vernachlässigt. Als Maß dafür betrachten wir den Erwartungswert zwischen den betrachteten Zuständen

$$\langle H_w \rangle := \langle 1, n, l, m_l, s | H_w | 1, n, l, m_l, s \rangle.$$

Betreibt man Störungstheorie mit H_w als Störung, so gibt $\langle H_w \rangle$ die niedrigste Näherung für die Änderung der Eigenwerte an. Die damit erhaltenen Resultate sind allerdings quantitativ nicht ausreichend, weil H_w nicht immer eine “kleine” Störung bildet. Für genaue Resultate müssen Variationsverfahren verwendet werden. Dafür bilden die hier betrachteten Zustände eine Ausgangsbasis für die trial states (vgl. Abschnitt 6.2). Als einfachste Möglichkeit für einen Variationsansatz kann man z.B. die Kernladungszahl $Z = 2$ durch eine “effektive” Kernladungszahl Z_{eff} ersetzen

$$4E_R = 4 \frac{me^4}{2\hbar^2} \rightarrow \frac{m (Z_{eff} e^2)^2}{2\hbar^2}$$

und Z_{eff} bzw. den zugehörigen Bohrschen Radius

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{Z_{eff} e^2 m}$$

als Variationsparameter benutzen (die Variationsrechnung muß dabei natürlich für das ganze H durchgeführt werden). Damit erhält man für den Grundzustand ein relativ gutes Ergebnis. Für spektroskopische Genauigkeit ist der erforderliche Aufwand natürlich wesentlich größer.

Für alle angeregten Zustände ($(n, l, m) \neq (1, 0, 0)$) besteht der Erwartungswert von H_w aus zwei Termen

$$\langle H_w \rangle = D \pm A$$

wobei das obere Vorzeichen den Singulettzuständen ($s = 0$) und das untere den Triplettzuständen ($s = 1$) entspricht. Dabei ist D die "direkte" Wechselwirkungsenergie (Coulombenergie)

$$D = ({}_1\langle 1, 0, 0 | \otimes {}_2\langle n, l, m |) H_w (|1, 0, 0\rangle_1 \otimes |n, l, m\rangle_2).$$

Sie trägt der Abschirmung des Coulombfeldes des Kerns durch das "innere" Elektron $(1, 0, 0)_1$ Rechnung. Der andere Beitrag A , die Austauschenergie

$$A = ({}_1\langle 1, 0, 0 | \otimes {}_2\langle n, l, m |) H_w (|n, l, m\rangle_1 \otimes |1, 0, 0\rangle_2)$$

rührt vom Austausch der beiden Teilchen her. Da dieser Term positiv ist, liegen die Triplettzustände bei kleineren Energien als die entsprechenden Singulettzustände. Diese Aufspaltung durch die Austauschenergie kann man anschaulich verstehen: im Triplettzustand ist der Spinteil symmetrisch und daher (in der Ortsdarstellung) der Ortsanteil der Wellenfunktion antisymmetrisch, d.h. die Elektronen vermeiden es, einander nahezukommen. Dadurch ist die abstoßende Coulombwechselwirkung zwischen ihnen im Mittel kleiner, diese Zustände sind daher energetisch etwas begünstigt, sie haben kleinere Energie.

Das Heliumspektrum besteht daher aus einem Singulettpektrum (Parahelium) und einem Triplettpektrum (Orthohelium), wobei das letztere etwas kleineren Energien entspricht. Eine Ausnahme bildet der

Grundzustand, der ein Singulettzustand ist. Er liegt wesentlich tiefer als bei Wasserstoff, da die Kernladungszahl doppelt so groß ist. Außerdem ist der Abstand zu den angeregten Niveaus sehr groß: im Grundzustand sind beide Elektronen nahe am Kern und werden stark angezogen. In den angeregten Zuständen ist immer ein Elektron in einer weiter außen liegenden Bahn, während ein Elektron in der untersten Bahn bleibt. Das äußere Elektron “fühlt” daher ein durch das innere Elektron abgeschirmtes Coulombfeld, es bewegt sich daher praktisch in einem Feld mit $Z_{eff} \approx 1$. Je höher die Anregung, desto ähnlicher wird das Spektrum daher dem Wasserstoffspektrum. Diese Ähnlichkeit ist besonders für Zustände mit höherem Bahndrehimpuls vorhanden. Die Anregungszustände mit kleinerem Bahndrehimpuls liegen hingegen etwas tiefer als die entsprechenden Wasserstoffzustände, da bei ihnen das “äußere” Elektron auch näher am Kern sein kann und daher mehr von der größeren Kernladung merkt.

Achtet man nur auf die spektroskopischen Daten, so könnte man schließen, daß Helium in zwei “Sorten” (allotrope Formen) vorkommt (Orthohelium bzw. Parahelium), die man anhand der verschiedenartigen Struktur des Anregungsspektrums unterscheiden kann. Die quantentheoretische Erklärung zeigt, daß es nur eine “Sorte” von Heliumatomen gibt, von denen jedes beide Typen von Anregungszuständen aufweist.

Berechnet man die Übergangselemente für Dipolstrahlung, so stellt man fest, daß Übergänge zwischen Singulett- und Triplett-niveaus verboten sind: Der Dipoloperator $e\mathbf{X}$ hängt nicht vom Spin ab. Seine Matrixelemente zwischen Zuständen mit ungleichem Gesamtspin sind daher Null.

Die Wechselwirkung von Spin- und Bahnmoment bzw. diejenige der beiden Spinmomente können als kleine Störung angesehen werden. Nimmt man sie mit, so sind \mathbf{L} und \mathbf{S} keine Erhaltungsgrößen mehr, da sie nicht mehr mit H kommutieren. Man hat also die Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ zu verwenden. Wegen der Kleinheit der Spinkräfte ist es jedoch in guter Näherung möglich, die Charakterisierung durch l und s beizubehalten, also einen Zustand durch n_1, n_2, l, s, j, m_j zu kennzeichnen, wobei $j = l + 1, l, l - 1 > 0$ für Triplettzustände und $j = l$ für Singulettzustände ist. Die Triplett-niveaus mit $l \neq 0$ spalten infolge der Spinbahnkopplung etwas auf.

Diese Sachverhalte bleiben bei allen heliumartigen Atomen (solchen

mit zwei Elektronen außerhalb abgeschlossener Schalen) gültig, wobei natürlich Z_{eff} im allgemeinen verschieden ausfällt, solange die Spinbahnkopplung genügend klein ist. Man beachte, daß das Pauliprinzip zusammen mit der Coulombkraft zwischen den Elektronen dazu führt, daß die Spins der beiden Elektronen $\mathbf{S}_{(1)}, \mathbf{S}_{(2)}$ **fest** miteinander zu einem Gesamtspin \mathbf{S} verkoppelt sind und auch die Bahndrehimpulse $\mathbf{L}_{(1)}, \mathbf{L}_{(2)}$ **fest** zu \mathbf{L} verkoppelt sind. Dabei soll "fest verkoppelt" bedeuten, daß die Einzelbestandteile keine Erhaltungsgrößen sind. Aus diesen beiden Drehimpulsen entsteht der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ durch **lose** Verkopplung, d.h. die Einzelbestandteile sind in guter Näherung (bei Vernachlässigung der Spinkräfte) Erhaltungsgrößen: Niveaus zu verschiedenen j bei festem l, s haben fast dieselbe Energie. Dieses Kopplungsverfahren (Addition der Spins, Addition der Bahndrehimpulse, lose Verkopplung zu einem Gesamtdrehimpuls) heißt Russell-Saunders-Kopplung oder $L - S$ -Kopplung. Es kann auf Mehrelektronensysteme verallgemeinert werden und funktioniert, solange die Spinbahnkopplung klein ist. Das ist für leichtere Atome und nicht zu hohe Anregungszustände der Fall.

Ist die Spinbahnkopplungsenergie größer als die Austauschenergie, so erhält man eine bessere Näherung, wenn man den extrem entgegengesetzten Fall betrachtet, d.h. man setzt erst die Spin- und Bahndrehimpulse jedes einzelnen Teilchens zu Gesamtdrehimpulsen $\mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)} \dots$ zusammen und verkoppelt diese lose zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)} + \dots$. Anders ausgedrückt: man charakterisiert die Zustände in niedrigster Näherung durch die Quantenzahlen $(j, m_j)_1, (j, m_j)_2, \dots$ (man verwendet also Eigenzustände zu einem H **mit** der Summe der Spinbahnkopplungsenergien der einzelnen Teilchen) und betrachtet die Austauschenergie (die diese Drehimpulse verkoppelt) als kleine Störung. Diese Kopplung heißt $J - J$ -Kopplung und ist in Atomen nie rein realisiert. Hingegen kann man viele Eigenschaften der Atomkerne erklären, wenn man annimmt, daß für die Nukleonen starke Spinbahn-Kräfte vorhanden sind (Schalenmodell, M.G. Mayer, H. Jensen).

8.3 Die Valenzbindung des Wasserstoffmoleküls

Das einfachste neutrale Molekül ist das Wasserstoffmolekül. Wir führen in diesem Abschnitt eine Näherungsbetrachtung durch, aus der man Aufschluß über das Zustandekommen der Valenzbindung erhalten kann. Wir verwenden dazu die bereits im Abschnitt 5.7 für die

Molekülschwingungen und -rotationen verwendete adiabatische Näherung. Dazu denken wir uns die beiden Protonen zunächst in einem festen Abstand r voneinander festgehalten, der als Parameter aufgefaßt wird. Wir versuchen eine Bestimmung der Energieniveaus der Elektronen $E_\nu = E_\nu(r)$ als Funktionen von r . Ein Bindungszustand des Moleküls ist offenbar nur dann möglich, wenn E_ν für einen bestimmten Wert $r = r_0$ ein Minimum hat (der dann u.a. die Gleichgewichtslage für die in 5.7 untersuchten Molekülschwingungen bildet). Wir betrachten einen festen Eigenzustand (z.B. den elektronischen Grundzustand) und lassen den Index ν weg. Wir charakterisieren die beiden Protonen durch ^(I) bzw. ^(II) und die Elektronen durch ⁽¹⁾ bzw. ⁽²⁾. Vernachlässigen wir alle spinabhängigen Kräfte, so wird der Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2m} \mathbf{P}^{(1)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{X}^{(1)} - \mathbf{x}^{(I)}|} + \frac{1}{2m} \mathbf{P}^{(2)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{X}^{(2)} - \mathbf{x}^{(II)}|} + \\
 &+ e^2 \left(\frac{-1}{|\mathbf{X}^{(2)} - \mathbf{x}^{(I)}|} + \frac{-1}{|\mathbf{X}^{(1)} - \mathbf{x}^{(II)}|} + \frac{1}{|\mathbf{X}^{(1)} - \mathbf{X}^{(2)}|} + \frac{1}{r} \right) = \\
 &=: H^{(1)} + H^{(2)} + H_w
 \end{aligned}$$

Die Ortsvektoren der beiden Protonen und ihr Abstand

$$r = |\mathbf{x}^{(I)} - \mathbf{x}^{(II)}|$$

sind dabei keine Operatoren, sondern Zahlen, da sich die Protonen voraussetzungsgemäß nicht bewegen sollen. Als unterste Näherung bauen wir Zweielektronenzustände unter Beachtung des Pauliprinzips aus den Zuständen von zwei unabhängigen Wasserstoffatomen auf (aus denen sich ja das Molekül zusammensetzt), d.h. aus den Eigenzuständen der beiden Hamiltonoperatoren $H^{(1)}, H^{(2)}$ (erste Zeile von H). Die Quantenzahlen kürzen wir mit

$$a = (n, l, m)_1 \text{ bzw. } b = (n, l, m)_2$$

ab, die Eigenwerte sind

$$E_a = -\frac{E_R}{n_1^2} \text{ bzw. } E_b = -\frac{E_R}{n_2^2}.$$

Die Spins der Elektronen sind in beiden Fällen "angeklebtes Etikett": Der Aufbau der Zweielektronenzustände erfolgt wie beim Heliumatom. Wie dort gibt es Triplett- und Singulettzustände

$$\begin{aligned}
|\psi_{tr}\rangle &:= |a, b, s = 1\rangle = f_{tr} (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 - |a\rangle_2 \otimes |b\rangle_1) \\
|\psi_{\sin}\rangle &:= |a, b, s = 0\rangle = f_{\sin} (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 + |a\rangle_2 \otimes |b\rangle_1)
\end{aligned}$$

Die Normierungsfaktoren sind jedoch für normierte Einteilchenzustände **nicht** gleich $1/\sqrt{2}$. Berechnet man sie aus $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, so kommt dabei u.a. das Skalarprodukt $\langle a|b\rangle_1$ vor, das **nicht** gleich δ_{ab} ist, weil sich die Quantenzahlen auf **verschiedene Atome** beziehen. Benützt man die Ortsdarstellung, so hat es die Form eines Überlappungsintegrals der Wellenfunktionen

$$K_{ab}(r) := \langle a|b\rangle_1 = \langle a|b\rangle_2 = \int \langle a|\mathbf{x}\rangle d^3x \langle \mathbf{x}|b\rangle.$$

Die Normierungsfaktoren haben die Form

$$f_{tr/\sin} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \mp |K_{ab}|^2)}}.$$

Wie beim Helium berechnen wir mit diesen Zuständen den Erwartungswert der Wechselwirkung H_w . Auch hier gibt es wieder eine “direkte” Wechselwirkungsenergie

$$D(r) = ({}_1\langle a| \otimes {}_2\langle b|) H_w (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2)$$

und eine Austauschenergie

$$A(r) = ({}_1\langle a| \otimes {}_2\langle b|) H_w (|a\rangle_2 \otimes |b\rangle_1).$$

Der Erwartungswert von H wird

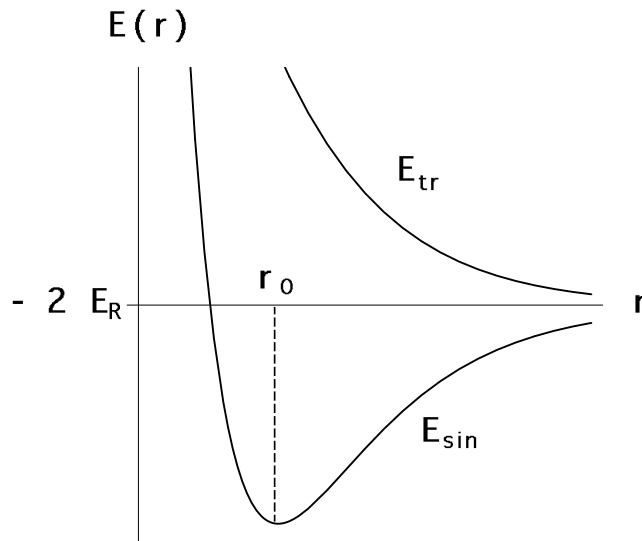
$$\langle\psi|H|\psi\rangle = E_a + E_b + V(r),$$

wobei das effektive Wechselwirkungspotential $V(r)$ folgende Form hat

$$V_{tr}(r) = \frac{D - A}{1 - |K|^2}, \quad V_{\sin}(r) = \frac{D + A}{1 + |K|^2}.$$

Betrachtet man H_w als kleine Störung, so liefert $\langle\psi|H|\psi\rangle$ die gesuchten Energiekurven $E(r)$ in erster Ordnung der Störungstheorie. Die auftretenden Größen D , A und K müssen mit Hilfe von Wasserstoffeigenfunktionen berechnet werden. Für den Grundzustand $a = b = (1, 0, 0)$ erhält man die auf der nächsten Seite gezeigten Kurven.

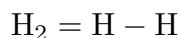
Es gibt also nur im Singulettzustand ein gebundenes Molekül. Als Gleichgewichtsabstand erhält man $r_0 \approx 1.51a_0$, die beiden Wasserstoffatome sind also relativ nahe beieinander. In qualitativer Weise kann das



Zustandekommen der Bindung als Folge des Pauliprinzips durch Betrachtung der Amplitude $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | \psi \rangle$ für $\mathbf{x} \approx \mathbf{y}$ verstanden werden. Für den Triplettzustand verschwindet die Amplitude, wenn sich die Elektronen am gleichen Ort aufhalten, gleiche Orte der Elektronen sind daher unwahrscheinlich. Im Singulettzustand sind hingegen gleiche Orte, was die Wahrscheinlichkeit betrifft, bevorzugt. Da beide Elektronen von beiden Kernen angezogen werden, ist diese Situation energetisch besonders günstig, wenn sich die Elektronen nahe beisammen zwischen den beiden Kernen befinden (trotz der gegenseitigen Abstoßung der Elektronen: um das einzusehen, muß man die Größenordnung von D und A betrachten) und damit die elektrische Abstoßung zwischen den Protonen abschirmen, sodaß diese in einigem Abstand beisammen bleiben können. Bei Verringerung des Abstandes zwischen den Protonen wird die Abstoßung der Protonen zu stark und die Energiekurve steigt wieder an. Im Triplettzustand kommt die für eine Bindung "günstige" Situation nie zustande, weil die Elektronen einander vermeiden. Quantitativ liefert die Störungstheorie ein etwas zu großes Resultat für r_0 (der Fehler beträgt ca. 8 %). Mit Hilfe von Variationsverfahren erhält man bessere Resultate.

Die im Wasserstoffmolekül realisierte Form der Valenzbindung ist als Folge des Pauliprinzips ein typisch quantenmechanischer Effekt. Sie tritt in sehr vielen komplizierteren Molekülen ebenfalls auf. Wesentlich

für diesen Bindungstyp sind zwei Elektronen, die bevorzugt zwischen den Bindungspartnern lokalisiert sind und damit gewissermaßen “zu beiden Partneratomen gehören”. Die Chemiker zeichnen dafür einen Valenzstrich, z.B.



Das Pauliprinzip äußert sich auch bei den Rotationsniveaus. Für diese muß beachtet werden, daß auch die Protonen ununterscheidbare Teilchen mit Spin $1/2$ (d.h. Fermionen) sind. Es gibt daher zwei Typen von Rotationsniveaus, und zwar Triplett-niveaus für parallele Spins der Protonen (Orthowasserstoff) und Singulett-niveaus für antiparallele Spins (Parawasserstoff). Die Triplettzustände sind bei Spinaustausch der Protonen symmetrisch und daher bei Ortsaustausch antisymmetrisch. Ihre Drehimpulsquantenzahl l muß daher ungerade sein. Entsprechend müssen die Singulettzustände gerade Werte von l haben. Da die Zahl der Zustände mit Spin 1 dreimal so groß wie die der Zustände mit Spin 0 ist, findet man im thermischen Gleichgewicht dreimal so viele Moleküle in Zuständen mit ungeradem l wie solche mit geradem l . Das Auftreten von Wasserstoff in zwei “Sorten” (allotrope Formen), die man an ihrem Rotationsspektrum unterscheiden kann, wird also (analog wie beim Helium) durch die Quantentheorie erklärt: es gibt nur **eine** Sorte von Wasserstoffmolekülen, aber jedes kann sowohl ein Triplett- als auch ein Singulett-spektrum haben.

8.4 Pauliprinzip und periodisches System

Die Quantentheorie kann in der bei den untersuchten Mehrkörperproblemen verwendeten Weise auch auf komplizierte Atome angewendet werden. Eine auch nur einigermaßen ins Detail gehende Behandlung kann hier nicht versucht werden. Es soll aber angedeutet werden, wie man das Zustandekommen der wesentlichen spektroskopischen und chemischen Eigenschaften der Elemente des periodischen Systems qualitativ und anschaulich verstehen kann. Diese Eigenschaften sind hauptsächlich durch die Struktur der niedrigsten Energiezustände bestimmt. Für diese kann man sich folgende grobe Näherung durchgeführt denken, die auch als Basis unserer Rechnungen für H_2 und He dienen. Wir berücksichtigen den Spin der Elektronen nur insofern, als wir das Pauliprinzip heranziehen, vernachlässigen aber alle spinabhängigen Kräfte: der Spin ist dann “angeklebtes Etikett”, jeder Zustand

kann nur von einem Elektron besetzt sein. Wir betrachten ferner die Elektronen - abgesehen vom Pauliprinzip - als unabhängig voneinander: jedes Elektron soll sich in einem Potential bewegen, das vom Kern und den übrigen Elektronen erzeugt wird. Quantitativ kann man das so durchführen, daß man als niedrigste Näherung für den Zustand das antisymmetrisierte Produkt der Einteilchenzustände ansetzt, wobei für die Ortsdarstellung der Einteilchenzustände wasserstoffähnliche Eigenfunktionen genommen werden (z.B. mit Z als Variationsparameter; die Variationsmethode liefert dann ein Z_{eff} für jedes Elektron). In der niedrigsten Näherung bewegt sich jedes Elektron dann in einem Zentralfeld und hat wasserstoffähnliche Niveaus, die durch n, l, m_l charakterisiert werden können.

Im Grundzustand werden dann die untersten Einteilchenzustände der Reihe nach mit Elektronen besetzt und das chemische Verhalten hängt davon ab, wie sich die Elektronen in den obersten Energieniveaus verhalten. Infolge des Pauliprinzips kommt es zu einer **Schalenstruktur**: ein Zustand mit festem n (d.h. im halbklassischen Bohrschen Bild: bestimmter Bahnradius) kann nur mit einer beschränkten Anzahl von Elektronen besetzt werden, die sich in l, m_l, m_s voneinander unterscheiden. Wegen der verhältnismäßig geringen Niveaufspaltung durch Unterschiede im Drehimpuls erfolgt die energetische Anordnung auch dann hauptsächlich nach n , wenn die hier betrachtete grobe Näherung korrigiert wird. Eine Schale ist **abgeschlossen**, wenn sie mit der für sie maximal möglichen Anzahl von Elektronen besetzt ist. Elektronen in abgeschlossenen Schalen bilden zusammen einen Atomrumpf. Sind Zustände außerhalb von abgeschlossenen Schalen mit Elektronen besetzt, so sind diese wesentlich schwächer gebunden als die Rumpfelektronen, weil die Kernladung durch die Rumpfelektronen abgeschirmt wird.

In der nebenstehenden Tabelle sind die in den einzelnen Zuständen enthaltenen Elektronen für die untersten 27 Elemente des periodischen Systems angegeben. Außerdem ist (als Maß für die Bindung) die Ionisierungsenergie E_I angeführt. Wir besprechen nun der Reihe nach die Auffüllung der untersten Schalen und einige damit zusammenhängende Trends.

Z	Element	$E_I(eV)$	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
1	H	13.6	1									
2	He	24.6	2									
3	Li	5.4	2	1								
4	Be	9.3	2	2								
5	B	8.3	2	2	1							
6	C	11.3	2	2	2							
7	N	14.5	2	2	3							
8	O	13.6	2	2	4							
9	F	17.4	2	2	5							
10	Ne	21.6	2	2	6							
11	Na	5.1	2	2	6	1						
12	Mg	7.6	2	2	6	2						
13	Al	6.0	2	2	6	2	1					
14	Si	8.1	2	2	6	2	2					
15	P	10.5	2	2	6	2	3					
16	S	10.4	2	2	6	2	4					
17	Cl	13.0	2	2	6	2	5					
18	Ar	15.8	2	2	6	2	6					
19	K	4.3	2	2	6	2	6		1			
20	Ca	6.1	2	2	6	2	6		2			
21	Sc	6.5	2	2	6	2	6	1	2			
22	Ti	6.8	2	2	6	2	6	2	2			
23	V	6.7	2	2	6	2	6	3	2			
24	Cr	6.8	2	2	6	2	6	5	1			
25	Mn	7.4	2	2	6	2	6	5	2			
26	Fe	7.9	2	2	6	2	6	6	2			
27	Co	7.9	2	2	6	2	6	7	2			

Auf der untersten Schale $n = 1$ haben nur 2 Elektronen Platz: $l = 0$, daher $m_l = 0$, es gibt daher nur die beiden Möglichkeiten $m_s = \pm 1/2$. Bei He ist diese Schale gefüllt; dieses Element verhält sich daher chemisch besonders inaktiv: es ist ein Edelgas.

Li hat ein Elektron mehr als He. Dieses Elektron muß daher in einem Zustand mit $n = 2$ "angesiedelt" werden. Das führt zu einer wasserstoffähnlichen Situation: ein Elektron befindet sich außerhalb einer abgeschlossenen Schale. Die in Frage kommenden Zustände

$2s, 2p$ für dieses Elektron hätten in Wasserstoff die gleiche Energie (l -Entartung!). Bei Li ist das nicht der Fall. Für den $2s$ -Zustand ist $l = 0$ und die Wahrscheinlichkeit, das Elektron nahe am Kern zu finden (Ortsdarstellung des Zustands) ist von Null verschieden. Das p -Elektron "spürt" daher nur das durch die inneren Elektronen abgeschirmte Feld $Z_{eff} = 1$, daher liegen die $2p$ -Zustände energetisch höher als der $2s$ -Zustand. Im $2s$ -Zustand haben wieder nur zwei Elektronen Platz ($l = 0, m_l = 0, m_s = \pm 1/2$). Er ist daher beim nächsten Element Be voll besetzt. Im nächsthöheren Zustand $2p$ haben 6 Elektronen Platz: $l = 1, m_l = +1, 0, -1, m_s = \pm 1/2$. Insgesamt ist also die zweite Schale erst mit 8 Elektronen voll besetzt, also bei Ne: dieses hat lauter abgeschlossene Schalen und ist daher ein Edelgas. Von B zu Ne wird die Ionisierungsenergie immer größer, da infolge der Zunahme von Z der $2p$ -Zustand immer weiter nach unten rückt.

Das nächste Element Na zeigt wieder eine wasserstoffähnliche Situation. Von diesem Element an wird die 3. Schale ($n = 3$) angefüllt, in der insgesamt 18 Elektronen Platz haben: zwei in $3s$ ($l = 0, m_l = 0, m_s = \pm 1/2$), sechs in $3p$ ($l = 1, m_l = +1, 0, -1, m_s = \pm 1/2$) und zehn in $3d$ ($l = 2, m_l = +2, +1, 0, -1, -2, m_s = \pm 1/2$). An der angegebenen Tabelle kann man sehen, wie die chemischen Eigenschaften mit der Auffüllung der Schalen zusammenhängen.

Einer Erklärung bedarf die Tatsache, daß das nächste Edelgas nach Ne schon bei Ar auftritt, für das die $3s$ - und $3p$ -Niveaus gefüllt und die $3d$ -Niveaus ganz leer sind. Bei den darauffolgenden Elementen K, Ca werden die $4s$ -Niveaus besetzt, obwohl die $3d$ -Niveaus noch unbesetzt sind. Der Grund dafür ist anschaulich zu verstehen: Für wachsendes Z rücken die Zustände mit höherem Bahndrehimpuls (bei festem n) infolge der Drehimpulsbarriere immer weiter nach oben, so daß der $3d$ -Zustand bei K ($Z = 19$) etwas höher liegt als der $4s$ -Zustand. Daher wird der letztere zuerst besetzt und erst, wenn er voll besetzt ist (was bei Ca der Fall ist), wird $3d$ aufgefüllt.

Ein feinerer Effekt, der mit Hilfe des Pauliprinzip qualitativ verstanden werden kann, ist die Abnahme der Ionisierungsenergie von N nach O bzw. von P nach S. Dazu denken wir uns die p -Schale von unten an aufgefüllt. Das erste Elektron in dieser Schale (bei B bzw. Al) hat 6 Möglichkeiten für die magnetischen Quantenzahlen: $m_l = +1, 0, -1$ und $m_s = \pm 1/2$. Nehmen wir z.B. an, daß $m_l = 0, m_s = +1/2$ ist. Dann hat das nächste Elektron (C bzw. Si) die niedrigste elektrostatische Ener-

gie, wenn es das bereits vorhandene vermeidet. Das ist der Fall, wenn die Ortsfunktion antisymmetrisch ist. Dann ist aber die Spinfunktion symmetrisch und es ist für das zweite Elektron ebenfalls $m_s = +1/2$. Daher muß m_l einen anderen Wert als für das erste Elektron haben, also z.B. $m_l = +1$ (oder eine Mischung aus $+1$ und -1). Beim dritten Elektron (N bzw. P) wird der dritte Wert ausgeschöpft. Das vierte Elektron muß dann $m_s = -1/2$ haben. Seine Ortsfunktion ist dann relativ zu einem der anderen Elektronen symmetrisch, es ist im Mittel öfter mit einem dieser Elektronen korreliert und infolge der elektrischen Abstoßung leichter zu entfernen.

8.5 Die Besetzungzahldarstellung

Die in 8.1 untersuchten Zustände von n ununterscheidbaren, freien Teilchen sind als Basiszustände für das Mehrkörperproblem der Quantentheorie von ähnlicher Bedeutung, wie die Orts- oder Impulszustände für ein Teilchen: sie können dazu verwendet werden, den Zustand wechselwirkender Systeme zu analysieren. Wir untersuchen nun einen Formalismus, der diese Aufgabe erheblich erleichtert. Er wurde 1927 von Dirac für Bosonen entwickelt. Ein Jahr später erfolgte die Übertragung auf Fermionsysteme durch Jordan und Wigner. In gewissem Sinn kann der Formalismus als eine "zweite Quantisierung" angesehen werden, bei der Einteilchenwellenfunktionen durch Operatoren ersetzt werden. Bei genauer Betrachtung stellt sich heraus, daß der Formalismus als ("erste") Quantisierung einer (nichtrelativistischen) **Feld**theorie aufzufassen ist.

Wir entwickeln den Formalismus zunächst für **Bosonen** und gehen von den in 8.1 untersuchten symmetrischen Zuständen für n freie Teilchen aus. Wie dort bemerkt wurde, ist es für diese Zustände nicht möglich zu sagen, welchem der Teilchen eine durch bestimmte Quantenzahlen vorgegebene Eigenschaft zukommt. Hingegen ist es sehr wesentlich, ob sich mehrere Teilchen im gleichen Zustand befinden bzw. wieviele das sind. Es muß daher möglich sein, den Zustand durch Angabe der Besetzungszahlen für die in Frage kommenden Eigenschaften zu charakterisieren. Wir bezeichnen die zugehörige Besetzungszahl mit $n_j := n(q_j)$. Damit soll also die Zahl der Teilchen mit der Einteilcheneigenschaft (Quantenzahl(en)) q_j gemeint sein. Diese Besetzungszahlen kann man in eindeutiger Weise finden. Betrachten wir als Beispiel den

Dreiteilchenzustand

$$|q_2, q_2, q_6\rangle_S.$$

Die Besetzungszahlen sind dann

$$n_1 = 0, n_2 = 2, n_3 = n_4 = n_5 = 0, n_6 = 1, n_7 = n_8 = \dots = 0.$$

Für den Zustand

$$|q_a, q_b, \dots, q_g\rangle_S$$

erhält man sie aus

$$q_a + q_b + \dots + q_g = n_1 q_1 + n_2 q_2 + \dots$$

Für n Teilchen ist natürlich

$$n = \sum_j n_j$$

Im allgemeinen gibt es sehr viele Besetzungszahlen. Kann die Quantenzahl q_j unendlich viele Werte annehmen, so gibt es auch unendlich viele Besetzungszahlen (von denen die meisten den Wert 0 haben). Jede Besetzungszahl kann Werte zwischen 0 und n annehmen $n_j = 0, 1, \dots, n$ (ein höherer Wert ist nicht möglich, da es nur n Teilchen gibt).

Da die Zustände $|q_a, q_b, \dots, q_g\rangle_S$ durch die Besetzungszahlen n_j festgelegt sind, muß es einen Satz miteinander vertauschbarer Operatoren N_j geben, deren Eigenwerte die n_j und deren Eigenzustände die Zustände $|q_a, q_b, \dots, q_g\rangle_S$ sind. Deren Charakterisierung durch Angabe aller n_j ist eindeutig: zu jedem Satz von Werten für alle n_j gibt es nur einen Zustand. Mit den Eigenwerten der N_j erfaßt man daher alle Zustände; das System der N_j ist daher ein vollständiges System vertauschbarer Operatoren. Wir können daher

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = |q_a, q_b, \dots, q_g\rangle_S \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}$$

setzen (der Faktor auf der rechten Seite berücksichtigt die Normierung für Besetzungszahlen > 1) und von nun an mit diesen Zuständen arbeiten. Als Vollständigkeitsrelation in der Besetzungszahldarstellung notieren wir

$$(\mathbf{1})_n = \sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots|$$

Die Summe läuft über alle Zustände mit festem n . Lassen wir nun n der Reihe nach alle ganzzahligen Werte annehmen, so erhalten wir $n = 0$, Vakuumzustand: $|0\rangle := |0, 0, \dots, 0\rangle$

$n = 1$, Einteilchenzustände: $|0, \dots, 0, (n_j = 1), 0, \dots, 0\rangle = |q_j\rangle$

$n = 2$, Zweiteilchenzustände:

$$|0 \dots 0, (n_j = 1), 0 \dots 0, (n_k = 1), 0 \dots 0\rangle = |q_j, q_k\rangle_S$$

$$|0 \dots 0, (n_k = 2), 0 \dots 0\rangle = |q_k, q_k\rangle_S \frac{1}{\sqrt{2}}$$

usw. Dieser Zustandsraum heißt Fockraum.

Die Charakterisierung der Zustände durch sehr viele n_j , von denen die meisten verschwinden, mag unpraktisch erscheinen. Sie zeigt aber sofort, wie man weiterkommen kann. Untersucht man ein System von ungekoppelten harmonischen Oszillatoren, so erhält man die gleichen Zustände. Die Zahlen n_j bedeuten in diesem Fall die Eigenwerte von Anzahloperatoren N_j und geben an, wieviele Oszillatorquanten der Sorte j im betreffenden Zustand vorhanden sind. Unsere n -Teilchenzustände sind also isomorph zu den Zuständen eines Oszillatorsystems (mit **sehr** vielen Oszillatoren: für jeden Eigenwert q_j ein Oszillator). Es ist daher bequem, den Oszillatorformalismus (vgl. 5.2) zu verwenden. Wir setzen

$$N_j = a_j^\dagger a_j$$

und verlangen für $a_j := a(q_j)$ die algebraischen Regeln

$$[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad [a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = 0.$$

Die Fockzustände können dann aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ durch Anwendung von a_j^\dagger aufgebaut werden

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \frac{1}{\sqrt{(n_1)!(n_2)! \dots}}.$$

Der Operator der **gesamten** Teilchenzahl

$$N = \sum_j N_j$$

hat als Eigenwert die Zahl n der vorhandenen Teilchen. Ein Erzeugungsoperator a_j^\dagger fügt zu einem Zustand mit n ununterscheidbaren Bosonen ein weiteres Boson im Einteilchenzustand $|q_j\rangle$ so hinzu, daß es von den übrigen Bosonen ununterscheidbar ist (so, daß also der $n + 1$ -Teilchenzustand in den Einteilchenvariablen symmetrisiert ist). Entsprechend entfernt a_j ein Boson aus dem n -Teilchenzustand.

Der damit erhaltene Formalismus hat als algebraischer Kalkül große Vorteile. Der wichtigste ist die Unabhängigkeit von der benützten Darstellung der Einteilchenzustände. Um das einzusehen, beachten wir, daß sich alle betrachteten Operatoren auf eine bestimmte Darstellung $|q_j\rangle$ beziehen

$$a_j = a(q_j), \quad a_j^\dagger = a^\dagger(q_j), \quad N_j = N(q_j).$$

Welcheln wir die Darstellung im Einteilchenraum, so transformiert sich der Basiszustand $|q_j\rangle$ in

$$|\xi_i\rangle = \sum_j |q_j\rangle \langle q_j | \xi_i\rangle$$

Der Buchstabe ξ deutet dabei an, daß die Eigenwerte ξ_i solche eines **anderen** Operators (bzw. Satzes von vertauschbaren Operatoren) sind. Aus diesen Einteilchenzuständen kann man wie oben einen Fockraum für ununterscheidbare Teilchen aufbauen

$$n = 0 : |0\rangle, n = 1 : |\xi_i\rangle, n = 2 : |\xi_i, \xi_j\rangle_S, |\xi_i, \xi_i\rangle_S / \sqrt{2} \quad \text{usw.}$$

Bei Charakterisierung durch Besetzungszahlen erhält man wieder Isomorphie zu einem Oszillatorsystem mit den Operatoren

$$a_i = a(\xi_i), \quad a_i^\dagger = a^\dagger(\xi_i), \quad N_i = N(\xi_i),$$

die den gleichen Vertauschungsrelationen genügen wie die ursprünglichen. An den Einteilchenzuständen läßt sich ablesen, daß

$$a^\dagger(\xi_i) = \sum_j a^\dagger(q_j) \langle q_j | \xi_i\rangle, \quad a(\xi_i) = \sum_j \langle \xi_i | q_j\rangle a(q_j)$$

ist. Damit kann man z.B. die Vertauschungsrelation der neuen Operatoren $a(\xi_i)$ auf die der alten $a(q_j)$ zurückführen und umgekehrt. Die Anzahloperatoren transformieren sich als Produkte. Durch Einsetzen erhält man

$$N(\xi_i) = \sum_{j,k} a^\dagger(q_j) a(q_k) \langle q_j | \xi_i \rangle \langle \xi_i | q_k \rangle.$$

Der Operator der **gesamten** Teilchenzahl ist invariant

$$\begin{aligned} N &= \sum_i N(\xi_i) = \sum_{j,k} a^\dagger(q_j) a(q_k) \sum_i \langle q_j | \xi_i \rangle \langle \xi_i | q_k \rangle = \\ &= \sum_{j,k} a^\dagger(q_j) a(q_k) \langle q_j | q_k \rangle = \sum_j N(q_j) \end{aligned}$$

Als Voraussetzung geht in die ganze Theorie nur ein, daß die Einteilchenzustände orthogonal und vollständig sind.

Bei Basiswechsel transformiert sich daher $a^\dagger(\cdot)$ wie ein Basisvektor $|\cdot\rangle$ (und damit wie eine Amplitude $\langle \psi | \cdot \rangle$, durch die ein beliebiger Einteilchenzustand $|\psi\rangle$) dargestellt wird). $a(\cdot)$ transformiert sich wie ein Basisbra $\langle \cdot |$ (und daher wie die konjugierte Amplitude $\langle \cdot | \psi \rangle$). Man kann daher die Operatoren der Mehrteilchentheorie erhalten, indem man formal die Einteilchenamplituden $\langle \cdot | \psi \rangle$ durch Operatoren $a(\cdot)$ ersetzt und für diese die Vertauschungsrelationen von Oszillatoroperatoren postuliert ("zweite Quantisierung"). Mit den Operatoren der "zweiten Quantisierung" baut man dann den Fockraum der Mehrteilchentheorie aus dem Vakuum auf. Der Formalismus ermöglicht daher für eine beliebige vorgegebene Einteilchenbasis (die nur orthogonal und vollständig sein muß) die Konstruktion eines Zustandsraums für beliebig viele ununterscheidbare (freie) Teilchen. Daß es sich "in Wirklichkeit" um eine Theorie handelt, bei der "nur einmal quantisiert" wird, ist klar, wenn man sich an die Fassung mit (symmetrisierten) Mehrteilchenzuständen erinnert. Auf die quantenfeldtheoretischen Aspekte kommen wir im nächsten Abschnitt zurück.

Eine Besetzungzahldarstellung für **Fermionen** kann in analoger Weise entwickelt werden. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß alle Besetzungszahlen n_j wegen des Pauliprinzips nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Mit Oszillatoroperatoren erhält man die Darstellung, wenn in den algebraischen Regeln den Kommutator $[A, B] := AB - BA$ durch den Antikommutator $[A, B]_+ := AB + BA$ ersetzt, also die Regeln

$$[a_j, a_k^\dagger]_+ = \delta_{jk}, [a_j, a_k]_+ = [a_j^\dagger, a_k^\dagger]_+ = 0$$

postuliert. Man kann sich mit der folgenden Überlegung davon überzeugen, daß diese Algebra zu den gewünschten Eigenschaften der Zustände

führt. Wir betrachten zunächst einen Zustand, bei dem die j -te Besetzungszahl verschwindet

$$|\dots(n_j = 0)\dots\rangle$$

und fügen ein Teilchen in diesem Zustand hinzu:

$$|\dots(n_j = 1)\rangle = a_j^\dagger |\dots(n_j = 0)\dots\rangle$$

Fügt man noch ein Teilchen in diesem Zustand hinzu, so darf es den entstehenden Zustand nicht geben (andernfalls wären zwei ununterscheidbare Fermionen im gleichen Zustand): es muß ihm also die Null im Zustandsraum entsprechen

$$\begin{aligned} 0 &= a_j^\dagger |\dots(n_j = 1)\dots\rangle = a_j^\dagger a_j^\dagger |\dots(n_j = 0)\dots\rangle = \\ &= \frac{1}{2} (a_j^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_j^\dagger) |\dots(n_j = 0)\dots\rangle \end{aligned}$$

Für

$$[a_j^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0$$

ist die Gleichung offenbar erfüllt. Durch Konjugation erhält man daraus

$$[a_j, a_j]_+ = 0$$

Um die verbleibenden Relationen zu testen, betrachten wir den Anzahloperator

$$N_j = a_j^\dagger a_j.$$

Für seinen Kommutator mit a_k^\dagger erhalten wir (wie bei Bosonen)

$$\begin{aligned} [N_j, a_k^\dagger] &= a_j^\dagger a_j a_k^\dagger - a_k^\dagger a_j^\dagger a_j = a_j^\dagger ([a_j, a_k^\dagger]_+ - a_k^\dagger a_j) - a_k^\dagger a_j^\dagger a_j \\ &= a_j^\dagger \delta_{jk} - (a_j^\dagger a_k^\dagger + a_k^\dagger a_j^\dagger) a_j \\ &= a_j^\dagger \delta_{jk} \end{aligned}$$

und das gibt die richtige Eigenwertgleichung für beide Eigenzustände $|\dots(n_j = 1)\dots\rangle$ und $|\dots(n_j = 0)\dots\rangle$. Für $[a_j^\dagger, a_k^\dagger]_+ \neq 0$ wäre sie nicht erfüllt.

Übungen

Für die folgenden Beispiele sind n freie Teilchen in einem großen Würfel mit festem Volumen V zu betrachten, und zwar Bosonen mit Spin 0 bzw. Fermionen mit Spin 1/2. Als Einteilchenvariable sind Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ (mit diskreten Werten für \mathbf{k}) und Spin zu verwenden, also

für Bosonen: $a = a(\mathbf{k}), [a(\mathbf{k}), a^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$

für Fermionen: $a = a_\alpha(\mathbf{k}), [a_\alpha(\mathbf{k}), a_\beta^\dagger(\mathbf{k}')]_+ = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \alpha = 1, 2 = \uparrow, \downarrow$.

- 1) Bestimme den Grundzustand $|\phi\rangle$ eines wechselwirkungsfreien Bosegases (n Bosonen im Volumen V , s.o.). Welche Energie hat er? Bestimme die Erwartungswerte

$$\langle \phi | a^\dagger(\mathbf{x}) a(\mathbf{y}) | \phi \rangle \quad \text{und} \quad \langle \phi | a^\dagger(\mathbf{x}) a(\mathbf{x}) a^\dagger(\mathbf{y}) a(\mathbf{y}) | \phi \rangle$$

Dabei ist

$$a(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$$

- 2) Betrachte die Transformation (vgl. Übungsbeispiel 5.4)

$$a(\mathbf{k}) = u(k)A(\mathbf{k}) + v(k)A^\dagger(-\mathbf{k}), \quad k = |\mathbf{k}|.$$

Wie müssen die Funktionen u, v gewählt werden, damit die Transformation kanonisch ist?

- 3) Bestimme den Grundzustand $|F\rangle$ eines wechselwirkungsfreien Elektronengases (n freie Fermionen mit Spin 1/2 im Volumen V , s.o.). Zeige, daß es einen höchsten Wert für $k = |\mathbf{k}|$ gibt ($k \leq k_F$). Bestimme den Eigenwert des Anzahloperators

$$N_\alpha(\mathbf{k}) = a_\alpha^\dagger(\mathbf{k}) a_\alpha(\mathbf{k})$$

und der gesamten Teilchenzahl

$$N = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} N_\alpha(\mathbf{k}).$$

Bestimme durch Übergang zum Kontinuum

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

k_F bzw. die Fermienenergie $\varepsilon_F = (\hbar k_F)^2 / 2m$ in Termen der Teilchenkonzentration n/V . Bestimme in analoger Weise die Energie des Grundzustands $|F\rangle$ in Termen von ε_F .

- 4) Untersuche für das Elektronengas des vorhergehenden Beispiels die Erwartungswerte

$$\langle F | a_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) a_\beta(\mathbf{y}) | F \rangle$$

(Fouriertransformation vgl. Beispiel 1) und

$$\langle F | a_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) a_\alpha(\mathbf{x}) a_\beta^\dagger(\mathbf{y}) a_\beta(\mathbf{y}) | F \rangle$$

Dabei soll wie im vorhergehenden Beispiel zum Kontinuum übergegangen werden. Untersuche die Größen als Funktionen des Abstands $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$.

- 5) Der Grundzustand $|F\rangle$ des freien Elektronengases entspricht wegen $k < k_F$ einer Situation, in der alle Impulszustände bis $|\mathbf{k}| = k_F$ mit je 2 Elektronen besetzt und alle anderen Impulszustände unbesetzt sind (“gefüllte Fermikugel”). Der Hamiltonoperator kann in der Form

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \varepsilon(k) N_\alpha(\mathbf{k}) \quad \text{mit } \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

geschrieben werden. Wie sehen im Bild der “Fermikugel” die untersten Anregungszustände aus? Betrachte die kanonische Transformation

$$\begin{aligned} a_\uparrow(\mathbf{k}) &= u(k)A(\mathbf{k}) + v(k)B^\dagger(\mathbf{k}), & u(k) &= \theta(k - k_F) \\ a_\downarrow(-\mathbf{k}) &= u(k)B(\mathbf{k}) - v(k)A^\dagger(\mathbf{k}), & v(k) &= \theta(k_F - k) \end{aligned}$$

(vgl. Übungsbeispiel 5.4) und interpretiere die Bedeutung der neuen Leiteroperatoren $A, A^\dagger, B, B^\dagger$.

8.6 Mehrteilchenoperatoren

Nun wollen wir für die Mehrteilchenphysik wichtige Operatoren betrachten und versuchen, sie als Operatoren im Fockraum darzustellen. Dadurch werden wir die Möglichkeit erhalten, eine Theorie wechselwirkender Teilchen zu formulieren. Wir betrachten zunächst Einteilchenoperatoren. Damit sind Operatoren gemeint, die additiv aus Beiträgen jedes Teilchens in folgender Form aufgebaut sind:

$$F_{\text{ges}} = \sum_{\lambda=1}^n {}_1F^{(\lambda)} = {}_1F^{(1)} \oplus {}_1F^{(2)} \oplus \dots \oplus {}_1F^{(n)}$$

Jeder Summand ist dabei ein Operator, der sich nur auf den Einteilchen-Zustandsraum des Teilchens Nr. λ bezieht (die vorgesetzte ${}_1$ soll nur andeuten, daß es sich um einen Operator im Raum der Einteilchen-zustände handelt). Beispiele: der gesamte Impuls des n -Teilchensystems

$$\mathbf{P}_{\text{ges}} = \sum_{\lambda=1}^n \mathbf{P}^{(\lambda)},$$

die gesamte kinetische Energie

$$T_{\text{ges}} = \frac{1}{2m} \sum_{\lambda} \mathbf{P}^{(\lambda)2}$$

usw. Durch

$$\rho_{\text{ges}}(\mathbf{X}) = \sum_{\lambda} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}^{(\lambda)})$$

kann man eine sog. "Einteilchendichte" einführen, die Auskunft über die Verteilung der von den Teilchen transportierten Eigenschaften gibt: $m\rho_{\text{ges}}$ ist die Massendichte, haben die Teilchen die Ladung q , so ist $q\rho_{\text{ges}}$ die Ladungsdichte.

Die Übersetzung in die Besetzungszahldarstellung ist einfach. Offenbar ist jeder Einteilchenoperator bezüglich aller Teilchen symmetrisch: eine Permutation von Teilchen bewirkt nur eine Änderung der Reihenfolge der Summanden. Schreiben wir die Fockzustände in der ursprünglichen Form als direkte Produkte von Einteilchenzuständen (Abschnitt 8.1, S. 258), so wirkt jeder Summand in F nur auf einen der Faktoren. Er kann daher durch Einteilchenmatrixelemente dargestellt werden

$${}_1F = \sum_{i,j} |q_i\rangle \langle q_i| {}_1F |q_j\rangle \langle q_j|$$

(andere Matrixelemente hat $F_{(1)}$ nicht). In Anwendung auf einen (als direktes Produkt geschriebenen) Mehrteilchenket entfernt $\langle q_j|$ einen zugehörigen Faktor $|q_j\rangle$; infolge des Faktors $|q_i\rangle$ wird er durch $|q_i\rangle$ ersetzt. Im Raum der Besetzungszahlen heißt das, daß ein Teilchen im Zustand $|q_j\rangle$ entfernt und eines im Zustand $|q_i\rangle$ hinzugefügt wird: das wird aber vom Produkt $a_i^\dagger a_j$ geleistet. Daher lautet die Darstellung von F_{ges} im Besetzungszahlraum

$$F_{\text{ges}} = \sum_{i,j} a_i^\dagger \langle q_i| {}_1F |q_j\rangle a_j.$$

Man kann sich davon überzeugen, daß diese Form von der benützten Darstellung der Einteilchenzustände unabhängig ist.

Als nächstes betrachten wir Zweiteilchenoperatoren. Damit sind Operatoren gemeint, die additiv aus Beiträgen jedes Teilchens in folgender Form aufgebaut sind:

$$G_{\text{ges}} = \sum_{\lambda > \nu}^n {}_2G^{(\lambda, \nu)}$$

Jeder Summand soll sich dabei nur auf den Zustandsraum von zwei Teilchen (Nr. λ und Nr. ν) beziehen. Das wichtigste Beispiel dafür sind Wechselwirkungspotentiale für Paarkräfte

$$V_{\text{ges}} = \sum_{\lambda > \nu} V(\mathbf{X}^{(\lambda)}, \mathbf{X}^{(\nu)})$$

(wie z.B. die Coulombwechselwirkung). Die Darstellung im Besetzungszahlraum ist analog wie für Einteilchenoperatoren zu finden und lautet für Bosonen

$$G_{\text{ges}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} a_i^\dagger a_j^\dagger \cdot {}_S \langle q_i, q_j | {}_2G | q_k, q_l \rangle {}_S \cdot a_k a_l.$$

Für Fermionen ist ${}_S$ durch ${}_A$ zu ersetzen.

Mit Hilfe der Oszillatoroperatoren können daher die physikalisch relevanten Operatoren jeder Mehrteilchentheorie so geschrieben werden, daß die Fockzustände den Charakter von Basiszuständen haben. Dabei werden auch Operatoren erfaßt, welche die Wechselwirkung zwischen den Teilchen beschreiben. Wesentlich ist für den Formalismus, daß die Basiszustände vollständig sind.

8.7 Bewegungsgleichungen

Die Umschreibung physikalischer Operatoren in die Besetzungszahldarstellung reicht aus, um zu einer Dynamik wechselwirkender Teilchen zu gelangen. Wir beschränken uns dabei auf einen Hamiltonoperator mit Ein- und Zweiteilchenpotentialen

$$H = \sum_{\lambda} \left(\frac{1}{2m} \mathbf{P}^{(\lambda)2} + {}_1V(\mathbf{X}^{(\lambda)}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \nu} {}_2V(\mathbf{X}^{(\lambda)}, \mathbf{X}^{(\nu)})$$

Es soll also nur Paarkräfte zwischen den Teilchen geben. Das reicht für die meisten Anwendungen aus (eine Verallgemeinerung auf Mehrteilchenkräfte wäre natürlich möglich). Im Schrödingerbild ist die dynamische Gleichung für einen n -Teilchenzustand

$$i\hbar \frac{d}{dt} |n, \Psi_s(t)\rangle = H |n, \Psi_s(t)\rangle$$

In der Besetzungszahldarstellung bedeutet das

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle n_1, n_2, \dots | n, \Psi_s(t)\rangle = \langle n_1, n_2, \dots | H | n, \Psi_s(t)\rangle$$

mit

$$\langle n_1, n_2, \dots | = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \langle 0 | (a_1)^{n_1} (a_2)^{n_2} \dots$$

Dabei beziehen sich die Fockzustände und die Oszillatoroperatoren auf das Schrödingerbild

$$|0\rangle \equiv |0_s\rangle, a_j \equiv (a_j)_s.$$

Schreibt man H in Termen der a_j, a_j^\dagger um, so läßt sich durch Anwendung der Operatoren nach links ein gekoppeltes Gleichungssystem für die Amplituden erhalten. Hängt H nicht explizit von der Zeit ab, so gilt das alles mutatis mutandis für die entsprechende Eigenwertgleichung von H . Man kann das Eigenwertproblem z.B. algebraisch angehen, indem man H in der Besetzungszahldarstellung zu diagonalisieren versucht (was meist nur näherungsweise möglich ist; vgl. Übungen).

Im Heisenbergbild läßt sich die ganze Dynamik als reine Operatortheorie der Leiteroperatoren fassen: Durch Übergang zum Heisenbergbild (vgl. 4.5)

$$\begin{aligned} |n, \Psi_s(t)\rangle &= U(t, t_0) |n, \Psi_h(t_0)\rangle \\ a_j(t) &:= (a_j)_h = U^{-1}(t, t_0) (a_j)_s U(t, t_0) \end{aligned}$$

erhalten wir

$$\langle n_1, n_2, \dots | n; \Psi_s(t) \rangle = \langle 0_h | (a_1(t))^{n_1} (a_2(t))^{n_2} \dots | n, \Psi_h(t_0) \rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}$$

(wie zu erwarten war: Amplituden hängen vom benützten Bild nicht ab). Auch die Vertauschungsrelationen ändern sich bei der Transformation nicht

$$\begin{aligned} [a_j(t), a_k(t)]_{\mp} &= U^{-1} a_j U U^{-1} a_k U \mp U^{-1} a_k U U^{-1} a_j U \\ &= U^{-1} \delta_{jk} U = \delta_{jk} \end{aligned}$$

Das gilt aber nur für Heisenbergoperatoren zu gleichen Zeiten; andernfalls fällt $U U^{-1}$ nicht weg. Die physikalischen Operatoren können sofort auf das Heisenbergbild umgeschrieben werden. Die entsprechende Form entsteht einfach dadurch, daß man alle $a_j = (a_j)_s$ durch $a_j(t)$ ersetzt. Die ganze Dynamik ist daher in den Heisenberg-Bewegungsgleichungen

$$i\hbar \frac{da_j(t)}{dt} = [a_j(t), H]$$

enthalten. Da H durch Produkte von a_j, a_j^\dagger ausgedrückt werden kann, ist der Kommutator einfach auszurechnen. Für den am Anfang dieses Abschnitts angegebenen Hamiltonoperator erhält man für Bosonen

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_j(t)}{dt} &= \sum_i \langle q_j | \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + {}_1V | q_i \rangle a_i(t) + \\ &+ \sum_{ikl} {}_S \langle q_j q_i | {}_2V | q_k, q_l \rangle {}_S \cdot a_i^\dagger(t) a_k(t) a_l(t) \end{aligned}$$

(analog für Fermionen mit ${}_A$ anstelle von ${}_S$).

Die Zahl der betrachteten Teilchen kommt in diesen Gleichungen nicht mehr vor. Zusammen mit den Vertauschungsrelationen können sie als Theorie eines Systems mit beliebig vielen ununterscheidbaren Teilchen mit der in H enthaltenen Wechselwirkung aufgefaßt werden. Wir zeigen nun, daß (und in welchem Sinn) es sich um die Quantentheorie eines Feldes handelt. Dazu betrachten wir eine Charakterisierung jedes Teilchens durch Ort und Spin

$$(q_j) = (\mathbf{x}, \alpha), \quad a_j(t) = a_\alpha(\mathbf{x}, t).$$

Für Spin s nimmt dabei der Spinindex α Werte von 1 bis $2s + 1$ an. Der Operator $a_\alpha(\mathbf{x}, t)$ genügt den Vertauschungsrelationen

$$\left[a_\alpha(\mathbf{x}, t), a_\beta^\dagger(\mathbf{y}, t) \right]_{\mp} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{1}$$

und beschreibt als Funktion seiner Argumente (\mathbf{x}, t) ein quantenmechanisches Feld (das elektrische Feld $E_k(\mathbf{x}, t)$ der Elektrodynamik wäre ein klassisches Analogon - allerdings ein solches mit einer ganz anderen Dynamik). Für Spin 0 entsteht der Feldoperator $a(\mathbf{x}, t)$ durch "zweite Quantisierung" aus der Einteilchenwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle$, d.h. die Wellenfunktion wird durch einen Operator ersetzt, für den die obenstehenden Vertauschungsrelationen postuliert werden. Die Dynamik wird durch den (in Termen von a und a^\dagger geschriebenen) Hamiltonoperator festgelegt (der ebenfalls aus der Einteilchentheorie "bezogen" werden kann). Natürlich kann die so erhaltene Quantenfeldtheorie mit gleichem Recht als "erstquantisierte" Theorie eines Schrödingerfeldes $a(\mathbf{x}, t)$ angesehen werden. Um sie als **kanonische** Quantentheorie eines Feldes zu etablieren, (d.h. um zu erkennen, welche Größen als generalisierte "Koordinaten" bzw. "Impulse" des Feldes aufzufassen sind), muß man die Theorie von Oszillatorvariablen (a, a^\dagger) auf die zugehörigen (q, p) -Variablen umschreiben, was wir hier nicht tun wollen. Für Spin $\neq 0$ funktioniert das alles ganz analog, das Feld hat lediglich mehr Komponenten. Für halbzahligen Spin muß man allerdings "damit leben", daß es kein klassisches Gegenstück im üblichen Sinn des Wortes gibt. Für Bosonen erhält man die klassische Theorie dadurch, daß alle Feldvariablen (also auch a und a^\dagger) vertauschbar angenommen werden. Für Fermionen ist das entsprechende Analogon eine Theorie mit **antikommütierenden** Feldvariablen. Eine solche ist zwar mathematisch durchaus durchführbar, aber sie ist keine klassische Feldtheorie.

8.8 Quasiteilchen

In der Theorie der kondensierten Materie wird der hier untersuchte Formalismus auch auf Zustände angewandt, die nicht als Teilchen im gewöhnlichen Sinn des Wortes anzusehen sind, sondern als geeignete niedrig liegende Anregungszustände (dabei kann es sich z.B. um kollektive Anregungen des ganzen Systems handeln). Ein gemeinsames Wort dafür ist Quasiteilchen oder -onen (Phononen, Exzitonen, Magnonen usw.). Um eine Theorie solcher Anregungszustände zu erhalten, sucht man zunächst einen Ausgangs-Hamiltonoperator, der die Einteilchenform hat

$$H^{(0)} = E_0 \mathbf{1} + \sum_j \varepsilon_j a_j^\dagger a_j.$$

Dabei beschreibt E_0 den Grundzustand. Die Einteilchenenergie ε_j und die zugehörigen Oszillatoroperatoren werden so bestimmt, daß man die als wichtig erkannten niedrigsten Anregungen des Systems mit dem Einteilchenterm schon in guter Näherung erfaßt. Als Darstellung verwendet man meist die Impulsdarstellung

$$a_j = a(q_j) = a(k), \quad \varepsilon_j = \varepsilon(k), \quad \sum_j = \sum_{\mathbf{k}}$$

Für ein "echtes" Boson wäre $\varepsilon(k) = (\hbar k)^2/2m$. Für Quasiteilchen sind ganz andere Formen möglich (für Phononen ist z.B. $\varepsilon(k) \sim k$). Über die durch $H^{(0)}$ beschriebene niedrigste Näherung kann man dann hinauskommen, indem man einen Wechselwirkungsterm

$$H^{(1)} = \sum_{ijkl} V(ij|kl) a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l$$

dazunimmt, wobei V aus dem betrachteten physikalischen Zusammenhang "erraten" wird. Mit dieser Idee ist es gelungen, eine ganze Reihe von Vielteilchenphänomenen in zufriedenstellender Weise zu beschreiben. Im Rahmen einer einführenden Darstellung kann auf die Vielfalt der Anwendungen leider nicht eingegangen werden.

Übungen

Die folgenden Übungsaufgaben sind für Bosonen mit Spin 0 bzw. Fermionen mit Spin 1/2 (vgl. Aufgaben 1-5) durchzuführen.

6) Berechne die Kommutatoren

$$\begin{aligned} & [\mathbf{P}_{\text{ges}}, a(\mathbf{x})] \\ & [(P_{\text{ges}})_k, [(P_{\text{ges}})_l, a(\mathbf{x})]] \\ & [\mathbf{P}_{\text{ges}}^2, a(\mathbf{x})] \end{aligned}$$

7) Drücke die Operatoren

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{\text{ges}} &= \sum_{\lambda} \left(\mathbf{X}^{(\lambda)} \times \mathbf{P}^{(\lambda)} \right) \\ \mathbf{S}_{\text{ges}} &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda} \boldsymbol{\sigma}^{(\lambda)} \end{aligned}$$

durch a, a^\dagger aus. Berechne die Kommutatoren mit a .

8) Drücke den Operator

$$\mathbf{R}_{\text{ges}} = \sum_{\lambda} \mathbf{X}^{(\lambda)}$$

durch a, a^\dagger aus. Wie ist er physikalisch zu interpretieren?

9) Drücke das Coulombpotential zwischen zwei Elektronen durch $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$ aus, und zwar in der Impuls- und Ortsdarstellung. Finde eine Zerlegung in einen "direkten" und einen "Austauschterm" (vgl. Abschnitt 8.2).

10) Betrachte Fermiteilchen mit Spin 1/2 in einem Volumen V und untersuche die Operatoren

$$\begin{aligned} s_+(\mathbf{k}) &= a_1^\dagger(\mathbf{k})a_2^\dagger(-\mathbf{k}), \quad s_-(\mathbf{k}) = a_2(-\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) \\ s_3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left(a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(-\mathbf{k})a_2(-\mathbf{k}) - \mathbf{1} \right). \end{aligned}$$

Welche Vertauschungsrelationen erfüllen sie bzw. die daraus gebildeten Operatoren

$$S_{\pm} = \sum_{\mathbf{k}} s_{\pm}(\mathbf{k}), \quad S_3 = \sum_{\mathbf{k}} s_3(\mathbf{k})$$

(die Summen sollen dabei bis zu einem Maximalwert \mathbf{K} laufen). Vgl. Abschnitt 5.3! Bestimme mit Hilfe der erhaltenen algebraischen Regeln den Grundzustand von

$$H = \varepsilon \sum_{\mathbf{k}} (a_1^\dagger(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + a_2^\dagger(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k})) - \\ - W \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_1^\dagger(\mathbf{k})a_2^\dagger(-\mathbf{k})a_2(-\mathbf{k}')a_1(\mathbf{k}')$$

(dabei sind ε und W Konstanten). Diskutiere die Entartung des Grundzustands.

Der hier betrachtete Hamiltonoperator ist (u.a.) ein Modell für die Theorie der Supraleitung. Es ist nützlich zu überlegen, welche Beiträge zur Ein- und Zweiteilchenenergie in H mitgenommen wurden.

A1 Quantenmechanik des Coulombproblems

A1.1 Gruppentheoretische Struktur und Energieniveaus

Bei der klassischen Bewegung eines Teilchens im $1/r$ -Potential

$$H_{kl} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 - \frac{a}{r}$$

ist außer dem Drehimpuls und der Energie der Runge-Lenz-Vektor bewegungskonstant (vgl. M 2.4). Mit Hilfe der Vertauschungsrelationen seines quantenmechanischen Gegenstücks hat W. Pauli vor Bekanntwerden der Schrödingergleichung die Eigenwerte der Bindungszustände des Wasserstoffatoms rein algebraisch bestimmt (W. Pauli, Zs. f. Physik **36**, 336 (1926)). Viel später ist es mit Hilfe dieses Vektors auch gelungen, die Streuphasen algebraisch zu berechnen (D. Zwanziger, Journ. Math. Phys. **8**, 1858 (1967)). Die Algebra der Komponenten des Runge-Lenz-Vektors ermöglicht einen Einblick in den gruppentheoretischen Mechanismus, der zur hochgradigen Entartung der Energieniveaus führt. Wir wollen daher die Algebra und ihre Konsequenzen untersuchen.

Der Runge-Lenz-Vektor besteht aus den Bestandteilen $\mathbf{L} \times \mathbf{P}$ und \mathbf{X}/R . Wir betrachten zunächst den ersten Bestandteil. Ein quantenmechanisches Gegenstück sind die Komponenten

$$B_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} (L_j P_k - P_j L_k) = \frac{i}{2\hbar} [\mathbf{L}^2, P_i]$$

(die letzte Formel folgt mit Hilfe der Eigenschaften von Vektoroperatoren, vgl. Übungsaufgabe 5.18). Für anziehende Kräfte ($a > 0$) ist eine geeignete Form für den Runge-Lenz-Vektor

$$\mathbf{F} = \mathbf{B} + ma \frac{\mathbf{X}}{R}.$$

Daß dieser Vektor mit

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 - \frac{a}{R}$$

vertauschbar ist, muß nicht bewiesen werden. Vom klassischen Gegenstück \mathbf{F}_{kl} unterscheidet sich \mathbf{F} nur dadurch, daß die Reihenfolge der Operatoren \mathbf{L}, \mathbf{P} geeignet gewählt wurde. Der klassische Vektor ist

erhalten (vgl. M 2.4), daher verschwindet die Poissonklammer mit der klassischen Hamiltonfunktion

$$\{H_{kl}, \mathbf{F}_{kl}\} = 0.$$

Bei kanonischer Quantelung gehen Poissonklammern in Kommutatorklammern mit den gleichen algebraischen Eigenschaften über, daher muß der Kommutator $[H, \mathbf{F}]$ verschwinden. Durch explizite Berechnung des Kommutators (die etwas mühevoll ist) kann man das nachvollziehen.

Die Algebra der Operatoren \mathbf{L}, \mathbf{F} ist von wesentlich größerem Interesse. Um eine günstige Form zu erhalten, benützen wir anstelle von \mathbf{F} den ebenfalls mit H vertauschbaren Vektor

$$\mathbf{N} = \frac{1}{\sqrt{\mp 2mH}} \mathbf{F}$$

Dabei ist das obere Vorzeichen für Bindungszustände, das untere für Streuzustände zu verwenden, sodaß \mathbf{N} selbstadjungiert ist. Durch Nachrechnen kann man sich davon überzeugen, daß die folgenden VR erfüllt sind:

$$\begin{aligned} [L_j, L_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} L_l \\ [L_j, N_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} N_l \\ [N_j, N_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} L_l \end{aligned}$$

Das entspricht den Lieschen Strukturrelationen einer größeren Gruppe als der Drehgruppe $SO(3)$. Für das obere Vorzeichen ist die Gruppe isomorph zur vierdimensionalen Drehgruppe $SO(4)$, für das untere zur (orthochronen) Lorentzgruppe $SO(3,1)$. Diese höhere Symmetrie ist die Ursache der l -Entartung beim Wasserstoffatom.

Die beiden Quadrate \mathbf{L}^2 und \mathbf{N}^2 sind zwar miteinander und mit \mathbf{L} vertauschbar, aber nicht mit \mathbf{N} . Die entsprechende Relation lautet

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{N}] = \mp [\mathbf{N}^2, \mathbf{N}] = 2\hbar^2 \mathbf{N} + 2i\hbar (\mathbf{N} \times \mathbf{L})$$

Daraus bzw. aus den Lieschen Relationen kann man direkt ablesen, daß die beiden Operatoren

$$D^2 := \mathbf{L}^2 \pm \mathbf{N}^2 \quad \text{und} \quad \mathbf{L} \cdot \mathbf{N}$$

mit \mathbf{L} und \mathbf{N} vertauschbar sind

$$[D^2, \mathbf{L}] = [D^2, \mathbf{N}] = [\mathbf{L} \cdot \mathbf{N}, \mathbf{L}] = [\mathbf{L} \cdot \mathbf{N}, \mathbf{N}] = 0.$$

Durch Rechnung findet man

$$D^2 = -\hbar^2 \left(1 + \frac{E_R}{H} \right), \quad \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} = 0.$$

Dabei ist E_R die Rydbergenergie ($E_R = ma^2/2\hbar^2$). Vollständige Systeme vertauschbarer Operatoren für das Wasserstoffproblem sind daher

$$(D^2, \mathbf{L}, L_3, H), (D^2, \mathbf{N}^2, N_3, H), (D^2, L_3, N_3, H).$$

Die Energieniveaus der Bindungszustände lassen sich nun leicht berechnen. Verwenden wir das erste angegebene System, so müssen wir nur mehr die Eigenwerte von D^2 finden. Allgemein verhalten sich \mathbf{L} und \mathbf{N} bei Raumspiegelungen (vgl. S. 136 f.) entgegengesetzt: \mathbf{L} ist ein axialer, \mathbf{N} ein polarer Vektor. Die beiden Kombinationen

$$\mathbf{V}^{(\pm)} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} \pm \mathbf{N})$$

hängen daher durch die Paritätstransformation zusammen

$$\mathcal{R}\mathbf{V}^{(\pm)}\mathcal{R} = \mathbf{V}^{(\mp)}.$$

Die Kombinationen erfüllen für sich die Strukturrelationen der Gruppe SU_2

$$[V_j^{(\pm)}, V_k^{(\pm)}] = i\hbar\varepsilon_{jkl}V_l^{(\pm)}$$

und sind untereinander vertauschbar

$$[\mathbf{V}^{(+)}, \mathbf{V}^{(-)}] = 0.$$

Die Eigenwerte der Quadrate $(\mathbf{V}^{(\pm)})^2$ sind daher $\hbar^2 k_{\pm}(k_{\pm} + 1)$ mit $k_{\pm} = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Die Differenz der Quadrate verschwindet

$$(\mathbf{V}^{(+)})^2 - (\mathbf{V}^{(-)})^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} = 0.$$

Wenden wir diese Gleichung auf einen beliebigen Eigenzustand von $(\mathbf{V}^{(+)})^2, V_3^{(+)}, (\mathbf{V}^{(-)})^2, V_3^{(-)}$ an, so folgt, daß die Quantenzahlen gleich sein müssen: $k_+ = k_- =: k$. Der Operator D^2 ist für Bindungszustände (oberes Vorzeichen)

$$D^2 = 2 \left((\mathbf{V}^{(+)})^2 + (\mathbf{V}^{(-)})^2 \right)$$

und hat daher die Eigenwerte

$$2\hbar^2 (k_+(k_+ + 1) + k_-(k_- + 1)) = \hbar^2 k(2k + 2) = \hbar^2 ((2k + 1)^2 - 1)$$

mit $k = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Die Eigenwerte von

$$H = -\frac{E_R}{(D^2/\hbar^2 + 1)}$$

sind daher

$$E_n = -\frac{E_R}{n^2} \quad \text{mit } n = 2k + 1 = 1, 2, 3, \dots$$

Aus $D^2 \geq \mathbf{L}^2$ folgt $n^2 \geq l(l + 1) + 1$ und damit der Entartungsgrad.

A1.2 Streuphasen

Um die Streuphasen zu finden, benützen wir die im Kap. 7 entwickelte formale Streutheorie und die dort definierten Operatoren Ω_{\pm}, S . Wir ordnen einem beliebigen Operator A durch

$$A^{(\pm)} := \Omega_{\pm}^{\dagger} A \Omega_{\pm}$$

zwei "asymptotische" Größen $A^{(\pm)}$ zu. Für diese erhält man mit den Formeln der formalen Streutheorie

$$\langle a, \pm | \mathcal{P}_s A | b, \pm \rangle = \langle a | A^{(\pm)} | b \rangle.$$

Ist A eine Erhaltungsgröße

$$[H, A] = 0,$$

so kann man mit Hilfe von

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} [H, A] \Omega_{\pm} = [H_0, A^{(\pm)}]$$

leicht nachweisen, daß

$$\langle a | A^{(+)} | b \rangle = \langle a | A^{(-)} | b \rangle$$

sein muß.

Zur Berechnung der Streuphasen benützen wir als Zustände $|a\rangle$ die Drehimpulszustände aus Abschnitt 5.4. Als Operator A betrachten wir die 3. Komponente des Impulses und untersuchen die Gleichung

$$\langle k, l+1, m | P_3^{(+)} | k, l, m \rangle = \langle k, l+1, m | S^\dagger P_3^{(-)} S | k, l, m \rangle.$$

Da S in der Drehimpulsdarstellung diagonal ist

$$S | k, l, m \rangle = \exp(2i\delta_l) | k, l, m \rangle,$$

erhalten wir die Formel

$$\exp(2i(\delta_l - \delta_{l+1})) = \frac{\langle k, l+1, m | P_3^{(+)} | k, l, m \rangle}{\langle k, l+1, m | P_3^{(-)} | k, l, m \rangle}$$

Das gibt eine Rekursionsformel für δ_l , wenn es gelingt, die rechte Seite in Termen von l und $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ auszudrücken. Die Phasen können daraus in Termen von δ_0 berechnet werden. Der Phasenfaktor $\exp(2i\delta_0)$ kann beliebig gewählt werden (der Wirkungsquerschnitt ist davon unabhängig).

Um die Rekursionsformel zu finden, betrachten wir die 3. Komponente des Runge-Lenz-Vektors \mathbf{F} und untersuchen seine Matrixelemente zwischen den oben betrachteten Zuständen. Da \mathbf{F} erhalten ist, muß (s.o.)

$$\langle k, l+1, m | F_3^{(+)} | k, l, m \rangle = \langle k, l+1, m | F_3^{(-)} | k, l, m \rangle$$

sein. Durch Einsetzen von

$$F_3 = \frac{i}{2\hbar} [\mathbf{L}^2, P_3] + ma \frac{X_3}{R}$$

sieht man, daß das Matrixelement des ersten Terms durch ein entsprechendes von $P_3^{(\pm)}$ ausgedrückt werden kann. Im zweiten Term darf man aber

$$\left(\frac{X_3}{R} \right)^{(\pm)} \rightarrow \mp \left(\frac{P_3}{P} \right)^{(\pm)} \quad \text{mit } P = |\mathbf{P}|$$

ersetzen. Unmittelbar einzusehen ist das für den **klassischen** asymptotischen Orts- bzw. Impulsvektor: in unendlicher Entfernung vom Streuzentrum wird die Bahn gerade (d.h. $\mathbf{p}^{(\pm)}$ konstant) und verläuft daher parallel (oder antiparallel) zu $\mathbf{X}^{(\pm)}$; \mathbf{X} wird vom Streuzentrum weg positiv gezählt; charakterisiert man durch die Anfangskonfiguration (+),

so läuft das Teilchen auf das Streuzentrum zu, daher das negative Vorzeichen; charakterisiert man durch die Endkonfiguration, so läuft das Teilchen vom Streuzentrum weg, daher das positive Vorzeichen. Für quantenmechanische Wellenpakete ist die Ersetzung ebenfalls plausibel, da sie sich i.W. auf die Trajektorien bezieht. Für einen strengen Beweis vgl. z.B. H. Grosse et al., Acta Phys. Austr. **40**, 97 (1974).

Führen wir die Ersetzung durch, so erhalten wir

$$\langle k, l+1, m | F_3^{(\pm)} | k, l, m \rangle = i\hbar(l+1 \pm i\eta) \langle k, l+1, m | P_3^{(\pm)} | k, l, m \rangle$$

mit $\eta = ma/k\hbar^2$. Gleichsetzen der beiden Ausdrücke gibt

$$\frac{\langle k, l+1, m | P_3^{(+)} | k, l, m \rangle}{\langle k, l+1, m | P_3^{(-)} | k, l, m \rangle} = \frac{l+1-i\eta}{l+1+i\eta}$$

und wir erhalten durch Auflösen der Rekursionsformel

$$S_l = \exp(2i\delta_l) = \frac{\Gamma(l+1-i\eta)}{\Gamma(l+1+i\eta)}$$

Die Streuamplitude ist

$$A(\theta, k) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) (\exp(2i\delta_l) - 1)$$

Der letzte Term trägt nur Terme $\sim \delta(\theta)$ bei: das sieht man aus der Vollständigkeitsrelation der $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit $\vartheta = 0, \vartheta' = \theta$. Schließen wir den Winkel $\theta = 0$ aus, so können wir den Term weglassen. Mit der Formel

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\Gamma(l+1-i\eta)}{\Gamma(l+1+i\eta)} P_l(z) = i\eta \left(\frac{1-z}{2} \right)^{i\eta-1} \frac{\Gamma(1-i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)}$$

erhalten wir die exakte Coulomb-Streuamplitude

$$A(\theta, k) = \frac{ma}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)} \frac{\Gamma(1-i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)} \exp \left(i\eta \ln \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right)$$

Man erkennt nun den logarithmischen Phasenfaktor (der die Ursache der Divergenzen in den höheren Bornschen Näherungen ist) und die willkürliche Phase, die hier als

$$\exp(2i\delta_0) = \frac{\Gamma(1 - i\eta)}{\Gamma(1 + i\eta)}$$

gewählt wurde. Bei der Bildung des Wirkungsquerschnitts

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2$$

fallen beide Phasenfaktoren weg und man erhält die Rutherfordformel als exaktes Resultat.

A1.3 Algebraische Berechnung von Eigenvektoren

Wie bereits in Abschnitt 5.6 erwähnt wurde, ist es möglich, für das Coulombproblem ein algebraisches Verfahren zu entwickeln, mit dem nicht nur die Eigenwerte, sondern auch die Eigenvektoren darstellungsunabhängig bestimmt werden können. Das Verfahren kann mutatis mutandis auch für andere rotationssymmetrische Probleme angewandt werden (wobei man natürlich im allgemeinen Fall nicht “durchkommt”). Für das Coulombproblem kann man damit die Eigenfunktionen für die Bindungszustände in der Orts- und Impulsdarstellung in ziemlich elementarer Weise ausrechnen. Man braucht dabei keine Detailkenntnisse über spezielle Funktionen. Die Form der Resultate ist außerdem für symbolische Computerprogramme sehr gut geeignet. Da das Verfahren relativ wenig bekannt ist, soll es hier skizziert werden.

Die Grundidee besteht darin, den Hamiltonoperator (analog wie für den harmonischen Oszillator) als Produkt von Leiteroperatoren zu schreiben. Im Gegensatz zum harmonischen Oszillator werden aber die Eigenzustände $|\epsilon, l\rangle$ nicht durch eine, sondern durch zwei Zahlen (ϵ und l) numeriert. Für diskrete Eigenwerte ϵ erhalten wir also nicht eine Linie von Leitersprossen, sondern ein zweidimensionales Gitter. Der entscheidende Punkt ist das “Erraten” der geeigneten Faktoren von H . Wir benützen die Coulombskalierung ($\mathcal{Y} = E_R = \text{Rydbergenergie}$, $\lambda = a_0 = \text{Bohrscher Radius}$) und die Bezeichnungsweise von Abschnitt 5.5. Damit lautet der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_l = \mathcal{K}^2 + \frac{l(l+1)}{Q^2} - \frac{2}{Q}.$$

Wir versuchen die Faktorisierung mit den Operatoren

$$A_l = i\mathcal{K} + \frac{l}{Q} - \frac{1}{l}, \quad A_l^\dagger = -i\mathcal{K} + \frac{l}{Q} - \frac{1}{l}, \quad [A_l, A_l^\dagger] = -\frac{2l}{Q^2}.$$

Eine Faktorisierung von \mathcal{H}_l ist damit in zweifacher Weise möglich:

$$\mathcal{H}_l = A_l^\dagger A_l - \frac{1}{l^2} = A_{l+1} A_{l+1}^\dagger - \frac{1}{(l+1)^2}.$$

Wir betrachten einen Eigenzustand $|\epsilon\rangle$ von \mathcal{H}_l mit einem bestimmten Eigenwert ϵ . Für diesen erhalten wir die beiden Formeln:

$$(a) A_l^\dagger A_l |\epsilon\rangle = |\epsilon\rangle \left(\epsilon + \frac{1}{l^2} \right), \quad (b) A_{l+1} A_{l+1}^\dagger |\epsilon\rangle = |\epsilon\rangle \left(\epsilon + \frac{1}{(l+1)^2} \right).$$

Wir halten den Zahlenwert von l fest und betrachten die Zustände

$$\begin{aligned} |\epsilon, -1\rangle &:= A_l |\epsilon\rangle, \quad |\epsilon, -2\rangle = A_{l-1} A_l |\epsilon\rangle \cdots \\ |\epsilon, +1\rangle &:= A_{l+1}^\dagger |\epsilon\rangle, \quad |\epsilon, +2\rangle = A_{l+2}^\dagger A_{l+1}^\dagger |\epsilon\rangle \cdots \end{aligned}$$

Anwendung von A_l auf (a) gibt

$$A_l A_l^\dagger A_l |\epsilon\rangle = A_l |\epsilon\rangle \left(\epsilon + \frac{1}{l^2} \right).$$

Verwendet man auf der linken Seite die erste Faktorisierung von \mathcal{H}_l , so erhält man

$$\mathcal{H}_{l-1} |\epsilon, -1\rangle = |\epsilon, -1\rangle \epsilon.$$

Durch Anwendung von A_l auf einen Eigenzustand von \mathcal{H}_l erhalten wir also einen Eigenzustand von \mathcal{H}_{l-1} mit gleichem Eigenwert ϵ . Wiederholt man die Prozedur, so sieht man, daß $|\epsilon, -2\rangle$ ein Eigenzustand von \mathcal{H}_{l-2} mit gleichem Eigenwert ϵ ist usw. Genauso findet man mit (b) und der zweiten Faktorisierung, daß $|\epsilon, +1\rangle, |\epsilon, +2\rangle, \dots$ Eigenzustände von $\mathcal{H}_{l+1}, \mathcal{H}_{l+2}, \dots$ mit gleichem Eigenwert ϵ sind. Wir betrachten nun die Norm der Zustände. Mit der Formel für die Wirkung von AA^\dagger erhalten wir

$$\langle \epsilon, +1 | \epsilon, +1 \rangle = \langle \epsilon | A_{l+1} A_{l+1}^\dagger | \epsilon \rangle = \langle \epsilon | \epsilon \rangle \left(\epsilon + \frac{1}{(l+1)^2} \right).$$

Die Prozedur kann fortgesetzt werden und gibt

$$\begin{aligned}
 \langle \epsilon, +N | \epsilon, +N \rangle &= \langle \epsilon, +(N-1) | A_{l+N} A_{l+N}^\dagger | \epsilon, +(N-1) \rangle = \\
 &= \langle \epsilon, +(N-1) | \epsilon, (N-1) \rangle \left(\epsilon + \frac{1}{(l+N)^2} \right) = \\
 &= \langle \epsilon | \epsilon \rangle \left(\epsilon + \frac{1}{(l+1)^2} \right) \left(\epsilon + \frac{1}{(l+2)^2} \right) \cdots \left(\epsilon + \frac{1}{(l+N)^2} \right).
 \end{aligned}$$

In den einzelnen Faktoren des letzten Ausdrucks wird zu ϵ immer weniger addiert. Da ϵ für Bindungszustände negativ ist, muß es eine bestimmte ganze Zahl $N = N(l) \geq 0$ geben, für die der letzte Faktor gerade noch positiv ist, während er für den nächsthöheren Wert $N+1$ negativ wird. Ist die Norm von $|\epsilon\rangle$ positiv, so bleibt diese Eigenschaft für alle höheren Zustände bis $|\epsilon, +N\rangle$ erhalten. Der Zustand $|\epsilon, +(N+1)\rangle$ hätte aber negative Norm. Da die Norm physikalischer Zustände positiv sein muß, darf es ihn nicht geben: es muß ihm die Null (kein Zustand) entsprechen

$$A_{l+N+1}^\dagger |\epsilon, +N\rangle = 0.$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
 0 &= \langle \epsilon, +N | A_{l+N+1} A_{l+N+1}^\dagger | \epsilon, +N \rangle = \\
 &= \langle \epsilon, +N | \epsilon, +N \rangle \left(\epsilon + \frac{1}{(l+N+1)^2} \right).
 \end{aligned}$$

Da die Norm im letzten Ausdruck endlich ist, muß der letzte Faktor verschwinden. Daraus erhalten wir die Eigenwerte

$$\epsilon_n = -\frac{1}{(l+N+1)^2} = -\frac{1}{n^2}, \quad E_n = -\frac{E_R}{n^2} \text{ (Balmerformel).}$$

Die Hauptquantenzahl resultiert daher als Summe einer radialen Quantenzahl $N = 0, 1, 2, \dots$ und der Drehimpulsquantenzahl. Der Entartungsgrad ($n \geq l+1$) ist direkt ablesbar.

Die übrigen Eigenvektoren findet man aus dem letzten durch Anwendung von Absteigeoperatoren. Dafür ist es besser, die Zustände anders zu bezeichnen. Wir verwenden als Zustandscharakteristika n statt ϵ und den Index l des Hamiltonoperators \mathcal{H}_l , um dessen Eigenzustand es sich handelt:

$$|\epsilon, +N\rangle \equiv |n, n-1\rangle, \quad |\epsilon, +(N-1)\rangle \equiv |n, n-2\rangle,$$

$$|\epsilon, +(N-l-1)\rangle \equiv |n, l\rangle.$$

Die "Endbedingung" lautet dann

$$A_n^\dagger |n, n-1\rangle = 0.$$

Die Leiteroperationen sind

$$|n, l\rangle \sim A_{l+1} |n, l+1\rangle, \quad |n, l+1\rangle \sim A_{l+1}^\dagger |n, l\rangle.$$

Die so erhaltenen Zustände sind nicht normiert. Man kann aber sehr leicht normerhaltende Operatoren finden. Dazu betrachten wir den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle n, l | A_l^\dagger A_l |n, l\rangle &= \langle n, l | \mathcal{H}_l + \frac{1}{l^2} |n, l\rangle = \langle n, l |n, l\rangle \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= \langle n, l |n, l\rangle \frac{(n-l)(n+l)}{n^2 l^2}. \end{aligned}$$

Der Operator

$$\mathcal{A}_l = \frac{nl}{\sqrt{(n-l)(n+l)}} A_l$$

erhält daher die Norm und wir erhalten

$$|n, l\rangle = \mathcal{A}_{l+1} |n, l+1\rangle, \quad |n, l+1\rangle = \mathcal{A}_{l+1}^\dagger |n, l\rangle$$

Damit kann man die Zustände aus dem durch die Endbedingung definierten Ausgangszustand rekursiv berechnen, wenn man diesen normiert hat:

$$\begin{aligned} \langle n, n-1 |n, n-1\rangle &= 1 \\ |n, l\rangle &= \mathcal{A}_{l+1} \mathcal{A}_{l+2} \cdots \mathcal{A}_{n-2} \mathcal{A}_{n-1} |n, n-1\rangle. \end{aligned}$$

Nun konstruieren wir die Eigenfunktionen in der Ortsdarstellung. Dazu ziehen wir A_l bzw. A_l^\dagger als Differentialoperator nach links

$$\langle \mathbf{x} | \begin{pmatrix} A_l \\ A_l^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{q} \left(\frac{l}{q} - \frac{1}{l} \pm \frac{d}{dq} \right) q \langle \mathbf{x} |.$$

bzw.

$$\langle q, l | \begin{pmatrix} A_l \\ A_l^\dagger \end{pmatrix} |n, l\rangle = \left(\frac{l}{q} - \frac{1}{l} \pm \frac{d}{dq} \right) \langle q, l |n, l\rangle$$

Aus der Endbedingung erhalten wir für $g_{nl}(q) = \langle q, l |n, l\rangle$

$$\frac{d}{dq} g_{n,n-1} = \left(\frac{n}{q} - \frac{1}{n} \right) g_{n,n-1} \quad g_{n,n-1} \sim q^n \exp\left(-\frac{q}{n}\right).$$

Die Bestimmung der Normierungskonstanten ist elementar. Die normierte Lösung ist

$$g_{n,n-1} = \frac{1}{\lambda^{3/2}} \frac{1}{n \sqrt{(2n-1)!}} \left(\frac{2q}{n} \right)^n \exp\left(-\frac{q}{n}\right).$$

Die übrigen Eigenfunktionen findet man daraus durch Anwendung der \mathcal{A} -Operatoren als Differentialoperatoren. Insgesamt resultiert für die Radialfunktion $\Phi_{nl}(r) = g_{n,l}/q$ die in 5.6 angegebene Form.

In der Impulsdarstellung muß man einige technische Tricks verwenden. Um den in A_l vorkommenden Operator $1/\mathcal{Q}$ nach links herauszuziehen, gehen wir von der Eigenwertgleichung für den gesamten Hamiltonoperator \mathcal{H} aus

$$\langle \mathbf{k} | \mathcal{P}^2 - \frac{2}{\mathcal{Q}} + \frac{1}{n^2} | n, l, m \rangle = 0$$

Daraus erhält man mit $\langle \mathbf{k} | \mathcal{P} = \lambda \mathbf{k} \langle \mathbf{k} |$

$$\langle \mathbf{k} | \frac{1}{\mathcal{Q}} | n, l, m \rangle = \frac{1}{2} \left(\lambda^2 k^2 + \frac{1}{n^2} \right) \langle \mathbf{k} | n, l, m \rangle.$$

Um \mathcal{K} herauszuziehen, benützen wir die Form

$$i\mathcal{K} = i\Pi^\dagger - \frac{1}{\mathcal{Q}} = i\mathcal{P} \cdot \mathcal{Q} \frac{1}{\mathcal{Q}} - \frac{1}{\mathcal{Q}} = (i\mathcal{P} \cdot \mathcal{Q} - 1) \frac{1}{\mathcal{Q}}$$

und verwenden

$$\langle \mathbf{k} | i\mathcal{P} \cdot \mathcal{Q} = -\mathbf{k} \cdot \nabla(k) \langle \mathbf{k} | = -k \frac{d}{dk} \langle \mathbf{k} |.$$

Damit sind alle in A_l vorkommenden Größen in winkelunabhängiger Form herauszuziehen. In Termen der in Abschnitt 5.5 benützten Bezeichnungsweise erhält man nach kurzer Rechnung mit $\xi = k\lambda$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \begin{pmatrix} A_l \\ A_l^\dagger \end{pmatrix} | n, l, m \rangle &= Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}) \frac{\lambda^{3/2}}{2\xi} \cdot \\ &\cdot \left(\left(l \mp \xi \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi^2 + \frac{1}{n^2} \right) - \frac{2}{l} \right) \langle \xi, l | n, l \rangle. \end{aligned}$$

Aus der Endbedingung erhalten wir für $f_{n,n-1} = \langle \xi, n-1 | n, n-1 \rangle$ die Differentialgleichung

$$\left(n + \xi \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi^2 + \frac{1}{n^2} \right) f_{n,n-1} = \frac{2}{n} f_{n,n-1}$$

Die normierte Lösung ist

$$f_{n,n-1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2^{2n} n!}{\sqrt{(2n-1)!}} \frac{(n\xi)^n}{(1+n^2\xi^2)^{n+1}}$$

Die übrigen Eigenfunktionen erhält man wie im Ortsraum durch Anwendung der normierten Leiteroperatoren \mathcal{A} . Insgesamt haben die Eigenfunktionen $\tilde{\Phi}_{nl}(k)$ die Form rationaler Brüche

$$\frac{(nka_0)^l}{(1+n^2k^2a_0^2)^{l+2}} \cdot \text{Polynom vom Grad } (n-l-1) \text{ in } \left(\frac{1-n^2k^2a_0^2}{1+n^2k^2a_0^2} \right).$$

Die untersten Eigenfunktionen sind

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{10}(k) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{4a_0^{3/2}}{(1+a_0^2k^2)^2} \\ \tilde{\Phi}_{20}(k) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{32a_0^{3/2}(1-4a_0^2k^2)}{(1+4a_0^2k^2)^3} \\ \tilde{\Phi}_{21}(k) &= \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \frac{128a_0^{3/2}(a_0k)}{(1+4a_0^2k^2)^3} \\ \tilde{\Phi}_{30}(k) &= \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{12a_0^{3/2}}{(1+9a_0^2k^2)^2} \left(-1 + 4 \left(\frac{1-9a_0^2k^2}{1+9a_0^2k^2} \right)^2 \right) \\ \tilde{\Phi}_{n,n-1}(k) &= a_0^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{n2^{2n}n!}{\sqrt{(2n-1)!}} \frac{(na_0k)^{n-1}}{(1+n^2a_0^2k^2)^{n+1}}. \end{aligned}$$

Die hier für das Coulombpotential verwendete Faktorisierung von \mathcal{H} in Termen von geeigneten Leiteroperatoren ist auch für andere Potentiale anwendbar. Die Endbedingung ist jedoch i.A. nur dann eine für einen Maximalwert von l , wenn das Potential für genügend große r abnimmt: nur dann kann der mit l zunehmende Zentrifugalterm die Bindung für genügend große l verhindern. Nimmt das Potential für große r zu, so gibt es keine obere Grenze für l . Man muß dann eine Endbedingung

für das untere Ende der Leiter suchen. Der sphärische harmonische Oszillator (Übungsbeispiel 5.32) ist ein instruktives Beispiel. Wie beim Coulombproblem sind in diesem Fall die Eigenwerte hochgradig entartet. Für andere Potentiale gibt es keine Entartung bezüglich l .

A2 Zur historischen Entwicklung

Den ersten Hinweis auf quantenhaftes Verhalten gab das 1900 gefundene Plancksche Strahlungsgesetz. Um zu einer zufriedenstellenden Formel für die spektrale Energieverteilung der von einem schwarzen Körper ausgesandten Strahlung zu gelangen, hatte Planck annehmen müssen, daß elektromagnetische Strahlungsenergie mit gegebener Frequenz ν nur in Vielfachen einer kleinsten Einheit $h\nu$ abgegeben werden kann. Damit mußte man annehmen, daß auch das Licht quantenhaftes Verhalten zeigt. 1905 nahm Einstein die Lichtquantenhypothese ernst und erklärte damit den Photoeffekt. Weitere erfolgreiche Anwendungen der Quantenhypothese betrafen vor allem die statistische Mechanik, von der Theorie der spezifischen Wärme von Festkörpern (Einstein 1907, Debye 1912) bis zur Bose-Einsteinstatistik (1924). In die Atomphysik wurde ein quantenhaftes Verhalten durch Bohrs Atommodell (1913) eingeführt, nach dem im Atom nur Elektronenbahnen mit bestimmten Energien E_n ($n = 1, 2, \dots$) "erlaubt" sind. Bei "Sprüngen" von der n -ten zur m -ten Bahn wird Strahlung mit der Frequenz

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h}(E_n - E_m)$$

emittiert bzw. absorbiert. Als generelle Regel für die noch zu entwickelnde Quantentheorie formulierte Bohr das Korrespondenzprinzip (1913), nach dem für große Quantenzahlen n die klassische Physik resultieren soll. In der Folge konnte man vor allem mit Hilfe dieses Prinzips eine Reihe von Zusammenhängen zwischen Phänomenen aufklären, wenn man bestimmte Gegebenheiten als (unverstandenes) quantenmechanisches Verhalten hinnahm. Ein Beispiel dafür ist die "Umkehrung" der Lichtquantenhypothese durch de Broglie, der 1923 postulierte, daß Teilchen (z.B. Elektronen) Welleneigenschaften haben sollen, wobei der Impuls p des Teilchens mit der Wellenlänge λ durch $\lambda \cdot p = h$ zusammenhängt. Die Bohrschen Bahnen im Atom sind dann solche, für die der Umfang des Bahnkreises ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ($n\lambda$) ist. Der Comptoneffekt (1924) bildete eine weitere Stütze für die Lichtquantenhypothese. Schließlich gelang es Kramers und Heisenberg (Jänner 1925) sogar, zur "richtigen" Dispersionsformel für die Ausbreitung von Licht in Materie zu gelangen.

Das alles zusammen war aber keine Theorie, sondern eher ein Tappen im Dunkeln. Man mußte viele Annahmen machen, ohne sie begründen zu können, viele Fakten blieben unerklärt, man verstand nicht, warum die gefundenen Formeln nicht immer stimmten usw. Die Quantenmechanik war zwischen 1900 und 1925 eher eine “Kunst” als eine Wissenschaft.

Dieser Zustand hat sich in den folgenden 2 Jahren rapid geändert. In kurzer Zeit wurde eine geschlossene Theorie geschaffen, die seither zwar immer weiter ausgebaut, aber bis heute nicht abgeändert wurde. Im Gegensatz zu anderen bedeutenden Theorien der Physik wurden die Grundgleichungen der Quantenmechanik aber nicht von einem, sondern von mehreren Physikern auf verschiedenen Wegen gefunden. Man kann dabei **zwei Phasen** unterscheiden. In der ersten (Juli 1925 – Juli 1926) wurde der Formalismus (die Gleichungen) der Quantenmechanik entwickelt, ohne daß man ihn eigentlich verstand; men understood not, what is among their hands (Carlyle 1795 – 1881). Das geschah in Form von “Konkurrenzunternehmen”, die an verschiedenen Orten im Gang waren (wenn auch nicht ohne Kontakt). Konkurrenten waren die Göttinger Gruppe (Born, Heisenberg, Jordan), Dirac in Cambridge und Schrödinger (damals in Zürich). Wenn man will, ist also die Quantenmechanik dreimal entdeckt worden (oder $3\frac{1}{2}$ mal; man sollte den damals wenig beachteten Versuch von C. Lanczos nicht vergessen). Mit den in dieser Phase entwickelten Gleichungen konnte man “rechnen”, das heißt man konnte physikalische Probleme von Grund an lösen und Resultate erzielen, die mit dem Experiment übereinstimmten. Das zeigte, daß das die “richtige” Theorie war.

Die physikalische Interpretation der Gleichungen war aber nicht völlig klar. Sie wurde erst geleistet, nachdem man die verschiedenen “Unternehmen” zusammennahm (wobei Schrödingers Zugang den entscheidenden Anstoß gab). Erst diese zweite Phase machte aus der Quantenmechanik die geschlossene Theorie, als die wir sie heute kennen. Als Zeitpunkt für das Ende dieser Phase kann man in etwa den Solvay-Kongreß im Oktober 1927 ansetzen.

Der genaue Verlauf dieser Entwicklung in den beiden “Gründerjahren” ist faszinierend und soll nun geschildert werden. Begonnen hat alles mit Heisenbergs Arbeit [1] “Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen”. In dieser wird erstmals vorgeschlagen, eine **neue** Mechanik zu schaffen, in der nur Beziehun-

gen zwischen **beobachtbaren Größen** enthalten sein sollen. Heisenberg betrachtet eindimensionale Systeme, z. B. ein schwingendes Teilchen (Oszillator). Er ersetzt die Koordinate $x(t)$ durch eine "Gesamtheit von Größen"

$$x(t) \rightarrow x_{nm} \exp(i\omega_{nm}(t)) \quad n, m = 0, 1, 2, \dots$$

und setzt an

$$x^2(t) \rightarrow (x^2)_{nm} \exp(i\omega_{nm}(t))$$

Er findet

$$(x^2)_{nm} = \sum_r x_{nr} x_{rm}$$

und kann zeigen, daß die **Energie erhalten** ist. Für eine harmonische Schwingung (Frequenz ω) findet er, daß die ω_{nm} Bohrsche Frequenzbedingungen mit quantisierter Energie erfüllen

$$\omega_{n,m} = 0 \quad \text{für } m \neq n - 1, \quad \omega_{n,n-1} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n-1}) = \omega,$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

Born und Jordan [2] erkennen in der Multiplikationsregel für x^2 jene für Matrizen und zeigen die Vertauschungsrelation

$$q \cdot p - p \cdot q = i\hbar \mathbf{1}$$

Dabei bedeutet p den zur kanonischen Koordinate q gehörigen Impuls (für harmonische Oszillatoren und anharmonische Verallgemeinerungen ist $q = x$) und \cdot das Matrizenprodukt.

In einer gemeinsamen Arbeit (Born, Heisenberg, Jordan [4], sog. "Dreimännerarbeit") wird eine umfassende Formulierung der "Matrizenmechanik" vorgelegt, und zwar für eine beliebige Anzahl f von Freiheitsgraden ($q_\alpha, p_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, f$). Die Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{dq_\alpha}{dt} = q_\alpha \cdot H - H \cdot q_\alpha$$

(ebenso für p_α) wird gefunden, aus dem Eigenwertproblem für die Energie ergibt sich die Notwendigkeit, die Hamiltonsche Matrix $H(q, p)$ zu diagonalisieren, die entsprechende Transformationstheorie wird entwickelt, die Störungstheorie (näherungsweise Diagonalisierung) ausgearbeitet, der Fall entarteter Eigenwerte wird untersucht. Schließlich

werden die Vertauschungsrelationen für die Drehimpulskomponenten hergeleitet und die Drehimpulsquantisierung wird gefunden.

Den gleichen Stand erreicht zur gleichen Zeit auf andere Weise Dirac. Er geht von Heisenbergs grundlegender Arbeit aus und erkennt ebenfalls die Vertauschungsrelation für q und p . Er bemerkt im Korrespondenzlimes den Zusammenhang mit der klassischen Poissonklammer und das führt ihn auf seinen Zugang zur Quantenmechanik: man nehme die Hamiltonsche Dynamik, schreibe sie mit Poissonklammern und ersetze die klassische Klammer durch den Kommutator

$$\{A, B\}_{\text{klass}} \rightarrow [A, B] \frac{1}{i\hbar} = (A \cdot B - B \cdot A) \frac{1}{i\hbar}$$

Dabei sind A, B beliebige Funktionen von q_α und p_α . Das führt direkt auf die oben erwähnte Theorie. Formal ist der Zugang mathematisch abstrakter, im Detail aber einfacher, weil man den Hamilton-Poisson-Formalismus verwenden kann.

Dirac hat seinen Zugang in der Folge als algebraische Theorie von “ q - und c -Zahlen” konsequent entwickelt. “ q ” bedeutet dabei “nicht vertauschbar” (quantum oder queer), “ c ” bedeutet vertauschbar (commutative oder classical). Die Äquivalenz mit der Matrizenmechanik war evident. Seine Arbeit fand bei den Göttinger Konkurrenten begeisterte Aufnahme. In der folgenden Zeit verwendeten aber sowohl die Göttinger, als auch Dirac weiterhin jeweils “ihren” Formalismus, dabei erzielte Resultate wurden jedoch sofort brieflich ausgetauscht (“immer wenn wir etwas Schlaues ausgeknobelt hatten und darauf stolz waren, kam am nächsten Tag ein Brief von Dirac, in dem das Gleiche stand”, so hat es Heisenberg geschildert).

Der nächste Schritt brachte als erste konkrete Anwendung auf ein atomares System die Untersuchung des Wasserstoffspektrums durch Pauli [6]. Dieser war von seinem Freund Heisenberg ständig über alle Fortschritte brieflich informiert und um Kritik gebeten worden. Er war überzeugt, daß das der richtige Weg sei. Die “Dreimännerarbeit” hat er als “Göttinger Gelehrsamkeitsschwall” zunächst abgelehnt. Er ließ sich aber von Heisenberg umstimmen und berechnete (in 3 Wochen und auf geniale Weise) das diskrete Spektrum des Wasserstoffs (die Göttinger waren daran gescheitert), den normalen Zeemaneffekt und den Starkeffekt. In der nahezu gleichzeitig eingereichten Arbeit von Dirac [7] wird das diskrete H-Spektrum auf andere (nicht minder geniale)

Weise aus der Hamiltonschen Fassung der Quantenmechanik hergeleitet. Dirac hatte Paulis Arbeit gekannt, er wollte aber zeigen, daß das Spektrum auch mit seinem Kalkül resultiert, mit dessen Ausbau sich die Arbeit hauptsächlich befaßt.

In der gleichen Zeit (Winter 1925/26) entstand die Wellenmechanik. Es ist legitim, sie als negative Reaktion auf die Matrizenmechanik aufzufassen: Schrödinger selbst hat sie so motiviert. Für den Zugang von Lancsos trifft das in gewissem Ausmaß ebenfalls zu. In gewisser Weise nimmt Lancsos Arbeit [5] einiges von der Wellenmechanik vorweg, wir können in ihr heute sogar eine ganze Reihe von Konzepten erkennen, die erst viel später (nach Entwicklung der Quantenfeldtheorie) in die Quantenmechanik aufgenommen wurden. Damals blieb die Arbeit Episode, sie wurde kaum zur Kenntnis genommen. Der Grund dafür war, daß Lancsos kein konkretes Problem lösen konnte. Ganz im Gegensatz zu Schrödinger: seine erste Arbeit [8] (die 14 Tage nach der von Lancsos erschien - Schrödinger hat Lancsos Zugang wohl nicht gekannt) enthielt bereits eine Berechnung des diskreten Spektrums des Wasserstoffs, aber auch das kontinuierliche Spektrum.

Schrödinger formuliert dazu das Eigenwertproblem als solches einer partiellen Differentialgleichung für einen Wellenvorgang $\psi(\mathbf{x})$. Die nach ihm benannte Gleichung (stationäre Schrödingergleichung) für ein Teilchen im Potential V

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

findet er aus der Hamilton-Jacobigleichung für die Wirkung S durch den Ansatz $S = \hbar \ln \psi$ über ein Variationsproblem. Die Eigenwerte findet er aus dem asymptotischen Verhalten von ψ , das er vollständig diskutiert: für $E > 0$ ist das Spektrum kontinuierlich und ψ oszillatorisch, für $E < 0$ erhält man ganzzahlige Werte $E_n = -E_R/n^2$, $n = 1, 2, 3, \dots$, die Eigenfunktionen ψ_n verschwinden asymptotisch exponentiell. E_R ist dabei die Rydbergenergie.

In der zweiten Arbeit [9] stellt Schrödinger den Zusammenhang mit den de Broglieschen Wellen her und betrachtet die Analogie zur Wellenoptik. Als weitere Beispiele untersucht er den harmonischen Oszillator und den Rotator (wobei er die gleichen Resultate wie die "Matrizenmechaniker" erhält), außerdem berechnet er das Rotations- bzw. Schwingungsspektrum zweiatomiger Moleküle.

Die Übereinstimmung so vieler Resultate von zwei Theorien, die so verschieden aussehen, ist erstaunlich. Über Erstaunliches soll man nachdenken. Schrödinger hat es getan: bereits in seiner nächsten Arbeit [10] stellt er die Verbindung zwischen Wellen- und Matrizenmechanik her und zeigt die Äquivalenz. Das gleiche Resultat hatte Pauli zur gleichen Zeit erhalten; er hat es nicht veröffentlicht, wahrscheinlich weil er von Schrödingers Arbeit Kenntnis erhielt. Eckart [16] in den USA erzielte das gleiche Resultat unabhängig davon etwas später: er hat von Schrödingers Arbeit [10] erst später erfahren.

Die Beziehung zwischen Matrizen- und Wellenmechanik ist uns allen vertraut: den Matrixelementen A_{nm} einer q -Zahl $A(q, p)$ entspricht in der Wellenmechanik

$$A_{nm} = \int \psi_n^* A(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}) \psi_m d(q)$$

mit Eigenfunktionen ψ_m der Schrödingergleichung. Diese selbst entspricht den Matrixelementen von $H - E.1$, denn die kinetische Energie ist

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

(für 1 Teilchen, Schrödinger hat aber den allgemeinen Fall betrachtet).

Während Schrödinger seine Wellenmechanik entwickelte, blieb aber die "Konkurrenz" nicht untätig. Im Rahmen der Matrizenmechanik leiten Heisenberg und Jordan [11] die Landéformel für den anomalen Zeeman-Effekt her und berechnen die Feinstrukturaufspaltung. Der Spin wird damit in die Quantenmechanik eingeführt. In der gleichzeitigen Arbeit von Dirac [12] erzielt dieser erste Aufschlüsse über Atome mit mehreren Elektronen und findet ebenfalls die Landéformel. Gleichzeitig berechnet Lucie Mensing [13] das Rotations/Schwingungsspektrum 2atomiger Moleküle mit der Matrizenmechanik (das Resultat ist sogar besser als das von Schrödinger [9], weil es auch die Kopplung enthält). Das war der erste Beitrag einer Frau zur Quantenmechanik. Später hat das Thema einen weiteren "Rekord" gebracht: den des jüngsten Autors. Im November 1926 reichte der Russe Landau [24] eine Arbeit über zweiatomige Moleküle ein, in der zusätzlich Zeeman- und Starkaufspaltungen matrizenmechanisch berechnet werden. Landau war zu diesem Zeitpunkt 18 Jahre alt.

Dirac hat in seiner nächsten Arbeit [14] als erster mit Erfolg nichtstationäre und relativistische Quantenmechanik betrieben. Er lieferte (u.a.) eine Herleitung des Comptoneffekts. Seine im Mai 1926 eingereichte Dissertation “Quantum mechanics” war die erste Doktorarbeit auf diesem Gebiet.

Schrödingers vierte Arbeit [15] ist damit gleichzeitig. In dieser Arbeit legt Schrödinger die wellenmechanische Störungstheorie vor. Er berechnet mit ihr die Starkaufspaltung. Außerdem kann er (im Gegensatz zu seinen früheren Arbeiten) Aussagen über Linienintensitäten machen. Zu diesem Zweck benützt er die entsprechende matrizenmechanische Formel und übersetzt sie in die Wellenmechanik. Die Arbeit ist daher die erste, in der beide Fassungen der Theorie verwendet werden.

In Analogie zur Optik sollten die Trajektorien der Schrödingerwellen klassischen Teilchenbahnen entsprechen. Wentzel [18] gelingt es, diesen Zusammenhang herzustellen: die klassischen Bahnen resultieren aus der Schrödingertheorie in unterster Ordnung einer quasiklassischen Entwicklung nach Potenzen von \hbar .

Schrödingers fünfte Arbeit [19] bildet den Schlußpunkt seiner Fassung der Wellenmechanik. Er findet in ihr die zeitabhängige Schrödingergleichung (auf einem Weg, der uns “leicht kriminell” erscheint - durch Übersetzen aus der dynamischen Gleichung von Born, Heisenberg, Jordan [4] bzw. Dirac [3] wäre das einfacher gewesen), betrachtet die entsprechende Störungstheorie und berechnet mit ihr die spontane Emission/Absorption. Außerdem betrachtet er als relativistische Verallgemeinerung die (sogenannte) Klein-Gordon-Gleichung (mit elektromagnetischem Feld). Diese Gleichung sollte wirklich nach Schrödinger heißen. Er hatte sie vor seiner ersten Arbeit zur Wellenmechanik gefunden und daraus das Wasserstoffspektrum berechnet; das Ergebnis lieferte zwar die Balmerformel, aber nicht die richtige Feinstruktur (weil die Gleichung den Spin nicht enthält, wie wir heute wissen). Schrödinger hat die Arbeit daher nicht veröffentlicht und die nichtrelativistische Gleichung als Ausgangspunkt genommen. Zwischen April und September 1926 ist die Klein-Gordon-Gleichung in 6 Arbeiten publiziert worden (Klein, Schrödinger, Fock, de Donder und Dungen, Kudar, Gordon).

Etwas ab Juni 1926 wurde für praktische Rechnungen der Schrödingertheorie mehr und mehr der Vorzug gegeben. Die Mehrheit der Theoretiker war mit dem Arbeiten mit partiellen Differentialgleichungen bes-

ser vertraut als mit algebraischen Methoden. Der zu einem Teilchen gehörige Wellenvorgang war anschaulich vorstellbar, auch wenn man nicht wußte, was die Wellenfunktion bedeutet, was sich also ausbreitet. Mit der Tatsache, daß mehreren Teilchen Wellenvorgänge in mehr als drei Dimensionen entsprechen (für jedes zusätzliche Teilchen um drei mehr), mußte man leben. Bei komplizierten Problemen erwies sich der Schrödingerformalismus trotzdem als einfacher. Heisenbergs fundamentale Arbeiten zum Mehrkörperproblem sind ein Beispiel dafür. In der ersten Arbeit [17], in der das wichtige Konzept des Austauschs eingeführt wird, verwendet er nur die Matrizenmechanik, in der zweiten [22] arbeitet er bereits mit der Wellenmechanik. Dirac benützt in seiner fundamentalen Arbeit [23] über die Fermi-Dirac-Statistik seine eigenen und wellenmechanische Methoden. Die Arbeit enthält u.a. die erste Herleitung des Planckschen Strahlungsgesetzes “ab initio”.

Die weitere Entwicklung zur endgültigen Quantenmechanik vollzog sich in zweifacher Weise. Einerseits wurde die (bis heute gültige) formale Fassung geschaffen, in der alle vorher so verschieden aussehenden Zugänge zu einer einheitlichen und geschlossenen Theorie vereinigt wurden. Das ist im Wesentlichen von Dirac geleistet worden. Sein Zugang war dafür am besten geeignet: Differentialoperatoren entsprechen speziellen Darstellungen seiner q -Zahlen, die Wellenfunktionen den Darstellungen des Zustands; es fiel ihm daher leicht, die Schrödingertheorie in seinen Formalismus aufzunehmen. Allerdings war er selbst vor Schrödinger nicht auf die Idee gekommen, spezielle Darstellungen zu benützen. Deswegen war die Schrödingergleichung auch für ihn überraschend. Für die “Matrizenmechaniker” war sie ebenso überraschend. Da sie (ebenso wie Dirac) den Zusammenhang zwischen den Transformationsmatrizen und Intensitäten (Übergangswahrscheinlichkeiten) erkannt hatten, erschien es nicht so naheliegend, Gleichungen für Eigenvektoren aufzustellen. Damit hätte man so etwas wie unbeobachtbare Größen als Grundelemente der Theorie benützt: Wellenfunktionen sind nicht “beobachtbar”.

Parallel dazu entstand die wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation der Quantenmechanik. Auch sie hat sich ganz an der Frage nach der Bedeutung der Wellenfunktion entzündet. Born hat als erster anhand des Streuproblems für ein Teilchen das Quadrat der Streuamplitude als Wahrscheinlichkeit interpretiert und diese Interpretation kurz darauf weiter ausgebaut [21], [22]. Die statistische Interpretation wurde so rasch ein Bestandteil der Quantenmechanik, daß viele Physiker

(und das Nobelkommittee) längere Zeit vergaßen, von wem sie stammte. Die Interpretation des Quadrates der Mehrteilchen-Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeit ist erstmalig in einer Arbeit von Pauli [25] über den Paramagnetismus in Form einer Fußnote(!) publiziert. Die statistische Interpretation war damals offenbar bereits ebenso geläufig, wie sie es heute für uns ist. Abgeschlossen wurde die Interpretation der Quantenmechanik erst durch Heisenbergs Unschärferelation [26] und durch Bohrs Begriff der Komplementarität [28]. Die mathematische Struktur der Theorie erhielt gleichzeitig durch J. v. Neumann [27], [29] ihre bleibende Gestalt.

Der Formalismus der Quantentheorie und seine wichtigsten Anwendungen sind von Physikern entwickelt worden, die in dieser Zeit erstaunlich jung waren (Pauli bezeichnete die Quantenmechanik 1925 als Knabenphysik). Die folgende Liste von Geburtsjahrgängen macht das deutlich: Born 1882, Bohr 1885, Schrödinger 1887, de Broglie 1892, Lanczos 1893, Wentzel 1898, Pauli 1900, Heisenberg u. Mensing 1901, Dirac, Jordan u. Eckart 1902, v. Neumann 1903, Landau 1908. Daß einzelne Genies überragende Leistungen in jungen Jahren erbringen, ist in der theoretischen Physik nichts Ungewöhnliches: Maxwell, Boltzmann, Einstein sind Beispiele dafür. Die Häufung in der Geschichte der Quantentheorie ist aber doch bemerkenswert.

Die weitere Entwicklung soll hier nicht geschildert werden (sie würde ein umfangreiches Buch mühelos füllen). Im Lauf der Zeit ist der Anwendungsbereich immer größer geworden. Ganze Fachgebiete sind aus Anwendungen der Quantentheorie entstanden (u.a. die Quantenchemie, die Kernphysik, große Teilgebiete der Festkörperphysik) und wären ohne sie nicht denkbar. Die Skala von Systemen mit typisch quantenmechanischem Verhalten reicht heute von mikroskopischen Gebilden (Kerne, Atome, Moleküle) über solche mit "Alltagsabmessungen" (Ferromagneten, Supraleiter, Supraflüssigkeiten) bis zu Objekten mit astronomischer Dimension (weiße Zwergsterne, Neutronensterne). Vielleicht war sogar unser Universum als Ganzes in seiner früheren Entwicklungsphase durch quantenmechanische Züge geprägt. Die Quantentheorie stellt heute einen Eckpfeiler für das Verständnis der ganzen Physik dar.

Literatur zur Entstehung der Quantentheorie.

Die Nummern entsprechen so genau als möglich der historischen Reihenfolge (Eingangsdatum bei der Redaktion der Zeitschrift).

- 1925 [1] W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 33, 879
 [2] M. Born, P. Jordan, Zs. f. Phys. 34, 858
 [3] P.A.M. Dirac Proc. Roy. Soc. A 109, 642
 [4] M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan Zs. f. Phys. 35, 557
- 1926 [5] C. Lanczos, Zs. f. Phys. 35, 812
 [6] W. Pauli, Zs. f. Phys. 36, 336
 [7] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 110, 561
 [8] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 361
 [9] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 489
 [10] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 734
 [11] W. Heisenberg, P. Jordan, Zs. f. Phys. 37, 263
 [12] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 111, 281
 [13] L. Mensing, Zs. f. Phys. 36, 814
 [14] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 111, 405
 [15] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 80, 437
 [16] C. Eckart, Phys. Rev. 28, 711
 [17] W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 38, 411
 [18] G. Wentzel, Zs. f. Phys. 38, 518
 [19] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 81, 109
 [20] M. Born, Zs. f. Phys. 37, 863
 [21] M. Born, Zs. f. Phys. 38, 803
 [22] W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 39, 499
 [23] P.A.M. Dirac Proc. Roy. Soc. A 112, 661
 [24] L.D. Landau Zs. f. Phys. 40, 621
- 1927 [25] W. Pauli, Zs. f. Phys. 41, 81
 [26] W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 43, 127
 [27] J.v. Neumann, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 1
 [28] N. Bohr, Nature 121, 580
 [29] J.v. Neumann, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 245

Sachverzeichnis

Addition von Drehimpulsen	168, 184
Allotropie	262
Analysator	16 f., 24
Anfangskonfiguration	231, 234
Angeregter Zustand	6
anomales Moment	78
Antikommutator	162, 275
Anzahloperator	145
asymptotisches Verhalten	175, 203
Austauschenergie	261, 285
Auswahlregel	162, 170
äußeres Feld	141, 214
Bahndrehimpuls	153, 159
Balmerformel	185, 295
Bandenstruktur	190
Basiswechsel	48, 50
Basiszustände	21
Besetzungszahl	271
Besselfunktionen (sphärische)	167
Bindung	173 f.
Bloch, F.	138
Bloch-Siegert-Verschiebung	91
Bogoliubowtransformation	149
Bohr, N.	6, 301
Bohr-Sommerfeldsche Quantenbedingung	213
Bohrscher Radius	142, 180, 184, 205, 207, 219
Bohrsches Magneton	77
Boltzmannkonstante	190
Born, M.	302 f.
Born-Oppenheimer-Näherung	187
Bornsche Näherung	236, 242
Bosegas	277
Bosonen	253, 255, 271 f.
bra-Vektor	49
Breit-Wigner-Formel	250
Charmonium	207
Clebsch-Gordankoeffizienten	168
Comptoneffekt	4, 301

Coulombproblem	179, 287 f.
Darwinterm	182
de Broglie, L.	95, 301
Deuteron	178
Dilatation	113, 204
dimensionslose Variable	142, 171
Dipolnäherung	218
Dirac, P.A.M.	78, 115, 223, 301 f.
direktes Produkt	140
Doppelspaltexperiment	96 f.
double well	206
Drehgruppe	154
Drehimpulsbarriere	181
Drehimpulsbasis	165 f.
Drehung	153
Dualismus Welle-Teilchen	97 f., 106
effektive Kernladungszahl	261
effektives Potential	173, 188, 248
Eichtransformation	216
Eigenfunktionen, Coulomb	181, 298
Eigenfunktionen, Drehimpuls	163 f.
Eigenfunktionen, Oszillator	146
Eigenwerte	83, 88, 119, 132, 199
Eigenzustände	83, 119, 121, 199
Einheit	30, 31
Einstein, A.	4, 15, 301
Einteilchenoperatoren	108 f., 281
Elektronengas	277
Endkonfiguration	231, 234
Energienenner	201
Energieniveaus	6
Erhaltungsgrößen	131 f.
Erwartungswert	120, 127
erzwungene Schwingung	152
Eulerdrehung	69, 70
exponentielle Operatoren	128 f., 229
Feinstruktur	179, 305
Feinstrukturkonstante	184
Fermienergie	277

Fermikugel	278
Fermionen	253, 255, 275 f.
Feynman, R. P.	86, 196, 201, 206
Filtertest	15
Fockraum, Fockzustände	273 f.
Franck-Hertz-Versuch	7
g-Faktor	78
Gaußfunktion	103
Generator	131 f.
Gibbsdrehung	71
goldene Regel	226
Grundzustand	144
Gruppe	39, 69, 80
Gruppeneigenschaft	39
Hamiltonoperator	81, 110, 112, 115 f.
Heisenberg, W.	301 f.
Heisenbergbild	125, 223
Heisenbergsche Bewegungsgleichungen	125
Heisenbergsche Vertauschungsrelation	111
Heliumatom	258
Heliumgas	257
Hellmann-Feynman-Theorem	86, 201, 206
Hilbertraum	53
Hyperfeinstruktur	179
identische Objekte	8
Impulsdarstellung	100, 110, 146, 163 f.
Impulsoperator	108
Impulszustände	94 f.
Impulsübertrag	236
Interferenz	37, 95
Ionisierung	229
Jaynes-Cummings-Modell	151
Jordan, P.	123, 269, 302
kanonische Vertauschungsrelationen	115
kanonischer Impuls	116, 215
Kanäle	231 f.
Kernmagneton	78
ket-Vektor	46
kinetischer Impuls	116, 215

Klasseneinteilung	9, 55
kohärente Zustände	151
Kommutator	110 f., 112, 122
Kondensat	257
Kontinuitätsgleichung	194
Korrespondenzprinzip	213, 214
Kramers, H. A.	301
Kuboformeln	130
Kugelfunktionen	164, 172
Kugelkoordinaten	163
L-S-Kopplung	263
Lambshift	182, 185
Landau, L. D.	306
Landauniveaus	221
Landéfaktor	220
Leiteroperatoren	144, 156, 293 f.
Lichtquanten	3
Lippmann-Schwinger-Gleichung	234 f., 240, 242
magnetische Resonanz	77, 91
magnetisches Moment	64, 78
Matrixelement	83, 108 f.
Mehrkörperproblem	256
Mehrteilchenoperatoren	279
Mehrteilchenzustände	252, 255
Meßapparat	13, 29 f., 51 f., 74, 83, 119
Meßsymbol	28 f.
Meßwerte	119
Mittelwert	120, 127
Moleküle	187 f.
Mølleroperatoren	240
Muonatome	207
Neutroneninterferometer	67
Norm	53
Nullpunktsenergie	145, 150
Observable	10
off-shell	242
on-shell	242
Operator	53, 108 f.
optisches Theorem	248

orthogonal	25, 27
Orthohelium	261
Ortsdarstellung	100, 110, 146, 163 f.
Ortsoperator	108
Ortszustände	95 f.
Oszillator, anharmonischer	206
Oszillator, harmonischer	143 f.
Oszillator, parametrischer	153
Oszillator, sphärischer	173, 177
Oszillatorquant	145, 157, 190
Parahelium	261
parametrischer Oszillator	153
Parität	135, 147, 165, 205
Partialwellen	247, 249
Pauli, W.	58, 179, 217, 304
Paulimatrizen	58 f., 72, 87
Pauliprinzip	253, 267 f.
Periodisches System	267 f.
Permutation	255
Phasen, relative	37
Phasenanalyse	247
Phasenfaktor	37 f.
Photoeffekt	4
Photonen	3, 5, 12 f.
Planck, M.	3, 301
Polarisator	11
Probezustand (trial state)	202 f.
Projektionswahrscheinlichkeit	22, 27
Projektor	17, 24, 65, 94, 107, 120, 241
Präzession	73 f.
Quantelung, Quantisierung, kanonische	115, 125
Quantelung, Quantisierung, "zweite"	271 f.
Quantenfeldtheorie	182, 214, 273 f.
Quantisierungsrichtung	66, 159
Quasienergie	85
Quasiimpuls	137
quasiklassische Näherung	122, 195, 209 f.
quasiperiodische Zustände	85
Quasiteilchen	283

Raumspiegelung	134
Rayleigh, Lord (J. W. Strutt)	202
reduzierte Masse	140
Reflexionskoeffizient	197
Regeneration	34
Reichweite	237, 239
Reihenfolge von Operatoren	112
Resolvente	235, 239, 244
Resonanz	85, 91, 227, 248
Ritz, W.	202
Rotationsquantenzahl	190
Rotator	162
Runge-Lenz-Vektor	179, 287 f., 291
Rutherfordformel	236, 293
Rydbergenergie	142, 180, 289
S-Matrix	243
Schalenmodell	263
Schalenstruktur	268
Schrödinger, E.	302 f.
Schrödingerbild	124, 223
Schrödingergleichung, stationäre	83
Schrödingergleichung, zeitabhängige	81, 118
Schwinger, J.	155, 130
Schwingerordnung	130
selbstadjungiert	48, 58, 119, 171, 181
separables Potential	178, 244
Singulett	261 f., 265
Skala	142
Skalarprodukt	53
spezifische Wärme	190
Spin	66, 154, 157, 217, 254, 305
Spin und Statistik	254
Spinbahnkopplung	182 f.
Spur	59
Starkeffekt	222
stationäre Zustände	76, 82
Stern-Gerlach-Experiment	63 f.
Störung	85, 86, 121
Störungstheorie, stationäre	199

Störungstheorie, zeitabhängige	223
Streuamplitude	233, 292, 307
Streuphasen	246, 292
Streuung	173, 231 f.
Summenregel	114
supraflüssig	257
Supraleitung	286
Symmetrietransformation	131 f.
T-Matrix	241
T-Produkt	224
Termdichte	121, 226
Toda-Potential	206
Transformationsfunktion	31
Transmissionskoeffizient	197
trial state (Probezustand)	202 f.
Triplett	261 f., 265
Tunneleffekt	196, 211, 249
Übergangsrate	227, 233
Übergangswahrscheinlichkeit	85, 121, 307
Überlappungsintegral	265
unitär	38, 75, 80, 200
unitäre Transformation	199
Unschärferelation	104, 123, 308
ununterscheidbar	9, 257 f.
Vakuumpolarisation	182
Valenzbindung	263, 265 f.
Variationsverfahren	202 f.
Vektormodell	160
Vektoroperator	154
Vektorpotential	214
Vertauschung	253
Vertauschungsrelation	111, 115, 126
Vibrationsquantenzahl	190
Virialsatz	113, 205
virtuelle Niveaus	248
vollständig	26, 27, 47
Wahrscheinlichkeit	15 f., 19, 22, 27, 36, 80, 83, 85, 89 100, 102, 120, 256, 307
Wahrscheinlichkeitsamplitude	54

Wahrscheinlichkeitsdichte	100, 193
Wahrscheinlichkeitsstrom(dichte)	194, 232
Wasserstoffatom	179 f.
wasserstoffähnliches Atom	186
Wechselwirkungsbild	127, 223
Wellenfunktion	193, 212, 233, 304
Wellenpakete	102 f., 107
Wigner, E. P.	155, 271
Wirkungsquerschnitt	232
WKB-Näherung	195, 209 f., 221, 306
Yamaguchi-Ansatz	178, 244
Young, Th.	96
Yukawapotential	236
Zeemaneffekt	220
Zeitentwicklung	80 f., 124 f.
zeitgeordnetes Produkt	224, 229
Zentrifugalterm	173, 188
Zerfall	90
Zustand	8 f., 12, 27, 53 f., 65
Zustandsoszillation	89, 90
Zustandsvariable	10
Zustandsvektor	53 f.
Zweizustandssysteme	58, 66 f., 87 f.