

Kursvorlesung Theoretische Physik IV (PTP4)

Quantenmechanik

Sommersemester 2024

Thomas Gasenzer



Kirchhoff-Institut für Physik, Universität Heidelberg

In Teilen auf der Grundlage des Vorlesungsskripts von T. Weigand.

Version vom 28. August 2024

Urheberrechtsvermerk – Die in diesem Skript durch den Autor veröffentlichten Inhalte unterliegen dem deutschen Urheberrecht und Leistungsschutzrecht. Jegliche vom deutschen Urheber- und Leistungsschutzrecht nicht zugelassene Verwertung bedarf der vorherigen schriftlichen Zustimmung des Autors. Inhalte und Rechte Dritter sind als solche gekennzeichnet. Es ist nicht erlaubt, das Skript oder Teile daraus zu bearbeiten, zu übersetzen, zu kopieren oder in elektronischer Form zu speichern und an andere Personen weiterzugeben, weder in Kopie, noch auf elektronischem Wege per Email, auf Speichermedien (z.B. CD, USB-Stick usw.), über Datenbanken oder über andere Medien und Systeme. Lediglich die Herstellung von Kopien und Downloads für den persönlichen, privaten und nicht kommerziellen Gebrauch ist erlaubt.

Copyright Notice – The content and works published in these lecture notes are governed by the copyright laws of Germany. Any duplication, processing, distribution or any form of utilisation beyond the scope of copyright law shall require the prior written consent of the author or authors in question. You may only use these lecture notes for your personal, private, and non-commercial purpose. It is not permitted to edit, translate, copy or save the script or parts thereof in electronic form and pass it on to other people, neither in copy nor electronically by email, on storage media (e.g. CD, USB stick, etc.), via databases or via other media and systems. Only the production of copies and downloads for personal, private and non-commercial use is permitted.

Inhaltsverzeichnis

Vorbemerkungen und Literatur	1
1. Grundlagen der Quantenmechanik	3
1.1. Die Notwendigkeit einer Quantentheorie	3
1.2. Die Polarisation der Photonen	6
1.2.1. Klassische versus quantenmechanische Beschreibung des Lichts	7
1.2.2. Einfache Experimente mit Polarisationsfiltern	8
1.3. Der Raum der quantenmechanischen Zustände	11
1.3.1. Der Zustandsraum als komplexer Vektorraum	12
1.3.2. Skalarprodukt, Norm und dualer Vektorraum	14
1.4. Lineare Operatoren & Observable	18
1.4.1. Die Algebra der Linearen Operatoren	22
1.4.2. Adjungierter Operator und Hermitezität	24
1.5. Messung und Projektion	28
1.5.1. Eigenbasis und Eigenwerte einer Observable	28
1.5.2. Kompatible und inkompatible Observable	30
1.5.3. Erwartungswert, Varianz, Unschärfe	32
1.6. Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion	34
1.6.1. Unendlich-dimensionale Zustandsräume	34
1.6.2. Der quantenmechanische Ortsraum	36
1.6.3. Der Begriff der Wellenfunktion	37
1.7. Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen	39
1.7.1. Aktive Translationen	39
1.7.2. Translationen als Lie-Gruppe	39
1.7.3. Der Impuls als Generator der Translationen	41
1.7.4. Kanonische Kommutatorrelationen und kanonische Quantisierung	42
1.7.5. Darstellung von \hat{p} im Ortsraum	45
1.7.6. Generalisierte Eigenvektoren und Gel'fandsche Raumtripel*	46
1.8. Wellenfunktionen im Impulsraum	48
1.8.1. Wellenfunktion der Impulseigenzustände	48
1.8.2. Zusammenhang von $\psi_\alpha(x)$ und $\phi_\alpha(p)$ für beliebiges $ \alpha\rangle$	49
1.8.3. Gaußsches Wellenpaket	50
2. Quantendynamik	52
2.1. Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung	52
2.2. Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator	58
2.2.1. Schrödingergleichung im Ortsraum	58
2.2.2. Beispiel eines kräftefreien Teilchens	60
2.2.3. Propagator	64
2.3. Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung	65
2.4. Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild	68
2.4.1. Heisenbergbild und Bewegungsgleichung für Operatoren	68

2.4.2.	Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem	70
2.4.3.	Basis-Kets im Heisenberg-Bild	72
3.	Eindimensionale Probleme	74
3.1.	Harmonischer Oszillator	74
3.1.1.	Algebraische Lösung	75
3.1.2.	Ortsraumdarstellung der Energie-Eigenzustände des HO	81
3.1.3.	Direkte Lösung der Ortsraum-Schrödingergleichung	86
3.1.4.	Kohärente Zustände	89
3.2.	Potentialstufen	95
3.2.1.	Stückweise stetige Potentiale	95
3.2.2.	Potentialstufe	96
3.3.	Potentialbarriere und Tunneleffekt	100
3.4.	Potentialtopf	103
3.4.1.	Gebundene Zustände des Potentialtopfs	103
3.4.2.	Grenzfall des unendlich tiefen Potentialtopfs	106
3.4.3.	Streuzustände und Resonanzen	107
4.	Bewegung im Zentralpotential	113
4.1.	Rotationen im \mathbb{R}^3 : Lie-Gruppe und Lie-Algebra	113
4.1.1.	Die spezielle orthogonale Gruppe SO(3) der Drehungen als Lie-Gruppe	114
4.1.2.	Von der Lie-Gruppe zur Lie-Algebra	115
4.2.	Von der Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ zum Drehimpulsoperator	118
4.3.	Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses	120
4.4.	Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen	125
4.5.	Lösung der Schrödingergleichung im Zentralpotential	130
4.5.1.	Allgemeine Behandlung von Zentralpotentialen	130
4.5.2.	Das Coulombpotential	132
5.	Bewegung im elektromagnetischen Feld	141
5.1.	Spin	141
5.1.1.	Phänomenologie des Spins	141
5.1.2.	Ontologie des Spins & Gesamtdrehimpuls	144
5.1.3.	Spin in der Relativitätstheorie und Quantenstatistik	149
5.2.	Addition von Drehimpulsen	154
5.2.1.	Clebsch-Gordan-Koeffizienten	154
5.2.2.	System aus zwei Spin-1/2 Zuständen	157
5.2.3.	Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses aus Bahndrehimpuls und Spin ($s = 1/2$)	158
5.3.	Kopplung an das elektromagnetische Feld	159
5.3.1.	Schrödinger-Gleichung im elektromagnetischen Feld	159
5.3.2.	Magnetische Momente und Pauli-Gleichung	160
5.3.3.	Lokale Eichinvarianz und kovariante Ableitung	163
5.4.	Topologische Effekte in der Quantenmechanik	168
5.4.1.	Aharonov-Bohm Effekt	168
5.4.2.	SO(3) versus SU(2) und Berry-Phasen*	171
6.	Näherungsmethoden	173
6.1.	Stationäre (Rayleigh-Schrödinger) Störungstheorie	173
6.1.1.	Nicht degenerierter Fall	174
6.1.2.	Degenerierter Fall	177

6.1.3.	Ritzsches Variationsverfahren	179
6.2.	Relativistische Korrekturen zum Energiespektrum des Wasserstoffatoms – Feinstruktur	179
6.2.1.	Relativistische Korrektur zur kinetischen Energie	180
6.2.2.	Spin-Bahn-Kopplung	181
6.2.3.	Darwin-Term	183
6.3.	H-Atom im äußeren Feld: Zeeman- und Stark-Effekt	185
6.3.1.	Zeeman-Effekt	185
6.3.2.	Stark-Effekt	186
6.4.	Zeitabhängige Störungstheorie	187
6.4.1.	Wechselwirkungsbild	187
6.4.2.	Sudden Approximation	189
6.4.3.	Übergänge 1. Ordnung und Fermis Goldene Regel	190
6.4.4.	Elektrische Dipolübergänge in Atomen*	194
7.	Einführung in die Theorie der Pfadintegrale	203
7.1.	Die Feynmansche Pfadintegral-Darstellung	203
7.1.1.	Die Greensfunktion des Schrödingeroperators	203
7.1.2.	Feynmans Pfadintegralformel	206
7.1.3.	Kontinuumslimites: Pfadintegral der Schrödinger-Mechanik	207
7.2.	Sattelpunkts-Entwicklung des Pfadintegrals*	210
7.2.1.	Freier Schrödinger-Propagator	210
7.2.2.	Gel'fand-Yaglom-Methode	213
7.2.3.	Bedeutung der Quantenfluktuationen am Beispiel des Schrödingerpropagators	215
7.3.	Wirkungswellen*	216
7.3.1.	Exkurs: Kleine Erinnerung an Hamilton-Jacobi	217
7.3.2.	Eikonaltheorie der Optik	219
7.3.3.	Heuristische Ableitung der Schrödinger Gleichung:	220
7.4.	Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Näherung	221
7.4.1.	WKB-Phase	221
7.4.2.	Bohr-Sommerfeld-Quantisierung*	222
8.	Streutheorie	224
8.1.	Streuung eines Wellenpaketes und stationäre Zustände	224
8.1.1.	Wellenpaket	224
8.1.2.	Formale Lösung der stationären Schrödingergleichung	225
8.1.3.	Streuung eines Wellenpakets	227
8.2.	Streuquerschnitt	228
8.3.	Partialwellen-Analyse*	229
8.3.1.	Kontinuumslösungen im sphärischen, stückweise konstanten Potential	230
8.3.2.	Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen	232
8.3.3.	S-Matrix und Streuphase	233
8.4.	Optisches Theorem	235
9.	Zustand und Messprozess	236
9.1.	Dichtematrix	236
9.1.1.	Reine und gemischte Gesamtheiten	236
9.1.2.	Partielle Spur gekoppelter Systeme	241
9.2.	Der allgemeine Messvorgang	243
9.2.1.	Von Neumanns Formulierung des Messvorgangs	243

9.2.2. Dekohärenz	245
9.3. EPR-Argument und Bellsche Ungleichung	247
9.3.1. Einstein-Podolsky-Rosen-Argument und Nichtlokalität	248
9.3.2. Bellsche Ungleichung	249
A. Funktionale Ableitungen und Integrale	252
A.1. Funktionalableitungen	252
A.2. Funktionale Taylor-Entwicklung	253
A.3. Funktionalintegrale	253
Anhang	252
Bibliographie	256

Vorbemerkungen & Literatur

Bei diesem Vorlesungsskript handelt es sich um eine Zusammenfassung meiner Aufzeichnungen im Rahmen der Kursvorlesung Theoretische Physik IV (PTP4), Quantenmechanik an der Universität Heidelberg. In Teilen bildet die Grundlage dieses Skripts das aus den Vorlesungsnotizen von Prof. Dr. Timo Weigand im SS 2011 von David Breyel erstellte Skript, welches für die vorliegende Version überarbeitet und durch einige Abschnitte und Kapitel ergänzt wurde. Ein besonderer Dank gilt Jonathan Förste, Dominik Ludwig, Michael Meyer und Ido Siovitz für die technische wie inhaltliche Überarbeitung bzw. Erstellung dieses Skripts. Darüberhinaus möchte ich Sven Spachmann und Paul Oberholte für viele Anmerkungen und Korrekturen danken.

Das Vorlesungsskript erhebt nicht den Anspruch einer literarischen Anforderungen genügenden, originären geschweige denn umfassenden Darstellung der Quantenmechanik, sondern soll lediglich die wesentlichen Inhalte der Vorlesung zusammenfassen und in einigen Zusatzabschnitten Hintergrund-Information und weiterführende Themen zusammentragen. Die Darstellung geht daher z.T. etwas weiter über den konkret in der Vorlesung abgehandelten Stoff hinaus. Diese Ergänzungen sind für entsprechend interessierte Leser*innen zur Vertiefung gedacht und sind soweit wie möglich durch kleinere Schriftgröße vom übrigen Text abgesetzt bzw. durch einen Stern* hinter der Überschrift gekennzeichnet.

Die Vorlesung und das Skript bedienen sich folgender Quellen, ohne daß diese im Text stets im einzelnen kenntlich gemacht sind:

- G. Baym, Lectures on Quantum Mechanics. Westview, Boulder, CO, u.a., 2010.
- P. A. M. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press, Oxford University Press, 2010.
- R. Fitzpatrick: Quantum Mechanics (<http://farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/389.pdf>)
- C. J. Isham: Lectures on Quantum Theory. Imperial College Press, London, 1995.
- J. J. Sakurai, J. Napolitano: Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley, Boston u.a., 2011.
- F. Schwabl, Quantenmechanik (QM I). Springer, Berlin Heidelberg, 7. Aufl., 2007.

Empfohlene Literatur zum Studium der Quantenmechanik umfasst darüberhinaus beispielsweise

- E. Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie. Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt, 1974.
- T. Fliessbach: Quantenmechanik, Lehrbuch zur Theoretischen Physik III. Springer, Berlin u.a., 2008.
- M. Kreuzer: Quantum Theory (<http://hep.itp.tuwien.ac.at/kreuzer/QT.html>).
- A. Messiah: Quantenmechanik 1, 2. De Gruyter, Berlin u.a., 1991.
- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1+2. Quantenmechanik. Springer, Berlin u.a., 2009, 2012.

- R. Shankar: Principles of Quantum Mechanics. Springer, Berlin u.a., 1994.

Die Autoren sind dankbar für Anmerkungen, Verbesserungsvorschläge und Korrekturen, wenn möglich per email an t.gasenzer@uni-heidelberg.de.

Heidelberg, 21. November 2024

1. Kinematische & mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

1.1. Die Notwendigkeit einer Quantentheorie¹

“Eine Darstellung eines jeden Gebiets der Physik wird unausweichlich Begriffe enthalten, welche, obwohl nicht definiert, einen Teil der allgemeinen wissenschaftlichen Grundlagen der Zeit und der Kultur bilden, in denen sie verwendet werden. Die Sinnhaftigkeit und Anwendbarkeit solcher Begriffe wird gemeinhin für ‘offensichtlich’ gehalten und scheint weiterer Erklärung nicht wert zu sein. Von Zeit zu Zeit kommen jedoch neue Konzepte auf, welche diese vorherbestimmte Ordnung von *a priori* Wahrheiten herausfordern und eine radikale Neubewertung der Grundlagen des betreffenden Gebiets notwendig machen. In der Physik des 20. Jahrhunderts sind die zwei bedeutenden Beispiele solcher Paradigmenwechsel die Relativitätstheorie und die Quantentheorie. Erstere hatte eine größere Neubewertung der Konzepte von Raum und Zeit zur Folge; letztere fordert den Begriff der Existenz selbst heraus.”¹

Welche “offensichtlichen”, nicht definierten, scheinbar harmlosen und unverfänglichen Begriffe der “klassischen” Physik sind es, deren “Wahrheit” infolge des mit der Quantentheorie erfolgten Paradigmenwechsels angefochten werden? Betrachten wir für die Beantwortung dieser Frage als Beispiele die folgenden Begriffe:

System – Observable – Eigenschaft – Messung – Zustand – Kausalität.

“In der klassischen Physik stehen diese Begriffe im großen und ganzen im Einklang mit der allgemeinen Auffassung von Realität, so dass Ihre Bedeutung in der Tat als ‘offensichtlich’ und relativ unstrittig angesehen werden kann. In der Quantentheorie hat sich die Situation jedoch radikal verändert, und, insgesamt genommen, hat die Bedeutungsverschiebung dieser grundlegenden Vorstellungen eine radikal veränderte Sicht auf die Realität hervorgebracht.”¹

Um das Verständnis dieser Neuerungen zu erleichtern, betrachten wir kurz einige grundlegenden Elemente der philosophischen Sichtweise der klassischen Physik: Fangen wir mit dem Wort “System” an, welches in allen Bereichen der Physik für das Objekt verwandt wird, welches Gegenstand der Beobachtung ist. Was jedoch, zuallererst, ist ein Objekt? Wir könnten auch scheinbar unschuldig fragen:

Was ist ein Ding?

Diese alte philosophische Frage fordert uns, zusammen mit der Frage nach der Natur unseres *Wissens* von den Dingen, bis heute heraus. Das Problem in dieser Frage fängt schon beim Wörtchen “ist” an. Unsere gewohnte Vorgehensweise könnte drei mögliche Antworten auf die Frage “Was ist ein Ding” hervorbringen:

- Wirkliche Objekte: Der Tisch, die Kreide, das Sandkorn, ..., das Atom?
- Zustände: Das Wachsein, das Wohlsein, ..., nach der Vorlesung: die Müdigkeit, ...

¹Nach C. J. Isham, Lectures on Quantum Theory, Imperial College, Winter Term 1992. Übers. d. Autors.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

– Alles, was nicht Nichts ist: Die Farben, die Schönheit, ...

Die Physik freilich kennt nur den ersten Dingbegriff, den der Objekte mit äußeren und inneren Eigenschaften. In der Naturwissenschaft denken wir zuvorderst also an bestimmende Eigenschaften eines Objekts. Diese Auffassung bildet den Kern des klassischen Realismus (auch naiven, direkten, oder Common-Sense Realismus), einen der zentralen Standpunkte in der philosophischen Erkenntnistheorie.

Damit wird der klassische Dingbegriff offenbar, welcher uns bis hinein in unsere Sprachstruktur (Subjekt – Prädikat – Objekt) prägt: Eigenschaften von Dingen bestimmen unser Verständnis von “Wahrheit” und insbesondere, was es bedeutet, eine “wahre” Aussage zu machen. Unser immerwährendes Ziel ist, Wissen über die Eigenschaften der Objekte und damit Erkenntnisse über Wahrheit zu erlangen. Doch wie können wir uns dieses Wissen aneignen? Diese Frage führt direkt zum Begriff der Messgrößen oder Observablen: Wahres, quantitatives Wissen über ein physikalisches System erlangen wir durch den Akt einer Messung, das heißt, durch irgendeinen physikalischen Vorgang, in welchem der numerische Wert einer Observablen bestimmt und aufgezeichnet werden kann.

Hinter dieser Auffassung steht die in der wissenschaftlichen Methodik vorausgesetzte Möglichkeit der Trennung von Subjekt und Objekt bei einer Messung. Mitgedacht ist dabei stets eine willkürliche Trennung eines Teils der natürlichen Welt von ihrer Umgebung. Diese Trennung ist allein schon deshalb notwendig, damit theoretische und experimentelle Untersuchungen ungestört von jeglichem Einfluß des restlichen Universums vonstatten gehen können. Aus der Perspektive der klassischen Physik hat eine solche Trennung von Beobachter bzw. Meßapparat und beobachtetem System keine grundlegende Bedeutung. Beide sind Teile einer einheitlichen, objektiv existierenden externen Welt, in der sie denselben Status haben und durch dieselben physikalischen Gesetze beschreibbar sind.

Nichts besonderes ist gleichsam auch an den Konzepten von “Messung” und “Meßgröße”. Der Grund hierfür ist einfach, dass das System den Wert der gemessenen Observable zum Zeitpunkt der Messung *besitzt*. Eigenschaften bzw. Attribute sind intrinsisch mit dem Objekt verbunden, während dieses unabhängig von der äußeren Welt existiert. Der Meßvorgang ist in diesem Kontext als eine spezifische Wechselwirkung von Meßapparat und System zu verstehen, welche so gewählt ist, dass sie den Wert der gewünschten Größe sichtbar macht.

Die hier skizzierte, allgemeine “Sicht der Dinge” bestimmt weiterhin, welche Bedeutung wir der Zeit zumessen. Wir sagen: Die Dinge “ändern sich mit der Zeit”, womit wir meinen, dass sich die internen oder externen Eigenschaften eines Objekts ändern. Darüberhinaus nimmt man in der klassischen Physik an, dass diese Änderungen deterministisch vonstatten gehen. Das Konzept der Eigenschaften und der Art und Weise, in der diese sich zeitlich ändern, ist wissenschaftlich mit dem Begriff des Zustands eines Systems erfaßt: Eine Vorstellung, welche gut zum philosophischen Standpunkt des einfachen Realismus passt, ja letztlich aus diesem hervorgeht.

In der klassischen Physik gilt:

1. Die Kenntnis des Zustands zu irgendeiner Zeit reicht aus, um alle Eigenschaften des Systems zu bestimmen, d.h., sie genügt, um die Resultate aller möglichen Messungen, welche zu dieser Zeit gemacht werden können, vorherzusagen.
2. Der Zustand zur Zeit t_2 ist eindeutig durch den Zustand zu jeder früheren Zeit (oder späteren) Zeit t_1 bestimmt.² Es ist dieses “**Kausalitätsprinzip**”, durch das ein strikter Determinismus seinen Weg in die Physik findet.

²Im Kontext der klassischen Chaostheorie ist diese Aussage entsprechend zu präzisieren.

Die **klassische Mechanik** liefert also eine *deterministische* Beschreibung der Physik. Ihr liegt das Konzept der Punktteilchentrajektorie zu Grunde. Ausgehend von einer genauen Kenntnis der Anfangsbedingungen – d.h. der verallgemeinerten Koordinaten $(\mathbf{q}, \mathbf{p})|_{t=t_0}$ – erlaubt sie eine vollständige Beschreibung der Trajektorie zu allen Zeiten, z.B. unter dem Einfluss einer Kraft. Die Newtonsche Gleichung

$$m \frac{d^2 q}{dt^2} = F\left(q, \frac{dq}{dt}\right) \quad (1.1.1)$$

läßt sich als System zweier gekoppelter Differentialgleichungen *erster* Ordnung für das Paar (\mathbf{q}, \mathbf{p}) kanonisch konjugierter Größen schreiben,

$$m \frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = F\left(q, \frac{p}{m}\right), \quad (1.1.2)$$

deren Lösungen durch die Anfangswerte dieser Größen vollständig bestimmt sind. Der Raum der Zustände dieses Systems läßt sich also mit dem zweidimensionalen reellen Vektorraum \mathbb{R}^2 identifizieren. Analog ist der Raum der Zustände von N Punktteilchen, welche sich in 3 Raumdimensionen bewegen, der \mathbb{R}^{6N} .³ Wir bemerken dabei, dass die Masse m ebenso wie die funktionale Form der Kraft F keine (internen) Observablen sind, sondern einen Teil der Spezifikation des Systems darstellen. Sie sind vielmehr “intrinsische” Observable, also solche, welche unabhängig vom Zustand des Systems sind, während q und p “kontingente” Observable darstellen, deren Wert zeitabhängig ist sowie abhängig von einer speziellen Wahl zu einem Anfangszeitpunkt. Die Werte beider Typen von Observablen stellen Eigenschaften des Systems dar, welche von diesem *besessen* werden.

Das hier skizzierte Bild mag im Einklang mit der allgemeinen Erfahrung stehen. Dennoch kamen mit den Ideen der **Quantentheorie** alle seine Aspekte zur Überprüfung. In der konventionellen Darstellung und Interpretation der Quantentheorie wird eine scharfe Trennlinie zwischen System und Beobachter bzw. Meßapparat gezogen. Das Hauptaugenmerk liegt nun auf dem Akt der *Messung* und den Resultaten für die Werte der gemessenen Observable. Das Konzept der von einem individuellen System objektiv “besessenen” Eigenschaften ist nur schwer aufrechtzuerhalten. Beispielsweise ist es im allgemeinen nicht länger sinnvoll zu sagen, dass der Grund dafür, dass eine Messung einer bestimmten Größe einen gegebenen Wert ergibt, ist, dass die betreffende Eigenschaft diesen Wert eben zum Zeitpunkt der Messung “besitzt”. Insofern es überhaupt sinnvoll ist, die Quantenmechanik auf einzelne Objekte zu beziehen, ist ein ‘Ding’ jetzt bestenfalls als ein Bündel *latenter* bzw. *potentieller* Eigenschaften aufzufassen, Eigenschaften, welche erst durch den Akt der Messung zur Existenz (im Sinne der klassischen Physik) gebracht werden.

Das Konzept des ‘Zustands’ spielt weiterhin eine wichtige Rolle. Die Bedingung (1) kann hierbei jedoch nur noch operational aufgestellt werden, im Sinne von genauen Vorhersagen für die Resultate möglicher Messungen. Dabei sagt die Quantentheorie lediglich noch Wahrscheinlichkeiten für Meßergebnisse, jedoch keine konkreten Meßwerte selbst voraus. Aufrecht steht weiterhin die Auffassung, dass der Zustand der Träger der kausalen Struktur der Theorie ist. Insbesondere erlaubt die Spezifikation des Zustandes zu einer Zeit die Bestimmung desselben zu jeder anderen Zeit. Man beachte jedoch, dass es jetzt die Wahrscheinlichkeiten für Meßresultate sind, welche sich in deterministischer Weise entwickeln, nicht jedoch die eigentlichen Meßwerte selbst.

Konkret führen die folgenden Probleme mit der klassischen Beschreibung der Physik zur *Notwendigkeit einer erweiterten Theorie*, letztlich der Quantentheorie:

- Frühe empirische Erkenntnisse, welche sich als mit der klassischen Beschreibung nicht vereinbar

³Der Zustandsraum eines klassischen Systems muß jedoch kein Vektorraum sein. Zum Beispiel ist der Zustandsraum für ein Teilchen, welches auf eine Kreisbewegung eingeschränkt ist, ein Zylinder.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

erwiesen, betrafen insbesondere⁴

- die Atomspektren, welche sich nicht mittels fundamentaler Oszillatoren beschreiben lassen, welche in beliebigen Harmonischen anregbar wären. Ein solches Bild führt zur sog. Ultraviolett-Katastrophe, welche im Widerspruch zu endlichen spezifischen Wärmen z.B. der Festkörper steht.
 - die Stabilität der Atome: Eine im Newtonschen Sinne klassische Trajektorie eines Elektrons um den Atomkern würde eine kontinuierliche Abstrahlung von Energie erzwingen, was im Widerspruch zur Beobachtung steht.
 - den Welle-Teilchen-Dualismus: Auf der einen Seite legt der Photoeffekt den *korpuskularen* Charakter des Lichts nah (Hertz 1887, Einstein 1905; auch die Compton-Streuung, 1925). Andererseits kann die Beugung von Licht am einem Gitter nur durch den Wellencharakter des Lichts erklärt werden. Umgekehrt verhält sich Materie (z.B. Elektronen) in bestimmten Situationen, etwa beim Durchgang durch ein Kristallgitter, wie eine Welle (de Broglie 1923 [2], Experimente von Davisson und Germer, 1927 [3], Thomson, 1928 [4]).⁵
- Philosophische Überlegungen (nach P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Chapter 1):

„Mikro“ und „Makro“ können nicht nur relative Konzepte sein. Wäre dies umgekehrt der Fall, so käme die Erklärung des „Großen“ durch das „Kleine“ zu keinem Abschluß. Umgekehrt folgt daraus, dass die Größe eines Systems eine absolute Bedeutung haben muß.

Physikalisch-empirische Erkenntnis beruht grundsätzlich auf Resultaten von Messungen, welche prinzipiell in das beobachtete System eingreifen. Aus der Existenz einer absoluten Bedeutung von Größe würde damit auch die Erkenntnis folgen, dass es eine Grenze der Schwachheit der Störung eines Systems bei einer Messung geben muß. Ein System ist dann „groß“ im absoluten Sinne, wenn die Messung seines Zustands diesen kaum beeinflusst. Für kleine Systeme gibt eine *prinzipielle, maximale Auflösung* der Messung. Diese muß durch eine Naturkonstante charakterisiert sein. Wir werden im Folgenden sehen, dass diese Konstante durch das *Plancksche Wirkungsquantum*

$$h = 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.1.3)$$

gegeben ist.⁶

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

1.2. Die Polarisation der Photonen

Als Beispiel für das fundamental Neue an der quantenmechanischen Beschreibung betrachten wir die Theorie des Lichts. Anhand einfacher Polarisierungsexperimente werden wir heuristisch-induktiv die wesentlichen Grundzüge der neuen Theorie kennenlernen. Unsere Vorgehensweise wird vom Versuch geleitet sein, die Resultate dieser Experimente mit dem angesprochenen Teilchencharakter des Lichts in

⁴Eine Übersicht über einige der wichtigsten Experimente findet sich beispielsweise in F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Kapitel 1.2 [1].

⁵Max Planck, am 23.04.1938, aus Anlaß der Verleihung der Max-Planck-Medaille an Louis Prince de Broglie: „Die Kühnheit dieser Idee war so groß – ich muss aufrichtig sagen, dass ich selber auch damals den Kopf schüttelte dazu, und ich erinnere mich sehr gut, dass Herr Lorentz mir damals sagte im vertraulichen Privatgespräch: ‘Diese jungen Leute nehmen es doch gar zu leicht, alte physikalische Begriffe beiseite zu setzen!’ Es war damals die Rede von Broglie-Wellen, von der Heisenbergschen Unschärferelation – das schien damals uns Älteren etwas sehr schwer Verständliches.“

⁶Der hier in SI-Einheiten angegebene Wert von h ist exakt, da die SI-Einheiten u.a. durch h definiert sind.

Einklang zu bringen. Dies führt uns direkt zu den Begriffen des Zustands, der Superposition von Zuständen, sowie zu einer probabilistischen Interpretation der Theorie. Diesen Eigenschaften werden wir eine mathematische Form geben und zu allgemeinen Postulaten erheben.

1.2.1. Klassische versus quantenmechanische Beschreibung des Lichts

Im **klassischen Bild** kann man Licht im einfachsten Fall als eine transversale, elektromagnetische Welle darstellen. Betrachten wir eine Lichtwelle, welche sich im Vakuum in z -Richtung ausbreitet und transversal dazu polarisiert ist:⁷

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= E_x(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_x + E_y(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_y = \begin{pmatrix} E_x(\mathbf{r}, t) \\ E_y(\mathbf{r}, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{e}_z \times \mathbf{E} = \frac{1}{k}(\mathbf{k} \times \mathbf{E}), \quad (\text{Faraday}) \\ E_i(\mathbf{r}, t) &= \text{Re} \left[E_i^{(0)} e^{i(kz - \omega t)} \right], \quad i \in \{x, y\}, \quad E_z(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \text{wirin} \\ \mathbf{r} &= (x, y, z)^T, \quad \mathbf{k} = k \mathbf{e}_z, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu = c|k|, \quad \text{und} \quad E_i^{(0)} = |E_i^{(0)}| e^{i\alpha_i}. \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

Hierbei stellen die α_i konstante Phasen dar. Die Polarisation dieser Welle ist nun über das Verhältnis von E_x und E_y definiert, z.B.

- $E_y = 0 \Leftrightarrow$ lineare Polarisierung in x -Richtung,
- $E_y = E_x \Leftrightarrow$ lineare Polarisierung in 45° -Richtung,
- $E_y^{(0)} = iE_x^{(0)} \Leftrightarrow$ rechts-zirkulare Polarisierung (Phasendifferenz $\alpha_x - \alpha_y = \pi/2$).

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

- *Photoelektrischer Effekt*: Die Energie von durch Licht aus einem Festkörper freigesetzten Elektronen hängt lediglich von der *Wellenlänge* des Lichts ab (Experimente von Philipp Lenard, 1900).

Als *Photon* γ bezeichnet man das *minimale Energiequant*, welches das Licht transportiert. Postuliert wurde diese Quantisierung des Lichts von Einstein in dessen *annus mirabilis* 1905, um den Photoeffekt erklären zu können. Für Licht der Frequenz ν ist die Energie eines Photons

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \text{wobei} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.2.5)$$

Das Plancksche Wirkungsquantum $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{Js}$ (exakter Wert: Gl. (1.1.3)) bestimmt die prinzipiell maximal mögliche Auflösung einer Messung, d.h., die mögliche Lokalisierung im Phasenraum. Wir bemerken, dass die Einheit eines Phasenraumelements $[p \cdot x] = \text{kg m}^2 \text{s}^{-1} = \text{J} \cdot \text{s}$ ist. h definiert also die *absolute Skala von 'klein'*.

- Photonen haben *korpuskularen*, d.h. Teilchen-Charakter. Sie sind *unteilbar*, d.h. sie stellen die nach Dirac in Kapitel 1.1 beschriebene *kleinste Einheit* des Lichts (im absoluten Sinne) dar.

⁷Hier sind Gaußsche Einheiten gewählt, in denen $\epsilon_0 = 1/4\pi$ und $\mu_0 = 4\pi/c^2$.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

- Der Teilchencharakter wird experimentell manifest bei kleinsten Intensitäten: Der Detektor registriert einzelne, diskrete Klicks bei Absorption *einzelner Photonen*. Altmodisch ausgedrückt: Der Photoeffekt zusammen mit der Silberhalogenid-Reaktion $\text{Ag}^+ + e^- \rightarrow \text{Ag}$ hat die punktuelle Schwärzung einer Fotoplatte zur Folge. Insbesondere gilt der Zusammenhang

$$\text{Lichtintensität } I \propto \text{Anzahl der Photonen.} \quad (1.2.6)$$

1.2.2. Einfache Experimente mit Polarisationsfiltern

Experiment 1

Betrachte den Durchgang der sich in z -Richtung ausbreitenden Lichtwelle (1.2.4) mit allgemeiner transversaler Polarisation, $\mathbf{E}_{\text{in}} = (E_x, E_y)^T$ durch einen Polarisationsfilter, der nur in x -Richtung polarisiertes Licht durchlässt.

Klassisches Bild

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

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{|\mathbf{E}_{\text{out}}|^2}{|\mathbf{E}_{\text{in}}|^2} = \frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2}. \quad (1.2.7)$$

Dieses Resultat läßt sich leicht aus der Energiedichte oder alternativ aus der Energiestromdichte der Welle ableiten. Die Energiedichte der e.m. Welle (1.2.4) lautet

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2)(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[|E_x^{(0)}|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_x) + |E_y^{(0)}|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_y) \right], \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

während die Energiestromdichte derselben Welle ist durch den Poynting-Vektor

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B})(\mathbf{r}, t) = \frac{c}{4\pi} \sum_{i=x,y} |E_i^{(0)}|^2 \cos^2(\omega t - kz + \alpha_i) \mathbf{e}_z \quad (1.2.9)$$

und damit durch $\mathbf{S} = c\varepsilon\mathbf{e}_z$ gegeben ist. Es ergibt sich also das wesentliche Resultat, dass die relativen Intensitäten (auslaufend zu einlaufend) den Betragsquadraten der jeweiligen Feldstärke-Vektoren entsprechen. Dies wird uns in den Definitionen der Wahrscheinlichkeiten in der Quantenmechanik wieder begegnen.

Quantenmechanisches Bild

Im qm. Bild läßt der Polarisationsfilter nur ganze Energiequanten, d.h. Photonen hindurch.⁸ Ein Photon kann also entweder den Polarisator als Ganzes passieren, oder es wird als Ganzes absorbiert. Das Verhältnis der Intensitäten muss als Wahrscheinlichkeit

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{\# \text{ der auslaufenden Photonen}}{\# \text{ der einlaufenden Photonen}} = \frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2} =: P_x, \quad 0 \leq P_x \leq 1, \quad (1.2.10)$$

⁸Eigentlich müßten wir hier den Schritt von der klassischen Elektrodynamik zur Quantenelektrodynamik machen, einer Quantenfeldtheorie, die sich, im klassischen Limes, mit dem Aufbau elektromagnetischer Wellen aus vielen Photonen beschäftigt. Aber selbstredend soll dies, gleich hier zu Anfang ihrer Begegnung mit Quantentheorie, nicht weiter Thema sein. Dennoch ist es im Folgenden sehr instruktiv, den Blick auf ein einzelnes Photon zu senken und sich dabei vorzustellen, dass es elektromagnetische Eigenschaften wie die bekannten Feldstärken und deren Polarisation besitzt.

interpretiert werden. P_x ist zunächst eine relative Häufigkeit für das Ensemble von Photonen. Da einzelne Photonen nur als Ganze durchgelassen werden können, sind wir gezwungen, wenn auf ein solches Photon bezogen, P_x als die *Wahrscheinlichkeit*, dass das Photon der Lichtwelle mit Polarisation (E_x, E_y) den z -Polarisator passiert, zu interpretieren. Diese probabilistische Interpretation ist eine unmittelbare Konsequenz aus der Notwendigkeit, die Zerlegung einer Lichtwelle in x - und y -polarisierte Anteile mit der Unteilbarkeit der Photon-Quanten zu vereinbaren. Als Konsequenz aus Einsteins Hypothese, dass die Energie jedes Photons proportional zu dessen Frequenz ist, muß die Zahl der Photonen proportional zur Energie- bzw. Energieflußdichte der elektromagnetischen Welle sein.

Einem einzelnen Photon ordnen wir den normierten *Zustandsvektor* $\hat{\mathbf{E}} = \mathbf{E}/|\mathbf{E}|$, $|\mathbf{E}| = \sqrt{|E_x|^2 + |E_y|^2}$, zu:

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{in}} = \frac{1}{|\mathbf{E}_{\text{in}}|}(E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y) = \mathcal{A}_x \mathbf{e}_x + \mathcal{A}_y \mathbf{e}_y, \quad \text{mit } \mathcal{A}_x, \mathcal{A}_y \in \mathbb{C}, \quad |\mathcal{A}_x|^2 + |\mathcal{A}_y|^2 = 1. \quad (1.2.11)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das einzelne Photon durch den x -Polarisator gelassen wird, lautet damit

$$P_x = |\mathcal{A}_x|^2. \quad (1.2.12)$$

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

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{out}} = \frac{E_x}{|E_x|} \mathbf{e}_x \quad \text{zu.} \quad (1.2.13)$$

Hier sehen wir bereits ein allgemeine Eigenschaft die uns bei Messungen in der Quantenmechanik begegnen wird: Abgesehen von der Normierung ändert sich der Zustandsvektor durch die Polarisationsmessung entsprechend einer Projektion auf die Richtung des Polarisators:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=:\hat{\mathbb{P}}_x} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (1.2.14)$$

worin der *Projektionsoperator* $\hat{\mathbb{P}}_x : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ definiert ist durch

$$\hat{\mathbb{P}}_x^2 = \hat{\mathbb{P}}_x. \quad (1.2.15)$$

Experiment 2

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

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{e}_{x'} &= \cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \phi \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_{y'} &= -\sin \phi \mathbf{e}_x + \cos \phi \mathbf{e}_y \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \cos \phi \mathbf{e}_{x'} - \sin \phi \mathbf{e}_{y'} \\ \mathbf{e}_y &= \sin \phi \mathbf{e}_{x'} + \cos \phi \mathbf{e}_{y'} \end{aligned} \right. . \quad (1.2.16)$$

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

Klassisches Bild

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Im klassischen Wellenbild können wir wie zuvor das elektrische Feld nach dem ersten Polarisator, \mathbf{E}_1 , in seine kartesischen Komponenten hinsichtlich der Basisvektoren $\mathbf{e}_{x'}$, $\mathbf{e}_{y'}$ zerlegen, welche durch die Ausrichtung des zweiten Polarisators definiert sind,

$$\mathbf{E}_1 = E_x \mathbf{e}_x = E_x \underbrace{(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{x'})}_{\cos \phi} \mathbf{e}_{x'} + E_x \underbrace{(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{y'})}_{-\sin \phi} \mathbf{e}_{y'}. \quad (1.2.17)$$

Wiederum schreiben wir somit die vektorwertige elektromagnetische Welle als Summe zweier Basisvektoren, welche jedoch gegenüber der vor dem 1. Polarisator gewählten Basis gedreht ist. Von den Komponenten in x' und y' -Richtung ist nach dem 2. Polarisator die Komponente in y' -Richtung ausgelöscht,

$$\Rightarrow \mathbf{E}_2 = E_x \cos \phi \mathbf{e}_{x'} = (\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{e}_{x'}) \mathbf{e}_{x'}. \quad (1.2.18)$$

Damit ergibt sich für das Verhältnis der Intensitäten der Felder nach zu vor dem 2. Polarisator:

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{|E_2|^2}{|E_1|^2} = |\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{x'}|^2 = \cos^2 \phi. \quad (1.2.19)$$

Quantenmechanisches Bild

Im Teilchenbild ordnen wir dem Photon nach dessen Durchgang durch den x -Polarisator den normierten Zustandsvektor

$$\hat{\mathbf{E}}_1 = \frac{E_x}{|E_x|} \mathbf{e}_x \quad (1.2.20)$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{=\mathcal{A}_x}$

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

$$\hat{\mathbf{E}}_1 = \mathcal{A}_{x'} \mathbf{e}_{x'} + \mathcal{A}_{y'} \mathbf{e}_{y'}, \quad (1.2.21)$$

wobei die jeweiligen Koeffizienten durch

$$\mathcal{A}_{x'} = \hat{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathbf{e}_{x'} \quad \text{und} \quad \mathcal{A}_{y'} = \hat{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathbf{e}_{y'}, \quad (1.2.22)$$

gegeben sind. Aus der Normierung des Vektors $\hat{\mathbf{E}}_1$ folgt in der neuen Basis, dass

$$|\mathcal{A}_{x'}|^2 + |\mathcal{A}_{y'}|^2 = 1. \quad (1.2.23)$$

Bezüglich der neuen Basis sagen wir:

Das Photon $\hat{\mathbf{E}}_1$ ist in *Superposition* von $\mathcal{A}_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $\mathcal{A}_{y'} \mathbf{e}_{y'}$.

Mathematisch bedeutet diese Superposition also die in der Vektorrechnung übliche Darstellung eines Vektors als Summe von Vektoren, die dem betreffenden Vektorraum angehören. Jegliche zwei Vektoren $\mathcal{A}_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $\mathcal{A}_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ können wie üblich addiert werden.

Physikalisch ist die Aussage, dass sich das Photon in einer Superposition von $\mathcal{A}_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $\mathcal{A}_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ befindet, so zu deuten, dass sich das Photon mit der Wahrscheinlichkeit $|\mathcal{A}_{x'}|^2$ so verhält wie ein x' -polarisiertes Photon und mit der Wahrscheinlichkeit $|\mathcal{A}_{y'}|^2$ wie ein y' -polarisiertes Photon. Das heißt, die Wahrschein-

lichkeit, dass sich das in diesem Superpositionszustand befindliche Photon durch den zweiten, also x' -Polarisator durchgelassen wird, ist

$$P_{x'} = |\mathcal{A}_{x'}|^2. \quad (1.2.24)$$

Wichtig ist hierbei, dass sich jedes *einzelne* Photon nach dem x -Polarisator im Zustand $\hat{\mathbf{E}}_1 = \mathcal{A}_x \mathbf{e}_x = \mathcal{A}_{x'} \mathbf{e}_{x'} + \mathcal{A}_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ befindet. Die Zustände einzelner Photonen können demnach Superpositionen verschiedener Vektoren sein.

1.3. Der Raum der quantenmechanischen Zustände

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

Zustand $\leftrightarrow \alpha\rangle$.	(1.3.25)
--	----------

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

Zentrale empirisch untermauerte Einsicht:

Es sei ein Zustand $|\gamma\rangle$ gegeben. Dann existieren stets zwei oder mehrere physikalische Zustände $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., so dass das System als gleichsam in Superposition dieser Zustände aufgefasst werden kann,

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle + \dots \quad (1.3.26)$$

Diese Tatsache bezeichnet man als *Superpositionsprinzip* (Überlagerungsprinzip). Um dieses Prinzip zu verdeutlichen, schreiben wir die Superposition der Photon-Felder aus dem zuvor besprochenen Polarisationsexperiment mittels dieser neuen Notation als:

$$\underbrace{E_x \mathbf{e}_x}_{|\gamma\rangle} = \underbrace{E_x \cos \phi}_{|\alpha\rangle} \mathbf{e}_{x'} + \underbrace{(-E_x \sin \phi)}_{|\beta\rangle} \mathbf{e}_{y'}. \quad (1.3.27)$$

Am Beispiel des Polarisationsexperimentes hatten wir gesehen, dass die Aussage $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$ bedeutet, dass das Photon sich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit wie ein Teilchen im Zustand $|\alpha\rangle$ und mit einer anderen Wahrscheinlichkeit wie ein Teilchen im Zustand $|\beta\rangle$ verhält. Diese Eigenschaften werden wir im Folgenden noch präzisieren.

Die Anwendung dieses aus der Mechanik der Wellen bzw. aus der Mathematik, insbesondere der Linearen Algebra, vertrauten Prinzips auf alle Zustände der Quantenmechanik liefert das Fundament der Quantentheorie. *Wichtig:* Das Superpositionsprinzip gilt bereits für *einzelne Teilchen* (Photonen, Elektronen, etc.).

Anhand unserer bisherigen Betrachtungen stellen wir fest:

- Für die Beschreibung der Polarisation der Photonen hatten wir allgemein $E_x \in \mathbb{C}$ gewählt, um zirkulare Polarisation leichter definieren zu können, für welche z.B. $E_y^{(0)} = \pm i E_x^{(0)}$ gilt.
- Lediglich das *Verhältnis* der Intensitäten und somit das von $E_x \cos \phi$ und $E_x \sin \phi$ spielt eine Rolle für den Anteil der transmittierten Photonen. Das Verhältnis der Amplitudenquadrate und damit

1. Grundlagen der Quantenmechanik

die Wahrscheinlichkeiten sind invariant unter einer simultanen Multiplikation der Amplituden mit einer Phase, $\mathcal{A}_i \rightarrow \mathcal{A}_i \exp\{i\varphi\}$, $i = x, y$.

Wir folgern daraus: Man kann einen Zustand $|\gamma\rangle$ mit $z \in \mathbb{C}$, $|z| = 1$, multiplizieren, so dass $|\gamma\rangle$ und $z|\gamma\rangle$ physikalisch äquivalent sind.

1.3.1. Der Zustandsraum als komplexer Vektorraum

Wir stellen uns nun die Aufgabe, eine mathematische Struktur für die quantenmechanischen Zustände zu identifizieren, welche

- die Superposition von Zuständen sowie
- deren Multiplikation mit $z \in \mathbb{C}$

erlaubt. Die gesuchte Struktur ist die eines **komplexen Vektorraums**.

Definition 1.1. Ein komplexer Vektorraum (\mathbb{C} -VR) ist eine Menge V von Objekten – genannt Vektoren $|\alpha\rangle \in V$ –, welche zusammen mit den Operationen

$$+ : V \times V \rightarrow V \quad (\text{Vektoraddition}) \quad \text{und} \quad \cdot : \mathbb{C} \times V \rightarrow V \quad (\text{Skalarmultiplikation}) \quad (1.3.28)$$

eine abelsche Gruppe mit Nullelement bzgl. der Addition bildet, die durch die Skalarmultiplikation über dem Körper \mathbb{C} der komplexen Zahlen die folgenden Eigenschaften erfüllt:

- ‘+’
- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle \in V$ (Vollständigkeit),
 - $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$ (abelsch),
 - $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \in V$ ist $(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$ (assoziativ),
 - $\exists |\emptyset\rangle \in V : \forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle + |\emptyset\rangle = |\alpha\rangle$ (Neutrales Element),
 - $\forall |\alpha\rangle \in V \exists (-|\alpha\rangle) \in V : |\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = |\emptyset\rangle$ (Inverses Element),
- ‘·’
- $\forall c \in \mathbb{C}$ und $|\alpha\rangle \in V$ ist $c|\alpha\rangle \in V$,
 - $\forall |\alpha\rangle \in V$ ist $1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$ (für Einselement des Körpers),
 - $\forall c, d \in \mathbb{C}$ und $|\alpha\rangle \in V$ ist $(c \cdot d)|\alpha\rangle = c \cdot (d|\alpha\rangle)$ (assoziativ),
 - $\forall c, d \in \mathbb{C}$ und $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$
und $(c + d)|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle + d|\alpha\rangle$ (Distributivgesetze).

Mittels dieser Eigenschaften ist es nun leicht zu zeigen, dass $0|\alpha\rangle = |\emptyset\rangle$. Beweis: Übungen.

Wir fassen unsere bisher gewonnenen Einsichten zusammen im

QM Postulat 1 (vorläufige Fassung)

Der quantenmechanische Zustand ist ein Vektor (genauer: ein Strahl) in einem \mathbb{C} -VR.

Hierzu wollen wir noch folgende Anmerkungen machen:

- Eine weitergehende Begründung, warum der Vektorraum über \mathbb{C} statt über \mathbb{R} zu betrachten ist, werden wir nach Einführung der Zeitentwicklung eines Zustands geben. Wir sehen jedoch schon an

dieser Stelle, dass in der Quantenmechanik der Körper der komplexen Zahlen physikalisch signifikant ist.

- Der Zustand $|\emptyset\rangle$ ist der Nullvektor des VRs, er ist nicht mit dem “Vakuum”, etwa dem Grundzustand des harmonischen Oszillators oder dem Fockraum-Zustand ohne “Teilchen” oder sonstige Anregungen in einer Quantenfeldtheorie zu verwechseln. Während letzterer auf Eins normiert ist, ist die Norm, d.h. die “Länge” des Nullvektors gleich Null.
- Der Zustandsraum in der Quantenmechanik ist im allgemeinen ein (unendlich-dimensionaler) *Hilbertraum*. Hierauf werden wir für die endgültige Fassung des Postulats 1 zurückkommen.

Das Superpositionsprinzip besagt demnach:

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

Wir stellen nun die Frage nach den Bedingungen an die Menge $\{|\alpha_i\rangle\}$, so dass jeder Zustand $|\gamma\rangle$ mittels ihrer darstellbar ist. Wir erinnern uns dazu an die *lineare Unabhängigkeit* von Vektoren sowie an das Konzept einer *Basis* eines Vektorraums.⁹

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

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

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

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

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

Als Übung beweise man mit Hilfe dieser Definitionen den

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

Als Beispiel betrachten wir nochmals die Polarisation des Photons und schreiben die bereits eingeführte Basis als

$$\mathbf{e}_x = |x\rangle, \quad \mathbf{e}_y = |y\rangle. \quad (1.3.29)$$

Jeder Polarisationszustand kann damit als

$$|\hat{\mathbf{E}}\rangle = |\mathbf{E}|^{-1} |\mathbf{E}\rangle = \mathcal{A}_x |x\rangle + \mathcal{A}_y |y\rangle \quad (1.3.30)$$

geschrieben werden, wobei eine Renormierung, $|\mathbf{E}\rangle \rightarrow c \cdot |\mathbf{E}\rangle$, d.h. Multiplikation des Vektors mit einer (komplexen) Konstante c lediglich die Norm ändert und damit die “Länge” des Vektors. Definiert man die Wahrscheinlichkeiten als $P_i = |E_i|^2 / \sum_i |E_i|^2$, so hat die Normierung keinerlei Einfluß auf diese Wahrscheinlichkeiten und damit auf das Meßergebnis, d.h. $c \cdot |\mathbf{E}\rangle \cong |\mathbf{E}\rangle$; die Normierung erlaubt die

⁹Für Elemente der Linearen Algebra siehe z.B. M. Koecher, Lineare Algebra und analytische Geometrie [5].

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Wahrscheinlichkeiten aber kurz als Betragsquadrate der Amplituden \mathcal{A}_i auszudrücken, siehe Gl. (1.2.12)

Bemerkung: Der quantenmechanische Zustandsraum ist i.allg. unendlich-dimensional. Das wird noch genauer behandelt werden. Im Augenblick betrachten wir lediglich Zustände in einem endlich-dimensionalen VR, wie dem zweidimensionalen Raum der Polarisationszustände eines Photons, mit vollständiger Basis $|x\rangle, |y\rangle$.

Wie lauten nun die Amplituden \mathcal{A}_x und \mathcal{A}_y für ein Photon, ausgedrückt in E_x und E_y ?

Zur Erinnerung: Die Energiedichte einer ebenen elektromagnetischen Welle in z -Richtung hatten wir in (1.2.8) bestimmt. Räumliche Integration über ein Vielfaches der Wellenlänge des Photons liefert die totale Energie

$$\mathcal{E}_{\text{tot}}(t) = \int d^3r \varepsilon(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{V}{8\pi} [|E_x^{(0)}|^2 + |E_y^{(0)}|^2]. \quad (1.3.31)$$

Für ein Photon der Frequenz ω kann man $\mathcal{E}_{\text{tot}} = \hbar\omega$ ansetzen, womit $1 = [V/(8\pi\hbar\omega)](|E_x^{(0)}|^2 + |E_y^{(0)}|^2)$ folgt. Hieraus lassen sich die Amplituden

$$\mathcal{A}_i = \sqrt{\frac{V}{8\pi\hbar\omega}} E_i^{(0)}, \quad i = x, y, \quad (1.3.32)$$

des auf Eins normierten Zustandsvektors eines Photons ablesen.¹⁰

1.3.2. Skalarprodukt, Norm und dualer Vektorraum

Erinnern wir uns an Gleichung (1.2.17), der wir entnehmen, dass das Skalarprodukt die Koeffizienten in einer Zerlegung in eine Basis liefert. In der Tat hat das Skalarprodukt eine große Bedeutung für die Quantenmechanik, weshalb wir es zunächst mathematisch etwas genauer beleuchten wollen.

¹⁰Hier sehen wir auch bereits, dass eine ebene Welle eines Photons fester Wellenzahl und Frequenz im unendlichen Raum einer lokal verschwindenden elektrischen Feldstärke entspricht, da ein normierbarer Vektor erfordert, dass alle Komponenten mindestens wie $E_i^{(0)} \sim V^{-1/2}$ für $V \rightarrow \infty$ skalieren. Bevor wir dieses Problem auflösen, nehmen wir hier ein endliches Volumen an.

Definition 1.5. Sei V ein komplexer VR. Dann ist ein Skalarprodukt (SP) eine positiv-definite, hermitesche, sesquilineare Abbildung (lat: sesqui = anderthalb):

$$SP : |\alpha\rangle, |\beta\rangle \mapsto \langle \alpha | \beta \rangle \in \mathbb{C} \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, \quad (1.3.33)$$

für welche gilt, dass

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

Die Abbildung ist sesquilinear, da sie wie oben definiert linear in der zweiten Variable, $|\beta\rangle$, ist, aber nur semilinear ("fast" linear) in der ersten, denn aus den obigen Eigenschaften folgt, dass

$$\langle c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle | \gamma \rangle \rangle = c_1^* \langle \alpha | \gamma \rangle + c_2^* \langle \beta | \gamma \rangle. \quad (1.3.34)$$

Definition 1.6. Ein komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt heißt unitär.

In den Übungen beweisen wir als wichtige Konsequenz der Eigenschaften des Skalarprodukts die

Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle. \quad (1.3.35)$$

Das Konzept des Skalarproduktes erlaubt es, den Überlapp zweier Vektoren – also auch zweier quantenmechanischer Zustände – zu quantifizieren.

Definition 1.7. Zwei Vektoren heißen orthogonal, wenn $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

Eine Basis $\{|\alpha_i\rangle\}$ heißt Orthogonalbasis, wenn sie $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 0$ für $i \neq j$ erfüllt.

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

$$\langle \alpha_j | \gamma \rangle = \langle \alpha_j | \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle \rangle = \sum_{i=1}^k c_i \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle = c_j \langle \alpha_j | \alpha_j \rangle, \quad (1.3.36)$$

woraus wiederum

$$c_j = \frac{\langle \alpha_j | \gamma \rangle}{\langle \alpha_j | \alpha_j \rangle} \quad (1.3.37)$$

folgt. $\langle \alpha_j | \alpha_j \rangle$ bezeichnet die Länge des Vektors $|\alpha_j\rangle$. Dies führt uns zum Begriff der Norm.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Definition 1.8. Eine Norm ist eine Abbildung

$$\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R},$$

so dass

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

Ein VR mit einer Norm heißt normiert.

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

$$\|\alpha\rangle\| := \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}. \quad (1.3.38)$$

Wir werden in den Übungen darauf zurückkommen und u.a. zeigen, dass auch die Norm ein Skalarprodukt induziert. Für gegebenes $|\alpha\rangle$ ist $|\hat{\alpha}\rangle = |\alpha\rangle/\|\alpha\rangle\|$ auf eins normiert.

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

$$\text{ONB} = \{|\alpha_i\rangle \mid \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}\}. \quad (1.3.39)$$

Für eine solche ONB $\{|\alpha_i\rangle\}$ gilt

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \Rightarrow c_i = \langle\alpha_i|\gamma\rangle, \quad (1.3.40)$$

im Einklang mit dem Beispiel der Komponenten verschiedener Polarisation des elektrischen Feldes (1.2.17).

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

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

Offensichtlich ist für jedes Paar f_1, f_2 linearer Funktionen auf V die Funktion $f = \lambda f_1 + \mu f_2$, mit $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$, ebenfalls linear auf V . Daraus folgt sofort, dass die Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{C}$ einen VR bilden:

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

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

1.3. Der Raum der quantenmechanischen Zustände

Für ein Element $|\alpha\rangle \in V$ definieren wir die Funktion

$$f_{|\alpha\rangle} : V \rightarrow \mathbb{C} : f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.3.41)$$

Wir stellen fest :

$$f_{|\alpha\rangle} \in V^* \stackrel{\text{dual}}{\leftrightarrow} |\alpha\rangle. \quad (1.3.42)$$

Beachte dabei, dass aus (1.3.34) und (1.3.41) folgt, dass $f_{c|\alpha\rangle} = c^* f_{|\alpha\rangle}$. Wir führen die folgende, wichtige Notation ein,

$$f_{|\alpha\rangle} \equiv \langle \alpha |, \quad (1.3.43)$$

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

$$f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = \langle \alpha | \beta \rangle = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle), \quad (1.3.44)$$

als "bra-ket" ("bracket"). Manchmal verwendet man auch die Notation

$$\langle \alpha | = (|\alpha\rangle)^\dagger \Rightarrow \langle \alpha | c^* = (c|\alpha\rangle)^\dagger \quad \text{für } c \in \mathbb{C}. \quad (1.3.45)$$

Merke:

- $|\alpha\rangle$ ist als Spaltenvektor aufzufassen;
- $(|\alpha\rangle)^\dagger = \langle \alpha |$ entspricht dann dem zugehörigen Zeilenvektor mit komplex konjugierten Einträgen;
- für orthogonale Vektoren ist $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$;
- eine Orthogonalbasis ist $\{|\alpha_i\rangle | \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 0, i \neq j\}$;

- die 'Länge' eines Vektors $|\alpha_i\rangle$ ist gleich $\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle$;
- die Orthogonalbasis-Zerlegung lautet

$$|\gamma\rangle = \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle, \quad \Rightarrow c_i = \frac{\langle \alpha_i | \gamma \rangle}{\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle}; \quad (1.3.46)$$

- $\| |\gamma\rangle \| := \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ ist die Norm des Vektors $|\alpha\rangle$;
- eine Orthonormalbasis (ONB) ist definiert als $\{|\alpha_i\rangle | \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}\}$.

1.4. Lineare Operatoren & Observable

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

Wir gehen heuristisch vor am Beispiel des Polarisationsexperiments, in dem wir den Zustand als $|\psi\rangle = \mathcal{A}_x|x\rangle + \mathcal{A}_y|y\rangle$ geschrieben hatten. Betrachte als Beispiele die Polarisationszustände

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle), \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle). \quad (1.4.47)$$

Der Vergleich mit dem in Kapitel 1.2.1 beschriebenen klassischen Wellenvektor (1.2.4) zeigt:

$$\begin{aligned} |R\rangle &\leftrightarrow \text{Photon eines rechtszirkular polarisierten Strahls,} \\ |L\rangle &\leftrightarrow \text{Photon eines linkszirkular polarisierten Strahls.} \end{aligned}$$

Betrachten wir wieder Experiment 2:

In der (x', y') Basis, welche durch die Polarisation des 2. Filters festgelegt ist, gilt

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{x'} \\ \mathcal{A}_{y'} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle x'|\psi\rangle \\ \langle y'|\psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle x'|x\rangle & \langle x'|y\rangle \\ \langle y'|x\rangle & \langle y'|y\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle x|\psi\rangle \\ \langle y|\psi\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_x \\ \mathcal{A}_y \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\left[\cos\phi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right]}_{=:R(\phi)} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_x \\ \mathcal{A}_y \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.4.48)$$

d.h., die Amplituden bezüglich der (x', y') Basis gehen aus denen in der (x, y) Basis durch eine Rotationsmatrix hervor, welche sich wie folgt schreiben läßt,

$$\Rightarrow R(\phi) = \mathbb{1}_2 \cos\phi + i S \sin\phi, \quad \text{mit } S = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.4.49)$$

Auf den zweiten Blick erkennen wir hier:

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

sind zwei Eigenvektoren der Matrix S zu den Eigenwerten $\lambda_R = 1$, $\lambda_L = -1$, denn

$$S|R\rangle = |R\rangle, \quad S|L\rangle = -|L\rangle.$$

Damit vereinfacht sich in dieser Basis die Drehung aufgrund des 2. Polarisators zu

$$\begin{aligned} R(\phi) |R\rangle &= (\cos \phi + i \sin \phi) |R\rangle = e^{i\phi} |R\rangle, \\ R(\phi) |L\rangle &= (\cos \phi - i \sin \phi) |L\rangle = e^{-i\phi} |L\rangle. \end{aligned}$$

Nach dem um ϕ gegenüber dem x -Polfilter verdrehten x' -Polfilter ist der Phasenwinkel des rechts/links-zirkular polarisierten Photons um $\alpha_{R/L} = \pm\phi$ verdreht.

Was bedeuten S und dessen Eigenbasis $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ zu Eigenwerten $\lambda_{R/L}$? Eine Antwort auf diese Frage ergibt sich aus einer näheren Betrachtung der Drehimpulseigenschaften einer klassischen elektromagnetischen Welle:

Drehimpuls des e.-m. Feldes eines Photons:¹¹

Aus dem Poynting-Vektor (1.2.9) leiten wir einen Ausdruck für den Drehimpuls des Feldes ab,

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \mathbf{r} \times [\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A})], \quad (1.4.50)$$

wobei wir von einer ebenen Welle im Vakuum ausgehen, so dass $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ und die Felder durch das Vektorpotential ausgedrückt werden können als

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (1.4.51)$$

Wir wenden $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$, integrieren den zweiten sich daraus ergebenden Term in \mathbf{L} partiell und erhalten

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \left\{ \mathbf{E} \times \mathbf{A} + \sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i \right\} \quad (1.4.52)$$

Der erste Term wird zuweilen als der *Spin* des Photons, der zweite als sein *Bahndrehimpuls* bezeichnet, wegen des Drehimpulsoperators $\mathbf{I} = -i(\mathbf{r} \times \nabla)$.¹² Die z -Komponente lautet also

$$L_z = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \left\{ E_x A_y - E_y A_x + \sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla)_z A_i \right\} \quad (1.4.53)$$

Für die sich in z -Richtung ausbreitende ebene Welle (1.2.4) kann man das Vektorpotential laut (1.4.51) schreiben als

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{c}{\omega} \left\{ E_x^{(0)} \sin(kz - \omega t + \alpha_x) \mathbf{e}_x + E_y^{(0)} \sin(kz - \omega t + \alpha_y) \mathbf{e}_y \right\}. \quad (1.4.54)$$

¹⁰s. auch Baym, Lectures on Quantum Mechanics (CRC Press, 2019) [6].

Vorsicht! Die nachfolgende Rechnung stellt *keine* Herleitung qm. Resultate aus der klassischen Elektrodynamik dar!

¹⁰Siehe z.B. J. D. Jackson, Electrodynamics, Aufgabe 7.27ff. [7].

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Der Spin-Term vereinfacht sich damit zu

$$L_z^{\text{Spin}} = \frac{1}{4\pi\omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} \int d^3 r \sin(\alpha_y - \alpha_x) = \frac{V}{4\pi\omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} \sin(\alpha_y - \alpha_x). \quad (1.4.55)$$

Da \mathbf{E} und \mathbf{B} in der x - y -Ebene liegen und \mathbf{A} nur in z -Richtung variiert, kann der Bahndrehimpulsterm wegen $(\mathbf{r} \times \nabla)_z \mathbf{A} = 0$ keine z -Komponente haben. Der Bahndrehimpuls muß also von Verformungen von \mathbf{A} am Rand eines Wellenpakets 'gespeist' sein. In Zylinderkoordinaten, $\mathbf{r} = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)^T$, erhält man

$$(\mathbf{r} \times \nabla)_z = -\sin \varphi \partial_r r + \cos \varphi \partial_\varphi. \quad (1.4.56)$$

Der Bahndrehimpulsterm mittelt sich daher bei der Integrierung über φ in $\int d^3 r = \int r dr dz d\varphi$ heraus, es sei denn das Feld \mathbf{A} besitzt Vortexstruktur, z.B. $\mathbf{A} \sim \exp[i\varphi]$, wie sie mit speziellen Lasern zu erzeugen möglich, für die ebene Welle (1.2.4) jedoch nicht der Fall ist.

Insgesamt bleibt dann der Spin-Term (1.4.55), welcher sich weiter umformen läßt gemäß

$$\begin{aligned} L_z^{\text{Spin}} &= \frac{V}{8\pi i \omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} \left[e^{i\alpha_y} e^{-i\alpha_x} - e^{-i\alpha_y} e^{i\alpha_x} \right] \\ &= \frac{V}{8\pi i \omega} \left[E_x^* E_y - E_x E_y^* \right] \\ &= \frac{V}{8\pi \omega} \left[\left| \frac{E_x - iE_y}{\sqrt{2}} \right|^2 - \left| \frac{E_x + iE_y}{\sqrt{2}} \right|^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.4.57)$$

Ersetzen wir letztlich die Felder durch die Amplituden, s. Gl. (1.3.32), so ergibt sich für die z -Komponente des Drehimpulses eines Photons:

$$L_z = \hbar \left[\left| \frac{\mathcal{A}_x - i\mathcal{A}_y}{\sqrt{2}} \right|^2 - \left| \frac{\mathcal{A}_x + i\mathcal{A}_y}{\sqrt{2}} \right|^2 \right] \quad (1.4.58)$$

Wir schreiben jetzt $|\psi\rangle$ in der $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ -Basis:

$$|\psi\rangle = |R\rangle \langle R|\psi\rangle + |L\rangle \langle L|\psi\rangle \quad (1.4.59)$$

und finden mit (1.4.47):

$$\begin{aligned} \langle R|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle x| - i\langle y|) (\mathcal{A}_x|x\rangle + \mathcal{A}_y|y\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_x \\ \mathcal{A}_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{A}_x - i\mathcal{A}_y) \equiv \mathcal{A}_R, \end{aligned} \quad (1.4.60)$$

$$\langle L|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_x \\ \mathcal{A}_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{A}_x + i\mathcal{A}_y) \equiv \mathcal{A}_L. \quad (1.4.61)$$

Damit erhalten wir

$$L_z = \hbar \left[\langle \psi|R\rangle \langle R|\psi\rangle - \langle \psi|L\rangle \langle L|\psi\rangle \right] \quad (1.4.62)$$

als Drehimpuls des Photons in z -Richtung. Letztlich beobachten wir noch, dass

$$S|\psi\rangle = S|R\rangle \langle R|\psi\rangle + S|L\rangle \langle L|\psi\rangle = |R\rangle \langle R|\psi\rangle - |L\rangle \langle L|\psi\rangle, \quad (1.4.63)$$

und daraus

$$\begin{aligned}\langle \psi | S | \psi \rangle &= [\langle \psi | R \rangle \langle R | + \langle \psi | L \rangle \langle L |] S | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | R \rangle \langle R | \psi \rangle - \langle \psi | L \rangle \langle L | \psi \rangle,\end{aligned}\tag{1.4.64}$$

wobei wir die Normierung $\langle R | R \rangle = 1 = \langle L | L \rangle$ und Orthogonalität $\langle R | L \rangle = 0$ verwenden. D.h.,

$$L_z = \hbar \langle \psi | S | \psi \rangle \equiv \hbar \langle S \rangle$$

$\langle S \rangle$ ist der Erwartungswert von S bezüglich $|\psi\rangle$.

Wir beobachten weiter, dass für die Spezialfälle rechts- bzw. links-polarisierter Photonen gilt:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle = |R\rangle &\Rightarrow L_z = \hbar \\ |\psi\rangle = |L\rangle &\Rightarrow L_z = -\hbar\end{aligned}$$

und damit, dass

$$|\mathcal{A}_{R/L}|^2 = \left| \frac{\mathcal{A}_x \mp i\mathcal{A}_y}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} [|\mathcal{A}_x|^2 + |\mathcal{A}_y|^2 \pm 2 \operatorname{Im}(\mathcal{A}_x^* \mathcal{A}_y)] = \frac{1}{2} [1 \pm 2|\mathcal{A}_x||\mathcal{A}_y| \sin(\alpha_y - \alpha_x)].$$

Für ein einlaufendes Photon mit $|\mathcal{A}_x| = |\mathcal{A}_y| = 1/\sqrt{2}$ und Phasen α_x, α_y gilt somit, dass

$$|\mathcal{A}_{R/L}|^2 = \frac{1}{2} [1 \pm \sin(\alpha_y - \alpha_x)],$$

d.h., je nach Phasendifferenz $\alpha_y - \alpha_x$ der Amplituden variiert die rechts- (links-)zirkulare Polarisationswahrscheinlichkeit des Photons zwischen 0 und 1.

Wir fassen zusammen:

- Das Photon hat mit Wahrscheinlichkeit $0 \leq |\mathcal{A}_{R/L}|^2 \leq 1$, $|\mathcal{A}_L|^2 = 1 - |\mathcal{A}_R|^2$, den Spin $L_z = \pm\hbar$.
- Viele Photonen haben im Mittel den Drehimpuls $L_z = \langle \hbar S \rangle = \hbar |\mathcal{A}_R|^2 - \hbar |\mathcal{A}_L|^2 = \hbar \sin(\alpha_y - \alpha_x)$.

Der Drehimpuls (Spin) L_z des Photons in der ebenen Welle ist also durch die Wahrscheinlichkeitsamplituden \mathcal{A}_R und \mathcal{A}_L bestimmt.

Ganz allgemein gilt in der QM:

- *Messgrößen entsprechen lineare Operatoren \hat{O}* , wie etwa S , welche z.B. durch Matrizen dargestellt werden können (für endlichdim. VRe, $\dim(V) \leq \infty$).
- Das *Spektrum der Eigenwerte* von \hat{O} liefert die möglichen Messwerte (\Rightarrow Photonen: nur 2 diskrete Drehimpulse $\pm\hbar$).
- Die Einzelmessung ergibt mit Wahrscheinlichkeit $|\langle \lambda_i | \psi \rangle|^2$ den Messwert λ_i .
- Die QM kann *definitive Vorhersagen* für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ *nur über Mittelwerte* $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ aus vielen Einzelmessungen machen.

Um dies zu formalisieren, müssen wir die mathematischen Eigenschaften von ‘‘Matrizen’’, d.h. Operato-

1. Grundlagen der Quantenmechanik

ren auf dem VR, verstehen. Dies wird uns erlauben, die Darstellung von Observablen durch geeignete solcher Operatoren zu erraten und zu einem allgemeinen Postulat der QM zu erheben.

1.4.1. Die Algebra der Linearen Operatoren

Definition 1.12. Ein linearer Operator ist eine Abbildung

$$\hat{O} : V \rightarrow V \quad \text{so dass} \quad \hat{O}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{O}|\alpha\rangle + b\hat{O}|\beta\rangle. \quad (1.4.65)$$

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

$$\hat{O} : V^* \rightarrow V^*, \quad \langle \alpha | \rightarrow \langle \alpha | \hat{O}, \quad (1.4.66)$$

was definiert ist durch

$$(\langle \alpha | \hat{O})|\beta\rangle := \langle \alpha | (\hat{O}|\beta\rangle) \Rightarrow \langle \alpha | \hat{O}|\beta\rangle = \langle \alpha | (\hat{O}|\beta\rangle) = (\langle \alpha | \hat{O})|\beta\rangle. \quad (1.4.67)$$

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

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

$$O_{ji} = \langle e_j | \sum_k O_{ki} |e_k\rangle = \langle e_j | \hat{O} |e_i\rangle. \quad (1.4.68)$$

Dies führt uns zu der Identifikation

$$\text{linearer Operator } \hat{O} \quad \xleftrightarrow{\text{Basisdarstellung}} \quad \text{quadratische Matrix } O_{ji}. \quad (1.4.69)$$

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

$$\hat{O}_{\alpha\beta}|\gamma\rangle = (|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle) = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle. \quad (1.4.70)$$

Zur Erinnerung:

$$\hat{O}_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} (\beta_1, \beta_2, \dots) = \begin{pmatrix} \alpha_1\beta_1 & \alpha_1\beta_2 & \dots \\ \alpha_2\beta_1 & \alpha_2\beta_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.4.71)$$

$$= \text{äußeres (Tensor-)Produkt eines Spalten- mit einem Zeilenvektor.} \quad (1.4.72)$$

Wir nutzen dies, um den Identitätsoperator $\mathbb{1}$ darzustellen. Sei $\{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\}$ eine Orthonormalbasis:

$$\forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (\langle e_i | \alpha \rangle) = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle. \quad (1.4.73)$$

$$\Rightarrow \mathbb{1} = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle\langle e_i| \quad (\text{Vollständigkeitsrelation}) \quad \text{falls } \{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\} \text{ ONB ist.} \quad (1.4.74)$$

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

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

$$\hat{O} = \mathbb{1}\hat{O}\mathbb{1} = \left(\sum_{j=1}^N |e_j\rangle\langle e_j| \right) \hat{O} \left(\sum_{k=1}^N |e_k\rangle\langle e_k| \right) = \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle\langle e_j|\hat{O}|e_k\rangle\langle e_k| \quad (1.4.75)$$

zur Matrixdarstellung eines linearen Operators,

$$\hat{O} = \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle O_{jk} \langle e_k|. \quad (1.4.76)$$

Beleuchten wir nun die mathematische Struktur der Operatoren etwas genauer:

Definition 1.13. Eine Operatoralgebra $\mathcal{A} = \{\hat{A}, \hat{B}, \dots\}$ über einem Körper K , oder K -Algebra, ist eine Menge von Abbildungen zwischen zwei fixierten Vektorräumen, $\mathcal{A} : V \rightarrow V'$, mit den Verknüpfungen $(+, \cdot)$ sowie einer Skalarmultiplikation. $(\mathcal{A}, +)$ ist eine abelsche Gruppe unter der Addition, mit den Eigenschaften:

- (+) • $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$ (kommutativ, d.h. abelsch)
- $\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}$ (assoziativ)
- $\hat{A} + \hat{0} = \hat{A}$, wobei $\hat{0}|\alpha\rangle = |\emptyset\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \quad (\exists \text{ neutrales Element})$
- $\hat{A} + (-\hat{A}) = \hat{0}$ (\exists inverses Element)

Hier betrachten wir Algebren über den komplexen Zahlen, $K = \mathbb{C}$, und für das inverse Element wurde bereits benutzt, dass die Skalarmultiplikation mit einer Zahl $c \in \mathbb{C}$ eingeschlossen ist. Aufgrund der Skalarmultiplikation und der Addition ist \mathcal{A} auch ein \mathbb{C} -Vektorraum.

Die Hintereinanderausführung zweier linearer Operatoren ergibt wieder einen linearen Operator, gegeben durch das Produkt der Operatoren, " \cdot ": $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$. In der Quantenmechanik betrachten wir in der Regel assoziative unitäre Algebren, welche unter der Operatormultiplikation die Eigenschaften

- (\cdot) • $\hat{A} \cdot (\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A} \cdot \hat{B} + \hat{A} \cdot \hat{C}$, $(\hat{A} + \hat{B}) \cdot \hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{C} + \hat{B} \cdot \hat{C}$ (Distributivgesetze),
- $\hat{A} \cdot (\hat{B} \cdot \hat{C}) = (\hat{A} \cdot \hat{B}) \cdot \hat{C}$ (Assoziativität),
- $\lambda(\hat{A} \cdot \hat{B}) = (\lambda\hat{A}) \cdot \hat{B} = \hat{A} \cdot (\lambda\hat{B})$ (Assoziativität bzgl. der Skalarmultiplikation),
- $\mathbb{1} \cdot \hat{A} = \hat{A}$ (Existenz der Eins).

für $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C} \in \mathcal{A}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ besitzen.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Bemerkungen: Ein Inverses, $\hat{A}^{-1} : \hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} = \mathbb{1}$ existiert nicht notwendigerweise (Beispiel: Projektionsoperator). Dennoch sind invertierbare Operatoren von großer Bedeutung, wie wir im Rahmen der Zeitentwicklung lernen werden.

Ebenso ist nicht automatisch eine Norm $\|\cdot\|$ der Operatoren definiert. Nach Definition und Hinzunahme einer solchen Norm sowie einer Ungleichung $\|\hat{A} \cdot \hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| \|\hat{B}\|$ wird die Operatoralgebra zu einer Banachalgebra. Darüberhinaus wird eine solche normierte Operatoralgebra durch Hinzunahme der im folgenden Abschnitt definierten adjungierten Operatoren zur sog. C^* -Algebra. C^* -Algebren spielen heute eine wichtige Rolle in der mathematischen Beschreibung der Quantenmechanik.

Wichtig ist darüberhinaus: Im allgemeinen kommutiert die Operator-Multiplikation nicht!

$$\hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A}. \quad (1.4.77)$$

Definition 1.14. Wir bezeichnen

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A} \quad (1.4.78)$$

als den Kommutator von \hat{A} und \hat{B} .

(Im folgenden lassen wir den Punkt “ \cdot ” bei der Operatormultiplikation der Einfachheit halber weg.)

Wie man durch Ausmultiplizieren leicht nachweist, erfüllt der Kommutator die *Jacobi-Identität*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.4.79)$$

1.4.2. Adjungierter Operator und Hermitezität

Ein wesentliches Konzept ist das des adjungierten Operators:

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

$$(\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, \hat{A} |\beta\rangle) = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle. \quad (1.4.80)$$

Hier verwendeten wir, dass wir jeweils auch schreiben können

$$(\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle) = (\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle) = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) = (|\alpha\rangle, \hat{A} | \beta \rangle). \quad (1.4.81)$$

Es folgt, dass $\langle \alpha | \hat{A} \xrightarrow{\text{dual}} \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle$. Außerdem erhalten wir aus

$$(|\beta\rangle, \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle) = (\hat{A}^\dagger | \alpha \rangle, |\beta\rangle)^* = (|\alpha\rangle, \hat{A} | \beta \rangle)^*, \quad (1.4.82)$$

dass

$$\langle \beta | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle^*. \quad (1.4.83)$$

In Matrixschreibweise bedeutet dies (vgl. Gl. (1.4.76)) bzgl. einer ONB $\{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\}$, dass

$$\hat{A}^\dagger = \sum_{j,k} |e_j\rangle \langle e_j | \hat{A}^\dagger | e_k \rangle \langle e_k | = \sum_{j,k} |e_j\rangle \langle e_j | (A^\dagger)_{jk} \langle e_k |, \quad (A^\dagger)_{jk} = A_{kj}^*. \quad (1.4.84)$$

Beweis:

$$(A^\dagger)_{jk} = \langle e_j | \hat{A}^\dagger | e_k \rangle = \langle e_k | \hat{A} | e_j \rangle^* = A_{kj}^*. \quad (1.4.85)$$

In den Übungen werden wir daraus folgende Identität beweisen:

Hilfssatz 1.3.

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (1.4.86)$$

Definition 1.16. Ein linearer Operator heißt hermitesch, wenn

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle^* \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle. \quad (1.4.87)$$

Für endlich-dimensionale VRe impliziert dies, dass $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, d.h. der Operator ist *selbstadjungiert*. Selbstadjungiertheit, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, erfordert zusätzlich zu Hermitizität, dass auch die Definitionsbereiche von \hat{A} und \hat{A}^\dagger übereinstimmen müssen. Dies ist auf endlich-dimensionalen Vektorräumen immer der Fall, stellt für unendlich-dimensionale VRe aber eine nicht-triviale Einschränkung dar. Darauf kommen wir später zurück. Im Folgenden wollen wir die Bedeutung selbstadjungierter Operatoren anhand ihrer “guten” Eigenschaften bzgl. Diagonalisierung darlegen.

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

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \text{d.h.} \quad (\hat{A} - \lambda\mathbb{1})|\lambda\rangle = 0. \quad (1.4.88)$$

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

Eine wichtige Eigenschaft hermitescher Operatoren ist zusammengefasst in dem

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

Beweis: Der Eigenzustand $|\lambda\rangle$ des hermiteschen Operators \hat{A} , $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ sei normiert, $\langle \lambda | \lambda \rangle = 1$. Es folgt

(i) Der Eigenwert λ ist reell: $\lambda^* = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle^* = \langle \lambda | \hat{A}^\dagger | \lambda \rangle = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle = \lambda$

1. Grundlagen der Quantenmechanik

(ii) Weiterhin sei $|\mu\rangle$ ein weiterer Eigenzustand, $\hat{A}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle$ mit Eigenwert $\mu \neq \lambda$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \lambda \langle \lambda | \mu \rangle & \stackrel{!}{=} (\lambda \langle \mu | \lambda \rangle)^* = \langle \mu | \hat{A} | \lambda \rangle^* \\ & = \langle \lambda | \hat{A} | \mu \rangle = \mu \langle \lambda | \mu \rangle. \end{aligned} \quad (1.4.89)$$

Das bedeutet, dass die nicht entarteten (d.h. $\mu \neq \lambda$) Eigenzustände orthogonal zueinander sind, $\langle \lambda | \mu \rangle = 0$.

Für selbstadjungierte Operatoren ist darüberhinaus folgende Aussage von zentraler Wichtigkeit:

Hilfssatz 1.5. Die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators formen eine Orthogonalbasis des Vektorraums.

Beweis: Sei $\dim(V) = N$. Die Eigenwerte von \hat{A} sind die Nullstellen des charakteristischen Polynoms $\det(\hat{A} - \lambda \mathbb{1})$. Wenn

- (i) alle Eigenwerte verschieden sind, dann $\exists \lambda_1, \dots, \lambda_N$ mit $|\lambda_1\rangle, \dots, |\lambda_N\rangle : \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij}$. Daraus folgt sofort, dass $\{|\lambda_i\rangle\}$ eine ONB ist.
- (ii) Allgemeiner hat die charakteristische Gleichung $\det(\hat{A} - \lambda \mathbb{1}) = 0$ eine Anzahl k Lösungen $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ mit Multiplizitäten (= Entartungsgraden) $d(\lambda_1), \dots, d(\lambda_k)$, die sich zur Dimension des VR summieren, $\sum_{i=1}^k d(\lambda_i) = N$. Dann gilt (siehe Literatur zur linearen Algebra, z.B. [5]), dass jeder Eigenwert λ_i seiner Vielfachheit $d(\lambda_i)$ entsprechend viele linear unabhängige Eigenvektoren besitzt,

$$\hat{A}|\lambda_i^{(n_i)}\rangle = \lambda_i|\lambda_i^{(n_i)}\rangle, \quad n_i = 1, \dots, d(\lambda_i). \quad (1.4.90)$$

Diese sind linear unabhängig und bilden eine ONB in dem von den $\{|\lambda_i^{(n_i)}\rangle\}$ aufgespannten Unterraum. Innerhalb dieses Unterraums ist eine hermitesche Matrix diagonalisierbar. Dagegen ist eine allgemeine komplexe Matrix lediglich in *Jordan-Normalform* [5] M_J aus quadratischen Jordan-Blöcken J_j zu bringen, mit $\dim J_j \leq d(\lambda_i)$,

$$M_J = \begin{pmatrix} J_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & J_m \end{pmatrix}, \quad \text{mit} \quad J_j = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 1 \\ 0 & \cdots & & & 0 \lambda_i \end{pmatrix}. \quad (1.4.91)$$

(Wahlweise können die Einträge 1 auch auf der unteren Nebendiagonale stehen.) Aus dieser Jordan-Normalform folgt direkt, dass in der zugehörigen Basis die Eigenvektoren zu den N Eigenwerten kanonische Form annehmen.

Zusatzbemerkung: Jede *normale* Matrix ist diagonalisierbar, d.h. jede quadratische Matrix $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$, welche $AA^\dagger = A^\dagger A$ erfüllt. Diese Klasse von Matrizen schließt die hermiteschen, $A^\dagger = A$, die antihermiteschen, $A^\dagger = -A$, die unitären, $A^\dagger = A^{-1} \Leftrightarrow A^\dagger A = \mathbb{1}$ sowie weitere Matrizen ein, z.B. $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$. Speziell lässt jede normale Matrix mit Hilfe einer unitären Matrix diagonalisieren: Im nicht entarteten Fall $\exists U, UU^\dagger = \mathbb{1} : U^\dagger A U = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$. In der QM werden uns als Observable in aller Regel lediglich normale Matrizen begegnen.

Allerdings werden neben Observablen z.B. auch Operatoren benötigt, welche Transformationen auf dem

Zustandsraum bewirken, etwa $\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Offenbar ist dies kein normaler Operator. Ein weiteres Beispiel sind Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators, welche $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ erfüllen und eine zentrale Rolle in der Quantenfeldtheorie einnehmen.

Wir verwenden nun die ONB des Vektorraums, der von den Eigenzuständen $|\lambda_i^{(n_i)}\rangle$ aufgespannt wird, um den Operator \hat{A} darzustellen. Insbesondere gilt (der Einfachheit halber, o.B.d.A., für den nicht entarteten Fall):

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \lambda_i \langle \lambda_i|. \quad (1.4.92)$$

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

$$\hat{A}|\lambda_i\rangle = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|\lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle, \quad (1.4.93)$$

worin im ersten Schritt der Einsoperator (1.4.74) (Vollständigkeit) eingesetzt wurde. (1.4.92) folgt dann daraus, dass Skalar λ_j und Vektor $|\lambda_j\rangle$ kommutieren.

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

Nun zurück zur Physik. Im Polarisationsexperiment hatten wir festgestellt, dass

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

Die möglichen Messergebnisse $(+\hbar, -\hbar)$ sind Eigenwerte von \hat{S}_z . Da diese Polarisierungen reellen Zahlen entsprechen sollten, ergibt sich daraus die Bedingung, dass die Eigenwerte der Operatoren, welche Observablen entsprechen, reell sein müssen. Nach Lemma 1.4 ist dies für den Operator $\hat{S}_z^\dagger = \hat{S}_z$ garantiert. Es stellt sich heraus, dass es sinnvoll ist, diesen Sachverhalt zu einem allgemeinen Postulat zu erheben:

QM Postulat 2

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

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

1.5. Messung und Projektion

1.5.1. Eigenbasis und Eigenwerte einer Observable

Am Beispiel der Photonenpolarisation, d.h. des Spin-Anteils des Drehimpulses in z -Richtung,

$$L_z = \hbar \left[|\langle R | \psi \rangle|^2 - |\langle L | \psi \rangle|^2 \right], \quad (1.5.94)$$

sahen wir, dass im Mittel mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle R | \psi \rangle|^2$ ($|\langle L | \psi \rangle|^2$) der Wert \hbar ($-\hbar$) für den durch den Operator $\hat{L}_z = \hbar \hat{S}$ beschriebenen Spin gemessen wird. Die Einzelmessung an einem Photon ergibt entweder $\lambda = \hbar$ oder $\lambda = -\hbar$, da $|R\rangle$ und $|L\rangle$ die Eigenzustände von \hat{L}_z sind.

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

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\lambda_i\rangle, \quad c_i = \langle \lambda_i | \gamma \rangle, \quad \sum_i |c_i|^2 = 1. \quad (1.5.95)$$

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

Die prinzipiell möglichen Messwerte bei Messung der Observablen sind die Eigenwerte λ_i . Für das Polarisationsexperiment haben wir gesehen, vgl. (1.2.22) und (1.2.24), dass die Wahrscheinlichkeit, den Wert λ_i zu messen, gegeben ist durch

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 \quad (\text{Bornsche Regel}). \quad (1.5.96)$$

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

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

QM Postulat 3a

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

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2. \quad (1.5.97)$$

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

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

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

$$\underbrace{|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|}_{\hat{\mathbb{P}}_i} |\gamma\rangle = c_i |\lambda_i\rangle \Rightarrow |\lambda_i\rangle = \frac{|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|\gamma\rangle}{c_i}. \quad (1.5.98)$$

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

$$\hat{\mathbb{P}}_j^2 = \hat{\mathbb{P}}_j, \quad \text{denn } |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j| = |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|, \quad (1.5.99)$$

$$\hat{\mathbb{P}}_j^\dagger = \hat{\mathbb{P}}_j, \quad \text{denn } \langle x|\hat{\mathbb{P}}_j|y\rangle = \langle x|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|y\rangle = (\langle y|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|x\rangle)^* = \langle y|\hat{\mathbb{P}}_j|x\rangle^*. \quad (1.5.100)$$

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

$$\hat{\mathbb{P}}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \hat{\mathbb{P}}^2|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle = \hat{\mathbb{P}}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (1.5.101)$$

Die Wahrscheinlichkeit, den nicht-entarteten Eigenwert λ_i zu messen, kann man nun mit Hilfe des Projektionsoperators $\hat{\mathbb{P}}_i$ schreiben als

$$P(\lambda_i) = \langle\gamma|\hat{\mathbb{P}}_i|\gamma\rangle = \langle\gamma|\hat{\mathbb{P}}_i^2|\gamma\rangle = \|\hat{\mathbb{P}}_i|\gamma\rangle\|^2, \quad (1.5.102)$$

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

$$|\gamma\rangle = \sum_j c_j |\lambda_j\rangle \rightarrow \frac{\hat{\mathbb{P}}_i|\gamma\rangle}{\|\hat{\mathbb{P}}_i|\gamma\rangle} = e^{i\theta_j} |\lambda_i\rangle \cong |\lambda_i\rangle. \quad (1.5.103)$$

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

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

$$\hat{A}|\lambda_i^{(a)}\rangle = \lambda_i|\lambda_i^{(a)}\rangle, \quad \langle\lambda_i^{(a)}|\lambda_j^{(b)}\rangle = \delta_{ij}\delta_{ab}. \quad (1.5.104)$$

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

- $|\gamma\rangle$ liegt nach der Messung in dem Unterraum liegen, der von den $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aufgespannt wird.
- Die Messung des entarteten Eigenwertes λ_i zeichnet keinen der $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aus.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Der Projektor, welcher auf den von den $|\lambda_i^{(a)}\rangle$ aufgespannten Unterraum projiziert, lautet:

$$\hat{P}_i = \sum_{a=1}^{d(\lambda_i)} |\lambda_i^{(a)}\rangle \langle \lambda_i^{(a)}|. \quad (1.5.105)$$

Eine naheliegende Verallgemeinerung des Messaxioms für entartete Eigenwerte ist gegeben durch

Postulat 3b

Seien \hat{A} eine Observable mit (degenerierten) Eigenwerten λ_i und \hat{P}_i der in (1.5.105) definierte Projektionsoperator auf den Eigenraum zu Eigenwert λ_i . Die Wahrscheinlichkeit, den Wert λ_i bei Messung an einem normierten Zustand $|\gamma\rangle$ zu messen, ist

$$P(\lambda_i) = \langle \gamma | \hat{P}_i | \gamma \rangle. \quad (1.5.106)$$

Bei der Messung kollabiert die Wellenfunktion gemäß

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{\hat{P}_i |\gamma\rangle}{\|\hat{P}_i |\gamma\rangle\|}. \quad (1.5.107)$$

1.5.2. Kompatible und inkompatible Observable

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

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

Beweis: Sei $\{|a_i\rangle\}$ eine ONB von Eigenzuständen des hermiteschen Operators \hat{A} . Wir nehmen zunächst Nichtentartung an. Dann gilt:

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle. \quad (1.5.108)$$

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

Wenn a_i entartet ist, dann liegt $\hat{B}|a_i\rangle$ im zu a_i gehörigen Unterraum von Eigenzuständen von \hat{A} . Wir können den hermiteschen Operator \hat{B} auf diesem Unterraum diagonalisieren und erhalten eine ONB von Eigenzuständen $|a_i, b_j\rangle$ von \hat{B} zu den (nicht notwendigerweise entarteten) Eigenwerten b_j .

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

Die physikalische Bedeutung von *kompatiblen* Observablen besteht darin, dass sie, wie im folgenden weiter ausgeführt wird, *gleichzeitig messbar* sind.

(i) Nicht-entarteter Fall

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

$$\hat{A}|a_i, b_i\rangle = a_i|a_i, b_i\rangle, \quad \hat{B}|a_i, b_i\rangle = b_i|a_i, b_i\rangle. \quad (1.5.109)$$

Für den nicht-entarteten Fall gilt dann:

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

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

Beginnen wir mit einem Zustand $|\gamma\rangle$. Dieser lässt sich als $|\gamma\rangle = \sum_i c_i |a_i, b_i\rangle$ darstellen. Wir messen nun die Observable \hat{A} und erhalten das Ergebnis a_i mit Wahrscheinlichkeit $|c_i|^2$. Nach der Messung ist das System im Zustand $|a_i, b_i\rangle$. D.h., nach der Messung von \hat{A} hat das System einen definitiven Wert auch für \hat{B} , beide Observablen sind also gleichzeitig genau messbar.

(ii) Entarteter Fall

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

$$\hat{A}|a_i^{(n_i)}\rangle = a_i|a_i^{(n_i)}\rangle \quad \text{mit} \quad n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.5.110)$$

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

$$\hat{B}|a_i^{(n_i)}\rangle = b_i^{(n_i)}|a_i^{(n_i)}\rangle \quad \text{mit} \quad n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.5.111)$$

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

Unser Ausgangszustand sei gegeben durch

$$|\gamma\rangle = \sum_{i, n_i} c_i^{(n_i)} |a_i, b_i^{(n_i)}\rangle. \quad (1.5.112)$$

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

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

$$|\gamma\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n_i=1}^{d(a_i)} c_i^{n_i} |a_i, b_i^{n_i}\rangle, \quad N = \left(\sum_{n_i=1}^{d(a_i)} |c_i^{(n_i)}|^2 \right)^{1/2}. \quad (1.5.113)$$

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

$$|\psi_1\rangle \rightarrow |a_i, b_i^{(k)}\rangle. \quad (1.5.114)$$

1. Grundlagen der Quantenmechanik

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

1.5.3. Erwartungswert, Varianz, Unschärfe

Wir betrachten eine Observable \hat{A} mit Eigenwert λ_i und einen Zustand $|\gamma\rangle$. Die Messung von \hat{A} lieferte λ_i mit $P(\lambda_i) = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2$. Wir wiederholen das Experiment n mal - jedes Mal beginnend im Zustand $|\gamma\rangle$. Die statistische Verteilung der Messergebnisse λ_i ist durch die relative Häufigkeit von λ_i gegeben,

$$H(\lambda_i) = \frac{n_i}{n}, \quad \sum_i n_i = n. \quad (1.5.115)$$

Im Limes $n \rightarrow \infty$ gilt $n_i/n \rightarrow P(\lambda_i)$.

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

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i) = \sum_i \lambda_i |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 = \sum_i \lambda_i \langle \gamma | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \gamma \rangle = \langle \gamma | \left(\sum_i |\lambda_i\rangle \lambda_i \langle \lambda_i| \right) | \gamma \rangle. \quad (1.5.116)$$

Wir lesen ab:

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} = \langle \gamma | \hat{A} | \gamma \rangle \quad (\text{Mittelwert} = \text{Erwartungswert}). \quad (1.5.117)$$

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

$$(\Delta A)_{|\gamma\rangle}^2 := \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\gamma\rangle} - \langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle}^2 = \sum_i \lambda_i^2 P(\lambda_i) - \left(\sum_i \lambda_i P(\lambda_i) \right)^2, \quad (1.5.118)$$

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

Wir haben gesehen, dass für inkompatible Observablen, $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, es nicht möglich ist, für jeden Zustand sowohl \hat{A} als auch \hat{B} mit Sicherheit zu kennen. Diese Unmöglichkeit, \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig scharf messen zu können, wird durch die allgemeine quantenmechanische *Unschärferelation* quantifiziert:¹³

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (\text{angewendet auf beliebigen Zustand}). \quad (1.5.119)$$

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

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

¹³Diese Unschärferelation ist jedoch nicht vollkommen allgemein gültig. Vorsicht sei etwa bei periodischen Observablen gewahrt, s. z.B. F. Gières, *Rept. Prog. Phys.* 63, 1893 (2000) [8].

Dann erfüllen die jeweiligen Streuungen die Unschärferelation (1.5.119).

Beachte:

- Die obige Unschärfe stellt die intrinsische, statistische Unschärfe bei unabhängiger Messung von \hat{A} und \hat{B} dar. Die Messungen von \hat{A} und \hat{B} beeinflussen einander hier nicht. \hat{A} und \hat{B} werden unabhängig an jeweils unterschiedlichen Repräsentanten des Ensembles im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, und die statischen Schwankungen erfüllen die obige Ungleichung.
- Zusätzlich hierzu kann typischerweise eine weitere Unschärfe dadurch entstehen, dass man sowohl \hat{A} als auch \hat{B} gleichzeitig an den jeweils selben Repräsentanten des Ensembles misst, insofern diese Messungen einander beeinflussen. Die Unschärfe aufgrund einer solchen gemeinsamen Messung von \hat{A} und \hat{B} ist typischerweise um einen Faktor 3 größer als die obige rein statistische Unschärfe. Dieser Effekt tritt z.B. bei dem in vielen phänomenologischen Darstellungen der Unschärferelationen bemühten Heisenberg-Mikroskop auf, bei dem die Messung des Ortes eines Elektrons mittels eines Photons einer bestimmten Wellenlänge unweigerlich den Impuls des Elektrons beeinflusst. Je höher die Frequenz des Photons, desto besser ist die Ortsauflösung, aber desto schlechter die Impulsauflösung aufgrund des unvermeidbaren Impulsübertrags vom Photon auf das Elektron. Beide Effekte müssen je nach Versuchsanordnung berücksichtigt und gegebenenfalls addiert werden.¹⁴

Beweis der Unschärferelation (1.5.119):

Betrachte einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$, $\| |\psi\rangle \| = 1$ und definiere

$$|\phi_A\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle, \quad |\phi_B\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle. \quad (1.5.120)$$

Hierfür gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi_A | \phi_A \rangle &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A}^2 - \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle = (\Delta A)^2. \end{aligned} \quad (1.5.121)$$

Außerdem gilt aufgrund der Schwarzischen Ungleichung, dass

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \leq \sqrt{\langle \phi_A | \phi_A \rangle \langle \phi_B | \phi_B \rangle} = (\Delta A)(\Delta B). \quad (1.5.122)$$

Wir schätzen $|\langle \phi_A | \phi_B \rangle|$ ab. Wegen

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| = \sqrt{(\operatorname{Re} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2}. \quad (1.5.123)$$

benötigen wir hierfür den Real- und Imaginärteil. Wir schreiben zunächst

$$\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (1.5.124)$$

Ist ein Operator \hat{C} hermitesch, so gilt $\langle \hat{C} \rangle \in \mathbb{R}$. Ist \hat{C} anti-hermitesch ($\hat{C}^\dagger = -\hat{C}$) so ist $\langle \hat{C} \rangle \in i\mathbb{R}$ rein imaginär. Damit ist in unserem Fall hermitescher Operatoren $\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \in \mathbb{R}$. Aber $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ ist weder hermitesch noch anti-hermitesch. Wir können jedoch $\hat{A}\hat{B}$ in einen hermiteschen und einen anti-hermiteschen Anteil zerlegen:

¹⁴Weitere Details können z.B. in M.G. Raymer, "Uncertainty principle for joint measurement of non-commuting variables", *Am. J. Phys.* **62**, 986 (1994), [9] gefunden werden.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) = \frac{1}{2} \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\substack{\text{Kommutator} \\ \text{anti-hermitesch}}} + \frac{1}{2} \underbrace{\{\hat{A}, \hat{B}\}}_{\substack{\text{Anti-Kommutator} \\ \text{hermitesch}}} . \quad (1.5.125)$$

Es folgt unmittelbar, dass

$$\operatorname{Re}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{\hat{A}, \hat{B}\} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (1.5.126)$$

$$\operatorname{Im}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle, \quad (1.5.127)$$

was uns zu

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad \Rightarrow \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (1.5.128)$$

führt. Wir bemerken abschließend, dass die Änderung der Begriffe der Objekteigenschaften und deren Messung in der Quantenmechanik nur inkompatible, also nicht-kommutierende Observablen betreffen.

1.6. Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion

1.6.1. Unendlich-dimensionale Zustandsräume

Bisher haben wir uns mit endlich-dimensionalen Vektorräumen beschäftigt. Das Eigenwertspektrum der Observablen hatte immer endlich viele diskrete Werte,

$$\hat{A} |a'\rangle = a' |a'\rangle, \quad \langle a' | a'' \rangle = \delta_{a', a''}. \quad (1.6.129)$$

In der Quantenmechanik besitzen jedoch wesentliche Observable ein kontinuierliches Spektrum, z.B. Ort und Impuls eines Teilchens.

Sei $\hat{\xi}$ eine solche Observable, mit Eigenwertgleichung $\hat{\xi} |\xi'\rangle = \xi' |\xi'\rangle$, wobei der Eigenwert ξ' kontinuierliche Werte annehmen kann. $\{|\xi'\rangle\}$ stellt die kontinuierliche Eigenbasis von $\hat{\xi}$ dar.

Wir verallgemeinern die VR-Eigenschaften für kontinuierliche Eigenspektren:

- Orthogonalität

$$\begin{aligned} \langle a' | a'' \rangle &= \delta_{a', a''} \rightarrow ? \\ \text{Idee: } \langle \xi' | \xi'' \rangle &= 0 \quad \text{für } \xi' \neq \xi'' \quad \text{und} \\ \sum_{a'} \langle a' | a'' \rangle &= \sum_{a'} \delta_{a', a''} = 1 \rightarrow \int d\xi' \langle \xi' | \xi'' \rangle = 1 \\ &\Rightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''). \end{aligned} \quad (1.6.130)$$

- Vollständigkeit

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{1} \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = \mathbb{1}. \quad (1.6.131)$$

- Basisdarstellung

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'|\alpha\rangle. \quad (1.6.132)$$

- Normierung

$$\sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1 \rightarrow \int d\xi' |\langle \xi'|\alpha\rangle|^2 = 1. \quad (1.6.133)$$

- Skalarprodukt

$$\langle \alpha|\beta\rangle = \sum_{a'} \langle \alpha|a'\rangle \langle a'|\beta\rangle \rightarrow \langle \alpha|\beta\rangle = \int d\xi' \langle \alpha|\xi'\rangle \langle \xi'|\beta\rangle. \quad (1.6.134)$$

- Matricelemente

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle = a' \delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi''|\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi' \delta(\xi' - \xi''). \quad (1.6.135)$$

- Die Wellenfunktion als Verknüpfung der Einträge eines Vektors mit dessen Indizes:
Für einen endlich-dimensionalen VR betrachten wir die kanonische Basiszerlegung:

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle \Rightarrow c_i = \langle e_i|\gamma\rangle, \quad (\langle e_i|\gamma\rangle) = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \sum_i c_i \underline{e}_i, \quad (1.6.136)$$

$$\text{mit } \underline{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \text{etc.}$$

Im unendlich-dimensionalen VR schreiben wir

$$|\psi\rangle = \int d\xi |\xi\rangle \psi(\xi). \quad (1.6.137)$$

$(\psi(\xi))$ kann also als unendlich-dimensionaler Spaltenvektor aufgefasst werden, in dem der Eintrag zum Label ξ der Funktionswert $\psi(\xi)$ ist. Da $\xi \in \mathbb{R}$, ist jedoch die Menge der Einträge überabzählbar-unendlich, so dass man den Spaltenvektor nicht explizit ausschreiben kann. Da $\psi(\xi) = \int d\xi' \delta(\xi - \xi') \psi(\xi')$, lauten die kanonischen Basisvektoren $\delta(\xi - \xi')$.

Die *Vollständigkeit*, s. Gl. (1.6.131), der in der Quantenmechanik betrachteten unendlich-dimensionalen VRs ist eine wesentliche Eigenschaft:

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Definition 1.20. Gleichmäßige Konvergenz (einer Funktionenfolge):

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

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists n_0 : \quad \forall n \geq n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x\rangle \| < \epsilon \quad (1.6.138)$$

mit der Supremums-Norm $\|\cdot\|$.

Eine notwendige Bedingung für gleichmäßige Konvergenz ist, dass der Abstand zwischen den Folgeelementen im Sinne der Cauchy-Folge immer kleiner wird:

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists n_0 : \quad \forall n, m \geq n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x_m\rangle \| < \epsilon \quad (1.6.139)$$

Umgekehrt konvergiert eine Cauchy-Folge gleichmäßig, aber der Limes muss nicht unbedingt im VR liegen.

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

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

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

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

QM Postulat 1 (endgültig)

Der quantenmechanische Zustandsraum ist ein Hilbertraum.

1.6.2. Der quantenmechanische Ortsraum

Der Ortsraum wird von den Eigenvektoren des Ortsoperators aufgespannt. Betrachte ein freies Teilchen im eindimensionalen Raum \mathbb{R} :

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

Ein allgemeiner Zustand ist gegeben durch

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\text{Koeffizienten}} \quad (1.6.140)$$

Koeffizienten = Wellenfunktion = $\psi(x')$

Betrachten wir eine idealisierte Ortsmessung, welche das Teilchen am Ort x' lokalisiert, mit unendlich scharfer Auflösung. Diese Messung führt zum "Kollaps" des Zustands auf die Eigenfunktion

$$|\alpha\rangle \rightarrow |x'\rangle. \quad (1.6.141)$$

Realistischer ist der Fall, dass der Detektor das Teilchen im Intervall $[x' - \Delta/2, x' + \Delta/2]$ lokalisiert. Bei dieser Messung kollabiert der Zustand gemäß

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle \rightarrow \int_{x' - \Delta/2}^{x' + \Delta/2} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.6.142)$$

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

$$dP(x') = |\langle x' | \alpha \rangle|^2 dx' \quad (dx' = \text{Länge des infinitesimalen Intervalls}). \quad (1.6.143)$$

Insbesondere ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum zu finden, gleich

$$dP(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 = 1. \quad (1.6.144)$$

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

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.6.145)$$

1.6.3. Der Begriff der Wellenfunktion

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

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

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

$$\psi_\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad x' \mapsto \psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.6.146)$$

$\psi_\alpha(x)$ stellt die Koeffizientenfunktion der Darstellung des Zustands $|\alpha\rangle$ bezüglich der Orts-Eigenbasis dar:

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int dx' |x'\rangle \psi_\alpha(x') \quad (1.6.147)$$

Wir vergleichen dies mit dem endlich-dimensionalen Fall:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle = \sum_i |e_i\rangle \alpha_i. \quad (1.6.148)$$

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Daher entsprechen sich:

$$\text{Index } i \text{ der ONB-Vektoren } \{|e_i\rangle\} \leftrightarrow \text{Argument } x' \text{ der ONB-Vektoren } \{|x'\rangle\}. \quad (1.6.149)$$

Der gesamte bisherige Formalismus kann mithilfe der Wellenfunktion geschrieben werden:

- Zustand: $|\alpha\rangle \leftrightarrow \psi_\alpha(x)$
- Skalarprodukt: $\langle \alpha | \beta \rangle = \int dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \beta \rangle = \int dx' \psi_\alpha^*(x') \psi_\beta(x')$
- Norm-Quadrat: $\langle \alpha | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\alpha^*(x') \psi_\alpha(x') = \int dx' |\psi_\alpha(x')|^2$
- Matrixelement: $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dx' dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x' | \hat{A} | x'' \rangle \psi_\alpha(x'') = \int dx' dx'' \psi_\beta^*(x') \hat{A}(x', x'') \psi_\alpha(x'')$.
Insbesondere gilt für Observable der Form $\hat{A} = f(\hat{x})$ wegen $\langle x' | f(\hat{x}) | x'' \rangle = f(x'') \delta(x' - x'') \Rightarrow \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x')$.
- Normierbarkeit: Da $\| |\alpha\rangle \| < \infty$ für einen Zustand im unitären VR gelten soll, muss ψ quadratintegrabel sein, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\alpha(x)|^2 < \infty$.

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

Insbesondere ist dieser Raum bezüglich der durch das Skalarprodukt erzeugten Norm $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$ vollständig, d.h. ein Banachraum, der zusammen mit dem durch das Skalarprodukt gegebenen "Winkelmaß" zum Hilbertraum wird. Der Beweis folgt aus dem Satz von Fischer-Riesz aus dem Jahre 1907 und beruht im wesentlichen darauf, dass sich jede Funktion aus L^2 isometrisch-isomorph, also eineindeutig und Metrik-erhaltend auf eine Cauchy-Folge in ℓ^2 , den quadratsummablen Folgen c_n , $\sum_n |c_n|^2 < \infty$, abbilden lässt. Diese Abbildung ist durch die Fourierreihenentwicklung der Funktion ψ gegeben. Für weitere Details des Beweises dieses nichttrivialen Theorems verweisen wir auf die Literatur der Funktionalanalysis.

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

$$\forall |\alpha\rangle : \langle x' | \alpha \rangle = \psi_\alpha(x'). \quad (1.6.150)$$

Andererseits gilt aber auch

$$\langle x' | \alpha \rangle = \int dx \langle x' | x \rangle \langle x | \alpha \rangle = \int dx \psi_{x'}^*(x) \psi_\alpha(x). \quad (1.6.151)$$

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

Beachte: Die Diracsche delta-Distribution stellt kein Element von $L^2(\mathbb{R})$ dar. In diesem Sinne ist der Orts-Eigenzustand ein uneigentlicher Zustand. Dennoch wird der Ortseigenzustand mit zum Zustandsraum genommen. Grundsätzlich bedarf es aber einer Regularisierung der delta-Distribution zu einer Funktion, um korrekte Resultate zu erhalten. Beispiele hierfür werden wir in den Übungen kennenlernen.

1.7. Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen

1.7.1. Aktive Translationen

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

- Passive Transformationen, bei denen das physikalische System gleich bleibt, während die Koordinaten transformiert werden.
- Aktive Transformationen, bei denen das physikalische System transformiert wird.

Wir betrachten *aktive Translationen* und definieren den Translationsoperator

$$\begin{aligned} \hat{T}(\Delta x) : \text{Zustand bei } x &\mapsto \text{Zustand bei } x + \Delta x \\ \hat{T}(\Delta x) |x\rangle &= |x + \Delta x\rangle \end{aligned} \quad (1.7.152)$$

Wir berechnen die Wellenfunktion zu $|x + \Delta x\rangle$:

$$\begin{aligned} |x + \Delta x\rangle &= \hat{T}(\Delta x) |x\rangle = \hat{T}(\Delta x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \hat{T}(\Delta x) |x'\rangle \langle x' | x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x' + \Delta x\rangle \langle x' | x\rangle \end{aligned} \quad (1.7.153)$$

In dem wir $x'' = x' + \Delta x$ substituieren, erhalten wir daraus

$$|x + \Delta x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x'' - \Delta x | x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x' - \Delta x | x\rangle}_{\psi_x(x' - \Delta x)}. \quad (1.7.154)$$

Wir können diese Relation auf beliebige Zustände verallgemeinern, in dem wir $|x\rangle$ durch $|\psi\rangle$ ersetzen und den transformierten Zustand $\hat{T}(\Delta x) |\psi\rangle$ in Ortseigenzustände entwickeln. Daraus ergibt sich, dass

$$\left(\hat{T}(\Delta x)\psi\right)(x) = \langle x | \hat{T}(\Delta x) |\psi\rangle = \langle x - \Delta x | \psi\rangle = \psi(x - \Delta x). \quad (1.7.155)$$

In anderen Worten: Die aktive Translation des Zustands entlang der Strecke Δx entspricht dem ursprünglich Zustand ausgewertet bei $x - \Delta x$.

1.7.2. Translationen als Lie-Gruppe

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

- Gruppeneigenschaften:
 - Abgeschlossenheit: $\hat{T}(\Delta x) \cdot \hat{T}(\Delta x') = \hat{T}(\Delta x'')$ mit $\Delta x'' = \Delta x + \Delta x'$,
 - Assoziativität: $[\hat{T}(\Delta x) \cdot \hat{T}(\Delta x')] \cdot \hat{T}(\Delta x'') = \hat{T}(\Delta x) \cdot [\hat{T}(\Delta x') \cdot \hat{T}(\Delta x'')]$,
 - Existenz des Inversen: $[\hat{T}(\Delta x)]^{-1} = \hat{T}(-\Delta x)$,

1. Grundlagen der Quantenmechanik

– Existenz der Eins: $\hat{T}(0) = \mathbb{1}$.

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

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

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

$$(\hat{T}(\Delta x)|\alpha\rangle, \hat{T}(\Delta x)|\alpha\rangle) = (|\alpha\rangle, |\alpha\rangle). \quad (1.7.156)$$

Das bedeutet, dass (im Folgenden lassen wir den Multiplikationspunkt ‘ \cdot ’ wieder weg.)

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{T}^\dagger(\Delta x) = \mathbb{1}, \quad \text{d.h.} \quad \hat{T}^\dagger(\Delta x) = [\hat{T}(\Delta x)]^{-1}. \quad (1.7.157)$$

Wir betrachten nun *infinitesimale* Translationen

$$\hat{T}(dx) = \mathbb{1} - i\hat{K}dx + O((dx)^2). \quad (1.7.158)$$

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

$$\hat{T}(dx) \text{ unitär} \leftrightarrow \hat{K} \text{ hermitesch}. \quad (1.7.159)$$

Man sagt: Der Operator $\hat{K}^\dagger = \hat{K}$ *generiert* die Gruppe der Translationen.

Wir merken an dieser Stelle an, dass eine Translation über eine endliche Distanz Δx einer unendlichen Zahl infinitesimaler Translationen gleichzusetzen ist:

$$\hat{T}(\Delta x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i\hat{K} \frac{\Delta x}{N} \right)^N. \quad (1.7.160)$$

Dies entspricht einer Definition der Exponentialfunktion:

$$\hat{T}(\Delta x) = \exp(-i\hat{K}\Delta x) \quad (T^{-1} = T^\dagger \Leftrightarrow K^\dagger = K). \quad (1.7.161)$$

Nun wollen wir den Kommutator von \hat{T} mit dem Ortsoperator \hat{x} bestimmen:

$$[\hat{x}, \hat{T}(\Delta x)] = ? \quad (1.7.162)$$

Dazu berechnen wir:

$$\hat{x}\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = \hat{x}|x' + \Delta x\rangle = (x' + \Delta x)|x' + \Delta x\rangle, \quad (1.7.163)$$

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{x}|x'\rangle = x'\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = x'|x' + \Delta x\rangle. \quad (1.7.164)$$

Im Fall infinitesimaler Translationen ($\Delta x \rightarrow dx$) ergibt sich daraus:

$$[\hat{x}\hat{T}(dx) - \hat{T}(dx)\hat{x}]|x'\rangle = dx|x'\rangle + O(dx^2) \quad \implies \quad [\hat{x}, \hat{T}(dx)] = dx\mathbb{1} = dx. \quad (1.7.165)$$

Da die infinitesimale Translation $\hat{T}(dx) = 1 - i\hat{K}dx$ einer linearen Verschiebung um die 1 entspricht, folgt

$$[\hat{x}, \hat{K}] = i. \quad (1.7.166)$$

1.7.3. Der Impuls als Generator der Translationen

Unsere Ergebnisse zeigen, dass der hermitesche Operator \hat{K} mit $[\hat{x}, \hat{K}] = i$ der Generator der Translationen in der Quantenmechanik ist. Wie schon angedeutet, ist in der *klassischen Mechanik* der Impuls der Generator der Translationen, im folgenden Sinne:

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

$$\{A(q, p), B(q, p)\}_{\text{PB}} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}. \quad (1.7.167)$$

- Unter einer aktiven Translation um Δq transformiert eine Funktion $F(q, p)$ wie¹⁵

$$F(q, p) \mapsto \tilde{F}(q, p) = F(q + \Delta q, p). \quad (1.7.168)$$

Im infinitesimalen Fall bedeutet das

$$\tilde{F}(q, p) = \left(1 + dq \frac{\partial}{\partial q}\right) F(q, p) = F + \delta F \quad (1.7.169)$$

mit $\delta F = \{G, F\}_{\text{PB}} dq$ für $G = -p$.

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

- Ein *Beweis* dieses Zusammenhangs in der QM ist nicht möglich. Vielmehr gehen wir auch hier wieder heuristisch vor: Wir versuchen, die Strukturen aus der Klassischen Mechanik auf die QM zu übertragen. Die Sinnhaftigkeit dieser Übertragung muss sich dann ex post erweisen.
- Eine genauere Begründung für die Identifikation von \hat{p} mit dem Generator der Translationen bedarf einer Definition der Translation angewendet auf Operatoren (bisher hat unser Translationsoperator nur auf Zustände gewirkt!). Wir kommen später mit der Einführung des Heisenbergbildes darauf zurück (siehe Diskussion um Gl. (??)).
- \hat{p} und \hat{K} tragen unterschiedliche Einheiten: Aus $\psi(x - dx) = (\mathbb{1} - id_x \hat{K})\psi(x)$ folgt:

$$[\hat{K}] = \frac{1}{[\text{Länge}]}, \quad [\text{Impuls}] = \frac{[\text{Wirkung}]}{[\text{Länge}]} = \text{Js/m}. \quad (1.7.170)$$

Es bedarf also einer fundamentalen Naturkonstanten mit der Einheit einer Wirkung, um eine Verbindung zwischen Impuls- und Translationsoperator herzustellen:

$$\hat{p} = \hbar \hat{K}, \quad [\hbar] = \text{Wirkung} = \text{Nms}. \quad (1.7.171)$$

An dieser Stelle ist \hbar eine beliebige Grösse mit Einheiten einer Wirkung. Eine physikalische Interpretation von \hbar werden wir bald im Planckschen Wirkungsquantum finden und somit \hbar in eine fundamentale,

¹⁵Dass $F(q, p) \mapsto \tilde{F}(p, q) = F(q + \Delta q, p)$ das korrekte Transformationsverhalten unter aktiven Transformationen ist wird offensichtlich, wenn man z.B. q selbst betrachtet: $q \rightarrow q + \Delta q$. Dies ist zu unterscheiden vom besprochenen Verhalten der Wellenfunktion unter einer aktiven Translation, $\psi(x) \rightarrow \psi(x - \Delta x)$, welche keine direkte klassische Entsprechung hat.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

messbare Konstante verwandeln. Wegen (1.7.166) gilt die kanonische Kommutatorrelation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (1.7.172)$$

Als Anwendung der allgemeinen Unschärferelation (1.5.119) finden wir damit, dass Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf messbar sein können:

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{Heisenbergsche Unschärferelation.} \quad (1.7.173)$$

1.7.4. Kanonische Kommutatorrelationen und kanonische Quantisierung

Betrachte $\psi(x_i)$ als Funktion der Koordinaten x_i , $i = 1, 2, \dots, d$ des d -dimensionalen euklidischen Raumes. Um die Relation (1.7.172) hierfür zu verallgemeinern berücksichtigen wir:

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

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (1.7.174)$$

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

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.7.175)$$

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

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.7.176)$$

Beachte, dass diese, wie oben hergeleitet, direkt aus der wohl motivierten Identifikation von \hat{p} mit dem Generator der Translationen folgen. Die Kommutatorrelationen erinnern uns an die *klassischen Poissonklammer-Relationen* der kanonischen Phasenraumkoordinaten (q_i, p_j) ,

$$\{q_i, p_j\}_{\text{PB}} = \delta_{ij}, \quad (1.7.177)$$

welche ebenfalls eine Folge der räumlichen Transformationseigenschaften von Phasenraumfunktionen sind. Wir stellen fest, dass die quantenmechanischen Kommutatorrelationen aus den klassischen Poissonklammer-Relationen durch die Ersetzung $[\cdot, \cdot] \equiv i\hbar \{ \cdot, \cdot \}_{\text{PB}}$ folgen. Diese Vorgehensweise heißt kanonische Quantisierung:

$$\begin{aligned} \text{Klassische Phasenraumkoordinaten} &\mapsto \text{quantenmechanische Operatoren} \\ \{ \cdot, \cdot \}_{\text{PB}} &\mapsto \frac{1}{i\hbar} [\cdot, \cdot]. \end{aligned} \quad (1.7.178)$$

In den Übungen werden wir sehen, dass die Ersetzung klassischer Funktionen auf dem Phasenraum durch nicht-kommutierende Operatoren den Zusammenhang $[\cdot, \cdot] \equiv i\hbar \{ \cdot, \cdot \}_{\text{PB}}$ erzwingt. Diese Erkenntnis kann

1.7. Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen

auch als eine alternative Motivation der Relationen (1.7.176) dienen. Abschließend wollen wir die Bedeutung des Faktors $i\hbar$ noch besser verstehen:

- $\{f, g\}_{\text{PB}}$ ist reell, falls f, g reell, aber $[\hat{f}, \hat{g}]$ ist antihermitesch, falls \hat{f}, \hat{g} hermitesch. Infolgedessen benötigt man einen Faktor i .

- Einheiten: $[\{, \}_{\text{PB}}] = \left[\frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right] = (\text{kg m}^2)^{-1} \text{s}$, daher ist der Faktor der Einheit einer Wirkung, $\sim \hbar$, nötig, um Einheitengleichheit zu bewirken.

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Hintergrund: Weyl-Quantisierung

Die kanonische Quantisierung (1.7.178) lässt sich mathematisch etwas präziser formulieren.¹⁶ Man geht man von einer sog. Weyl-Abbildung aus,

$$\Phi : f(q, p) \rightarrow \Phi[f(q, p)] = \hat{f}(\hat{q}, \hat{p}), \quad (1.7.179)$$

welche von der Phasenraum zur Operatorformulierung der Quantenmechanik führt. Für die Charakterisierung von Produkten von Operatoren spielt dabei das Moyal- oder *-Produkt eine wichtige Rolle:

$$f * g = f \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \Lambda \right] g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \Pi^n (f, g), \quad (1.7.180)$$

worin Λ den symplektischen Ableitungsoperator bezeichnet,

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q_i} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p_i} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p_i} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q_i}, \quad (1.7.181)$$

und Π den Poisson-Bivektor,

$$\begin{aligned} \Pi^0 (f, g) &= fg, \\ \Pi^1 (f, g) &= \{f, g\}_{\text{PB}}, \\ &\vdots \\ \Pi^n (f, g) &= \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \left(\frac{\partial^k}{\partial p^k} \frac{\partial^{n-k}}{\partial q^{n-k}} f \right) \left(\frac{\partial^{n-k}}{\partial p^{n-k}} \frac{\partial^k}{\partial q^k} g \right), \end{aligned} \quad (1.7.182)$$

mit den Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k} = n! / [(n-k)!k!]$. Mittels des Produkts (1.7.180) definiert man die Moyal-Klammer als

$$\{f, g\}_{\text{MB}} = (i\hbar)^{-1} (f * g - g * f) = \frac{2}{\hbar} f \sin \left(\frac{\hbar}{2} \Lambda \right) g, \quad (1.7.183)$$

welche sich in führender Ordnung in \hbar auf die Poisson-Klammer zurückführen lässt,

$$\{f, g\}_{\text{MB}} = \{f, g\}_{\text{PB}} + \mathcal{O}(\hbar). \quad (1.7.184)$$

\hbar stellt damit einen Deformationsparameter dar, der von der klassischen Verknüpfung der Poissonklammer wegführt, also eine Verallgemeinerung parametrisiert. Wir bemerken, dass im Limes $\hbar \rightarrow 0$ das Produkt $f * g$ zu einem gewöhnlichen kommutativen Produkt von f und g wird und dass somit die Moyal-Klammer verschwindet $i\hbar \{f, g\}_{\text{MB}} = f * g - g * f \rightarrow 0$. Über diesen führenden Term hinaus tragen gemäß (1.7.183) nur ungerade n zur Moyal-Klammer bei, $\Pi^{2m}(f, g) - \Pi^{2m}(g, f) = 0$ für $m \in \mathbb{N}_0$. Für die kanonischen Kommutatorrelationen (1.7.176) auf dem Phasenraum sind jedoch alle höheren Beiträge $\mathcal{O}(\hbar^3)$ identisch Null, die Ersetzung ist also exakt. Die Moyal-Klammer kann nun dazu verwendet werden, um den Kommutator der Weyl-Abbildungen zweier auf dem Phasenraum definierten Funktionen f und g als die Weyl-Abbildung ihrer Moyal-Klammer zu definieren,

$$[\Phi[f], \Phi[g]] = \Phi[f * g - g * f]. \quad (1.7.185)$$

Mittels einer Entwicklung von f und g in Potenzen von q und p lässt sich zeigen, dass diese Vorschrift konsistent mit einer Bestimmung der Kommutatoren aus den kanonischen Relationen (1.7.176) ist.

Zusammengefasst erhält man die Quantisierung als Deformation der im klassischen Phasenraum geltenden Zusammenhänge zwischen den kanonisch konjugierten Variablen.

¹⁶Siehe die gruppentheoretischen Betrachtungen von Hermann Weyl [10] sowie die Phasenraum-Formulierung der Quantenmechanik nach Groenewold [11] und Moyal [12].

1.7.5. Darstellung von \hat{p} im Ortsraum

Betrachte den infinitesimalen Translationsoperator in einer Dimension,

$$\hat{T}(\delta x) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \delta x, \quad \delta x : \text{infinitesimale Verschiebung.} \quad (1.7.186)$$

Wir berechnen seine

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

$$\hat{T}(\delta x)|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x' - \delta x | \alpha \rangle. \quad (1.7.187)$$

Eine Taylor-Entwicklung ergibt

$$\langle x' - \delta x | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha \rangle - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle + \dots \quad (1.7.188)$$

und damit

$$\psi_\alpha(x' - \delta x) = \psi_\alpha(x') - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \psi_\alpha(x') + \dots \quad (1.7.189)$$

Wir erhalten daraus

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}\right)|\alpha\rangle = \underbrace{\int dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle}_{|\alpha\rangle} - \delta x \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \quad (1.7.190)$$

bzw., ausgedrückt durch den Impulsoperator,

$$\hat{p}|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar \partial_{x'}) \langle x' | \alpha \rangle, \quad (1.7.191)$$

$$\Leftrightarrow \hat{p} = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar \partial_{x'}) \langle x' |. \quad (1.7.192)$$

- Wirkung auf Wellenfunktionen: Aus (1.7.192) folgt die Ortsdarstellung des Impulsoperators,

$$p(x, x') = \langle x | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar \partial_x \delta(x - x'). \quad (1.7.193)$$

Der Operator wirkt also gemäß $\int dx' p(x, x') \psi(x') = -i\hbar \partial_x \psi(x)$ auf Wellenfunktionen. Wir schreiben kurz

$$(\hat{p}\psi)(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (1.7.194)$$

Insbesondere gilt

$$\langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') (-i\hbar \partial_{x'}) \psi_\alpha(x'). \quad (1.7.195)$$

1.7.6. Generalisierte Eigenvektoren und Gel'fandsche Raumtripel*

Der Vektorraum $L^2([a, b], dx)$ der quadratintegralen Funktionen $\psi(x)$ bildet bezüglich des Skalarprodukts und der dadurch induzierten Norm einen Hilbertraum, ist also vollständig und normiert, siehe Satz 1.1 auf S. 38. Orts- und Impulsoperator sind lineare Operatoren auf diesem Hilbertraum, so dass $\psi(x)$, multipliziert mit x bzw. differenziert nach x , ebenso in L^2 ist,

$$\hat{x} : \psi(x) \mapsto x\psi(x), \quad \text{mit} \quad D(\hat{x}) = \{ \psi \in L^2 \mid x\psi \in L^2 \}, \quad (1.7.196)$$

$$\hat{p} : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi, \quad \text{mit} \quad D(\hat{p}) = \{ \psi \in L^2 \mid \partial_x \psi \in L^2 \}. \quad (1.7.197)$$

\hat{x} und \hat{p} sind Elemente einer Operator-Algebra mit nicht-abelschem Produkt. Im Ortsraum folgt der Kommutator aus der Kettenregel:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hbar}{i} (x\partial_x - \partial_x x) = \frac{\hbar}{i} (x\partial_x - (\partial_x x) - x\partial_x) = -\frac{\hbar}{i} (\partial_x x) = i\hbar \quad (1.7.198)$$

Der Impulsoperator ist hermitesch, jedoch besitzt sein adjungierter Partner einen größeren Definitionsbereich. Wir betrachten dafür $\hat{p}\psi = -i\hbar\partial_x\psi$ für alle $\psi \in D(\hat{p}) = \{ \psi \in L^2([a, b], dx) \mid \psi' \in L^2([a, b], dx), \psi(a) = \psi(b) = 0 \}$, den quadratintegralen Funktionen mit quadratintegraler Ableitung auf dem 1D Intervall $[a, b]$ mit Dirichlet-Randbedingungen. Für diese gilt, dass

$$\langle \phi \mid \hat{p} \mid \psi \rangle = \int_a^b dx \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \phi^*(x) \psi(x) \Big|_a^b - \frac{\hbar}{i} \int_a^b dx (\partial_x \phi^*(x)) \psi(x) \quad (1.7.199)$$

$$= \int_a^b dx \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \phi(x) \right)^* \psi(x) = \langle \hat{p} \phi \mid \psi \rangle. \quad (1.7.200)$$

Damit ist \hat{p} hermitesch. Da in (1.7.200) lediglich die Dirichlet-Randbedingungen von ψ eingingen, ist der Definitionsbereich des Operators \hat{p}^\dagger , $D(\hat{p}^\dagger) = \{ \phi \in L^2([a, b], dx), \phi' \in L^2([a, b], dx) \}$ größer als $D(\hat{p}) \subset D(\hat{p}^\dagger)$.

Damit ist \hat{p} auf $D(\hat{p})$ hermitesch, aber nicht selbstadjungiert: Zwar wirkt der hermitesch adjungierte Operator \hat{p}^\dagger in gleicher Weise wie \hat{p} , dennoch sind sie nicht gleich, da ihre Definitionsbereiche unterschiedlich sind. Da \hat{p} nicht selbstadjungiert ist, gilt für ihn auch nicht, dass ein Satz paarweise orthogonaler Eigenfunktionen aus $D(\hat{p})$ eine vollständige Basis des Hilbertraums ergeben.

Derartige Komplikationen sind für Observable auf einem Hilbertraum \mathcal{H} nicht selten. Sie treten insbesondere für solche Operatoren auf $\mathcal{H} = L^2([a, b], dx)$ auf,

1. deren Spektrum nicht beschränkt ist, was für \hat{p} der Fall ist, welcher auf \mathcal{H} beliebig große, positive und negative Eigenwerte aufweisen kann; der Definitionsbereich solcher Operatoren kann nur ein Teil des Hilbertraums sein;
2. deren Spektrum einen kontinuierlichen Teil aufweist; ihre entsprechenden Eigenvektoren gehören zu einem Raum, der größer als \mathcal{H} ist. Beispielsweise sind die Eigenfunktionen des Ortsoperators nicht quadratintegral: Das Integral über $|\delta(x - x_0)|^2$ ist nicht definiert, $\delta(x - x_0) \notin L^2([a, b], dx)$.

Von Neumann hat gezeigt, dass einer oder mehr Operatoren, welche in kanonischen Vertauschungsrelationen $[q_i, p_j] \sim \delta_{ij}$ vorkommen, ein unbeschränktes Spektrum besitzen. Damit ist die Definition solcher Operatoren immer nur auf einem Unterraum von L^2 möglich, was etwa die Notwendigkeit von Randbedingungen mit sich bringt. Die daraus resultierenden Unterräume von L^2 , zusammen mit \mathcal{H} sowie den

1.7. Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen

notwendigen Erweiterungen von \mathcal{H} , welche die generalisierten Eigenvektoren zum kontinuierlichen Teil der Spektren enthalten, bilden sogenannte *Gelfand-Tripel*. Zum Beispiel: $S(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}, dx) \subset S'(\mathbb{R})$.

Der Schwartz-Raum $S(\mathbb{R})$ der quadratintegrierbaren Funktionen, welche für $x \in \mathbb{R}$, $|x| \rightarrow \infty$ schneller als jede Potenz verschwinden, ist ein dichter Unterraum des $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Jede Funktion $\psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ definiert eine *Distribution* $\omega_\psi \in S'(\mathbb{R})$,

$$\omega_\psi : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto \omega_\psi(\phi) = \int dx \psi^*(x)\phi(x). \quad (1.7.201)$$

Darüberhinaus enthält $S'(\mathbb{R})$ Distributionen, wie die von Dirac,

$$\delta_{x_0} : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto \delta_{x_0}(\phi) = \phi(x_0) \quad (1.7.202)$$

($\delta_{x_0}(\phi) := \int dx \delta(x - x_0) \phi(x) = \phi(x_0)$), oder die Fouriertransformierte

$$l_p : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto l_p(\phi) = \int dx \psi_p^*(x)\phi(x), \quad (1.7.203)$$

mit $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$, so dass $l_p(\phi) = \mathcal{F}[\phi]$. Weder $\delta(x - x_0)$ noch ψ_p gehören zu $L^2(\mathbb{R}, dx)$, was jedoch die Vollständigkeit von L^2 nicht schmälert. (Es ist zwar möglich, z.B. eine Folge quadratintegrierbarer Funktionen,

$$\delta_n(x) = \theta(x + s/2n) \theta(s/2n - x) n/s \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta(x), \quad (1.7.204)$$

zu wählen, welche für $n \rightarrow \infty$ gegen die Dirac-Distribution konvergiert. Jedoch ist die Folge der L^2 -Normen der Folgenglieder nicht konvergent und damit keine Cauchy-Folge. Die Vollständigkeit erfordert jedoch, dass jede Cauchy Folge bzgl. der Norm konvergiert.)

All dies mag man im Hinterkopf behalten, wenn man gemäß der Dirac-Schreibweise Skalarprodukte bildet, in denen solche "nicht- L^2 Funktionen" vorkommen und welche dadurch zu Distributionen werden.

In der Praxis wird zu beachten sein:

- δ -Distributionen mit gleichem Argument nicht miteinander multiplizieren. Gleiches gilt für $\delta(x)\Theta(x)$.
- Auf geeignete Wahl der Randbedingungen achten.
- Ggf. ein unendliches Intervall endlich machen und erst zum Schluss den Limes unendlichen Volumens betrachten.
- Ggf. Distributionen mit Testfunktionen ausschmieren (\rightarrow s. unsere spätere Diskussion von Wellenpaketen).

Wer sich hier weiterbilden möchte, sei auf Lehrbücher der mathematischen Physik verwiesen, z.B. V. F. Müller, *Quantenmechanik* (Oldenbourg, München, 2000) [13], J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, 1968) [14]. A nice introduction is found in F. Gieres, Rep. Prog. Phys. 63, 1893 (2000) [8].

1.8. Wellenfunktionen im Impulsraum

1.8.1. Wellenfunktion der Impulseigenzustände

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

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p-p'). \quad (1.8.205)$$

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

$$|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \underbrace{\phi_\alpha(p)}_{\text{Wellenfunktion im Impulsraum}}. \quad (1.8.206)$$

Wir suchen jetzt den Zusammenhang zwischen $|x\rangle$ und $|p\rangle$. Insbesondere möchten wir $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ berechnen. Dies entspricht der Wellenfunktion des Impulseigenzustands $|p\rangle$ in der Ortsdarstellung. Aus (1.7.191) gewinnen wir durch Multiplikation beider Seiten mit $\langle x|$, dass

$$\forall |\alpha\rangle: \quad \langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|\alpha\rangle. \quad (1.8.207)$$

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

$$p\langle x|p\rangle = \langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|p\rangle. \quad (1.8.208)$$

$$(1.8.209)$$

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

$$\partial_x\langle x|p\rangle = \frac{i}{\hbar}p\langle x|p\rangle \quad (1.8.210)$$

mit Lösung

$$\langle x|p\rangle = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right), \quad (1.8.211)$$

worin $\mathcal{N} \neq 0$ eine durch die Eigenwertgleichung nicht festgelegte Konstante bezeichnet. Wir bemerken, dass diese Eigenfunktion des Impulsoperators auf \mathbb{R} nicht normierbar ist,

$$\int dx |\langle x|p\rangle|^2 = |\mathcal{N}|^2 \int dx = \infty, \quad (1.8.212)$$

weswegen wir \mathcal{N} nicht als Normierungskonstante auffassen können.

Die Konstante \mathcal{N} ist jedoch durch die Ortseigenfunktion $\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$ festgelegt, welche sich durch Einschieben des Einsoperators als Superposition der Eigenfunktionen des Impulsoperators darstellen läßt,

$$\langle x'|x\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|x\rangle \quad (1.8.213)$$

$$= \int dp' |\mathcal{N}|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}p'(x'-x)\right). \quad (1.8.214)$$

Verwenden wir $\int dk e^{ikx} = 2\pi\delta(x)$, so ergibt sich, dass $\langle x'|x\rangle = 2\pi\hbar|\mathcal{N}|^2\delta(x'-x)$. Damit $\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$ folgt, muss $|\mathcal{N}|^2 = 1/(2\pi\hbar)$ sein. So erhalten wir das wichtige Ergebnis:

Der Impuls-Eigenzustand $|p\rangle$ mit festem Impuls p ist im Ortsraum durch eine ebene Welle dargestellt,

$$\langle x|p\rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}. \quad (1.8.215)$$

1.8.2. Zusammenhang von $\psi_\alpha(x)$ und $\phi_\alpha(p)$ für beliebiges $|\alpha\rangle$

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

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\alpha\rangle. \quad (1.8.216)$$

Mit Hilfe des Matrixelements (1.8.215) zwischen Orts- und Impulseigenzustand und $\langle p|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p)$ wird daraus

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \phi_\alpha(p). \quad (1.8.217)$$

Ebenso berechnen wir $\phi_\alpha(p) = \langle p|\alpha\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\alpha\rangle$, woran wir ablesen können, dass

$$\phi_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi_\alpha(x). \quad (1.8.218)$$

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

$$\mathcal{F} : \psi_\alpha(x) \mapsto \mathcal{F}[\psi_\alpha](p) = \phi_\alpha(p), \quad (1.8.219)$$

$$\mathcal{F}^{-1} : \phi_\alpha(p) \mapsto \mathcal{F}^{-1}[\phi_\alpha](x) = \psi_\alpha(x). \quad (1.8.220)$$

Kommentare

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

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}, \quad \text{mit } k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.8.221)$$

also

$$\text{Teilchen mit Impuls } p \leftrightarrow \text{Ebene Welle mit Wellenzahl } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}. \quad (1.8.222)$$

1. Grundlagen der Quantenmechanik

Dies ist die de-Broglie-Relation für Materiewellen,

$$p = \hbar k. \quad (1.8.223)$$

Man kann diese Relation experimentell, z.B. mittels Elektronenstreuung an Kristallgittern (Davisson-Germer, 1927 [3]), untersuchen und auf diese Weise die Naturkonstante $\hbar = h/(2\pi) = (2\pi)^{-1} \cdot 6.67 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ experimentell bestimmen.

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

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar, \quad (1.8.224)$$

$$(\hat{x}\phi)(p) = +i\hbar \partial_p \phi(p). \quad (1.8.225)$$

Obige Relationen für eindimensionale Systeme können sofort auf \mathbb{R}^3 verallgemeinert werden,

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad \langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle \quad (1.8.226)$$

sowie

$$\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}) = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}\rangle = -i\hbar \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}). \quad (1.8.227)$$

Wir erhalten daraus

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \phi_{\alpha}(\mathbf{p}), \quad (1.8.228)$$

$$\phi_{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}), \quad (1.8.229)$$

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}. \quad (1.8.230)$$

1.8.3. Gaußsches Wellenpaket

Abschließend betrachten wir noch als ein weiteres wichtiges Beispiel für eine Wellenfunktion im Ortsraum, welche keine ebene Welle darstellt, das Gaußsche Wellenpaket:

$$\psi_{\alpha}(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + ikx}, \quad a \in \mathbb{R}^+. \quad (1.8.231)$$

In den Übungen werden wir folgende Erwartungswerte berechnen:

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

Daraus folgt unmittelbar, dass

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.8.232)$$

1.8. Wellenfunktionen im Impulsraum

Dies bedeutet, dass $\psi_\alpha(x)$ *minimale* Unschärfe hat ($\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$). Man kann zeigen, dass dies die einzige Wellenfunktion ist, welche die Unschärfeungleichung saturiert. Gaußsche Wellenfunktionen bezeichnet man daher im Englischen oft als “maximum uncertainty states”.

Durch expliziten Vergleich der Wellenfunktionen im Orts- und Impulsraum erkennen wir den Zusammenhang

$$\text{Lokalisierung im Ortsraum-Raum} \quad \leftrightarrow \quad \text{Delokalisierung im Impulsraum} \quad (1.8.233)$$

$$\Delta x \rightarrow 0 \quad \leftrightarrow \quad \Delta p \rightarrow \infty \quad (1.8.234)$$

Anders ausgedrückt:

$$|\alpha\rangle \text{ stark lokalisiert im } x\text{-Raum} \quad \leftrightarrow \quad \phi_\alpha(p) \text{ signifikant über weiten Impuls-Bereich} \quad (1.8.235)$$

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

2. Quantendynamik

2.1. Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung

Die Zeitentwicklung wird in der QM standardmäßig nur *parametrisch* erfasst: Die Zustände als Elemente (Vektoren) des Hilbertraumes bewegen sich in der Zeit, in der Regel in kontinuierlicher Weise, in diesem Raum. Konzepte, welche einen *Operator für Zeit* als Observable beinhalten, wurden seit Paulis Feststellung, dass diese der Beschränktheit des Energiespektrums nach unten widersprüchen, wiederholt vorgeschlagen,¹ haben sich aber bislang nicht durchsetzen können. Vielmehr hat sich als Verallgemeinerung der QM die *Quantenfeldtheorie* als tragfähig erwiesen, in der *sowohl Ort wie auch Zeit parametrisch behandelt* werden und die damit auch für relativistische Systeme mit Lorentz- und Poincare-Symmetrie gilt. In diesem ersten Abschnitt stellen wir eine Beschreibung der Zeitentwicklung von Zuständen im Hilbertraum mittels eines Zeitentwicklungsoperators auf. Anschließend führen wir einen Generator für infinitesimale Zeitentwicklungen ein und identifizieren ihn mit einer Quantenversion der Hamiltonfunktion. Dies führt uns zur Schrödingergleichung für den Zeitentwicklungsoperator und damit für Zustände im Hilbertraum. Abschließend besprechen wir das System der Energie-Eigenzustände des Hamilton-Operators als Basis des Raums.

Gegeben sei ein Zustand $|\alpha\rangle$ zur Zeit t_0 . Wir schreiben im Folgenden $|\alpha, t_0\rangle$. t_0 ist hier ein Parameter, nicht Eigenwert bzw. "Quantenzahl". Wir wollen nun analysieren, in welchem Zustand sich das System zur Zeit t befindet. Wir parametrisieren dazu die Zeitabhängigkeit, indem wir den Zustand zur Zeit t als $|\alpha, t\rangle$ schreiben.²

Ähnlich (aber nicht entsprechend) dem Translationsoperator $\hat{T}(\Delta x)$ führen wir den *Zeitentwicklungsoperator* $\hat{U}(t, t_0)$ ein:

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle . \quad (2.1.1)$$

Für $\hat{U}(t, t_0)$ fordern wir folgende Eigenschaften:

¹Ein Zeitoperator \hat{t} sollte kanonisch konjugiert sein zum Hamilton-Operator im Sinne von $[\hat{H}, \hat{t}] = i\hbar$. W. Pauli hat bewiesen, dass ein solcher Operator nicht selbst-adjungiert sein kann, denn dies würde der Existenz eines minimalen Energie-Eigenwertes widersprechen. Siehe dazu: W. Pauli, *Die allg. Prinzipien der Wellenmechanik* [15]. Allerdings kann ein Operator \hat{t} definiert werden, der schwächere Eigenschaften erfüllt (insbesondere Hermitizität). Eine Diskussion, inwieweit dies ausreicht, um einen Zeitoperator sinnvoll zu definieren, findet sich z.B. in V. S. Olkhovsky, *Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy, and Foundations of Self-Consistent Time Analysis of Quantum Processes*, [16] oder K. Boström [17, 18].

²In dieser Notation darf man der "Quantenzahl" α keine absolute Bedeutung geben. Ist beispielsweise α ein Index oder Eigenwert, welcher einen Eigenzustand $|\alpha\rangle$ eines Operators markiert, so bezieht sich diese Bedeutung auf einen gewissen Zeitpunkt, etwa t_0 , wie hier mit $|\alpha, t_0\rangle \equiv |\alpha\rangle$ impliziert. Zu einem anderen Zeitpunkt $t \neq t_0$ entspricht dann der Zustand $|\alpha, t\rangle$ in aller Regel nicht dem Eigenzustand zum Index/Eigenwert α – es sei denn es handelt sich um einen Energie-Eigenzustand des Hamiltonians, welcher auch die Zeitentwicklung bestimmt. Falls also die Bezeichnung mittels α auf eine feste Zeit t_0 bezogen ist, sollten wir den Zustand eher als $|\alpha, t_0; t\rangle$ schreiben, um diesen Bezug festzuhalten, wobei $|\alpha, t_0; t_0\rangle \equiv |\alpha, t_0\rangle$. Hier und im Folgenden werden wir die Bedeutung von α erst einmal nicht weiter festlegen sondern lediglich den Bezug zwischen Zuständen zu verschiedenen Zeiten $t \geq t_0$ diskutieren.

2.1. Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung

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

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \alpha, t | \alpha, t \rangle = 1.$$

- Transitivität: $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$, wobei $t_0 \leq t_1 \leq t_2$, damit sich jeder Zustand $|\alpha, t\rangle$ mittels \hat{U} eindeutig in jeden anderen Zustand $|\alpha, t'\rangle$ evolvieren läßt.
- Stetigkeit: $\lim_{\delta t \rightarrow 0} \hat{U}(t_0 + \delta t, t_0) = \mathbb{1} = \hat{U}(t_0, t_0)$.

Um den Zeitentwicklungsoperator für ein gegebenes physikalisches System zu bestimmen, gehen wir ähnlich vor wie in der klassischen Mechanik, so, wie wir das schon beim Translationsoperator und dem Impuls als dessen Generator getan haben. Die Stetigkeit von \hat{U} ist eine Voraussetzung für eindeutige Differenzierbarkeit, welche wir als Konsequenz aus diesem Vorgehen benötigen werden. Wie bei der Translation im Ortsraum nehmen wir an, dass die eine infinitesimale Zeittranslation um dt durch einen Operator $\hat{\Omega}$ erzeugt wird, welcher durch eine Entwicklung von $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$ zu erster Ordnung in dt definiert ist,

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i \hat{\Omega}(t_0) dt. \quad (2.1.2)$$

Die Zeittranslation erfolgt damit im Tangentialraum zu konstanter Norm des Zustands, d.h., \hat{U} ist unitär, falls $\hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}$ hermitesch ist. Auch Transitivität und Stetigkeit sind erfüllt, $\hat{\Omega}(t_0)$ generiert also zum Zeitpunkt t_0 die Zeittranslation um dt .

Wie im Kontext von \hat{T} sowie des Impulses \hat{p} interpretieren wir $\hat{\Omega}$, indem wir uns an der klassischen Dynamik orientieren: *Klassisch* generiert die Hamiltonfunktion die Zeittranslation von Funktionen, welche auf dem Phasenraum definiert sind. Da wir hier zunächst die Zeittranslation der Zustände betrachten, aber noch nicht die der Phasenraum-Variablen bzw. Operatoren und der daraus zusammengesetzten Operatoren, verweisen wir für die Details auf Abschnitt 2.4 und postulieren hier vorab, dass der Generator proportional zum Hamilton-Operator ist,

$$\hat{\Omega} \leftrightarrow \hat{H} \quad \hat{H} = \text{Hamilton-Operator} = \text{Observable der Energie}. \quad (2.1.3)$$

Eine Einheitenbetrachtung ergibt unmittelbar, dass $[\hat{\Omega}] = 1/\text{Zeit}$, während $[\hat{H}] = \text{Energie} = \text{Wirkung}/\text{Zeit}$. Daraus folgt wiederum, dass eine Konstante mit Einheit einer Wirkung einzufügen ist, und wir postulieren, dass

$$\hat{\Omega} = \frac{1}{\hbar} \hat{H}. \quad (2.1.4)$$

Bemerkungen: (a) Die Proportionalitätskonstanten in $\hat{K} = \hat{p}/\hbar$ und $\hat{\Omega} = \hat{H}/\hbar$ müssen nicht a priori dieselben sein. Dass \hbar die Proportionalitätskonstante darstellt, ergibt sich später aus den Bewegungsgleichungen und muss darüberhinaus experimentell untermauert werden.

(b) Der Einfachheit halber nehmen wir hier zunächst an, dass \hat{H} nicht explizit zeitabhängig ist. Wir werden auf den allgemeinen Fall eines zeitabhängigen Hamiltonoperators aber auch gleich noch zurückkommen.

Zur Herleitung der bestimmenden Gleichung für $\hat{U}(t, t_0)$ entwickeln wir:

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

Dies entspricht:

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \right) \hat{U}(t, t_0) \quad (2.1.5)$$

Quantendynamik

Eine Taylorentwicklung von $\hat{U}(t + dt, t_0)$ zur führenden Ordnung ergibt alternativ hierzu:

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t, t_0) + dt \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0), \quad (2.1.6)$$

so dass in Kombination der beiden Ausdrücke die Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (2.1.7)$$

resultiert. Zusammen mit der Definition des Zeitentwicklungsoperators, $|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle$, erhalten wir daraus die

Schrödingergleichung für die Zeitentwicklung eines Zustands:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = \hat{H} |\alpha, t\rangle. \quad (2.1.8)$$

Die Gleichung (2.1.7) für $\hat{U}(t, t_0)$ mit der Randbedingung $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ kann auch für sich allgemein gelöst werden:

- Falls \hat{H} wie angenommen konstant in t ist, gilt einfach $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$. Diese Funktion des Operators \hat{H} ist definiert über die Taylorreihe der Exponentialfunktion.
- Falls $\hat{H} = \hat{H}(t)$ explizit zeitabhängig ist, schreiben wir (2.1.7) in eine Integralgleichung um,

$$\underbrace{\int_{t_0}^t dt' i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t', t_0)}_{i\hbar[\hat{U}(t, t_0) - \mathbb{1}]} = \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0), \quad (2.1.9)$$

woraus folgt:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0). \quad (2.1.10)$$

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

Dyson-Reihe

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n). \quad (2.1.11)$$

Umgekehrt sieht man daran, dass eine Ableitung der Dyson-Reihe nach t in jedem Term das Integral über t_1 entfernt, t_1 bei t auswertet und somit insgesamt die Reihe mit einem Faktor $-i\hat{H}(t)/\hbar$ multipliziert, so dass der durch die Dyson-Reihe gegebene Operator $\hat{U}(t, t_0)$ in der Tat die Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \text{mit} \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad (2.1.12)$$

2.1. Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung

erfüllt, worin $\hat{H}(t)$ zur Zeit t ausgewertet ist.

Bemerkungen:

- Die Zeiten in jedem Term der Dyson-Reihe (2.1.11) sind chronologisch geordnet:

$$t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n \geq t_0.$$

Nimmt man wieder $\hat{H}(t) \equiv \hat{H}$ an, so kann man \hat{H}^n aus den Integralen herausziehen und alle Integrallimites zu $\int_{t_0}^t dt_i$ erweitern, wenn man das Produkt der Integrale mit $1/n!$ multipliziert. Damit vereinfacht sich die Dyson-Reihe zu

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H} \right\} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}. \quad (2.1.13)$$

- Die vorige Rechnung gilt ebenso, wenn der Hamilton-Operator zwar zeitabhängig ist, zu verschiedenen Zeiten aber mit sich selbst kommutiert, also $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] = 0$ für beliebige $t_i \neq t_j$. Dann ist

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right\}. \quad (2.1.14)$$

- Im allgemeinen Fall $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] \neq 0$ muss die Reihenfolge der $\hat{H}(t_i)$ in den Vielfachintegralen der Dyson-Reihe eingehalten werden. Zum Beispiel gilt in zweiter Ordnung ($\hat{H}_{t_i} \equiv \hat{H}(t_i)$):

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) = \frac{1}{2} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}_{t_1} \hat{H}_{t_2} + \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \hat{H}_{t_2} \hat{H}_{t_1} \right], \quad (2.1.15)$$

wobei wir im zweiten Term $t_1 \leftrightarrow t_2$ umbenannt haben. Da im zweiten Term über das obere Dreieck im Quadrat $\{t_1 \in [0, t], t_2 \in [0, t]\}$ integriert wird, können wir die Terme zusammenziehen,

$$(2.1.15) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[\theta(t_1 - t_2) \hat{H}_{t_1} \hat{H}_{t_2} + (1 - \theta(t_1 - t_2)) \hat{H}_{t_2} \hat{H}_{t_1} \right], \quad (2.1.16)$$

worin die Heaviside theta-Funktionen ($\theta(t) = 1$ für $t \geq 0$, $\theta(t) = 0$ für $t < 0$) für die richtige Reihenfolge der \hat{H}_{t_i} sorgen.

Wir definieren den Zeitordnungsoperator \mathcal{T} ,

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}(\hat{A}(t_1) \dots \hat{A}(t_n)) \\ &= \sum_{P(1, \dots, n)} \theta(t_{P_1} - t_{P_2}) \theta(t_{P_2} - t_{P_3}) \dots \theta(t_{P_{n-1}} - t_{P_n}) \hat{A}(t_{P_1}) \hat{A}(t_{P_2}) \dots \hat{A}(t_{P_n}), \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

welcher für die Anordnung der $\hat{A}(t_i)$ in aufsteigender Zeitfolge, $t_{P_1} \geq t_{P_2} \geq \dots \geq t_{P_n}$, von rechts nach links sorgt. $P(1, \dots, n) = (P_1, \dots, P_n)$ bezeichnet hier die Permutationen der natürlichen Zahlen $\leq n$. Damit gilt, dass

$$(2.1.15) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{T}(\hat{H}_{t_1} \hat{H}_{t_2}) \quad (2.1.18)$$

und allgemein für die \hat{U} darstellende Reihe:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \mathcal{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right\} \\ &= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_0^t \prod_{i=1}^n dt_i \mathcal{T}(\hat{H}_{t_1} \dots \hat{H}_{t_n}). \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

2.1. Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung

Damit läßt sich das zeitgeordnete Exponentialintegral auch als zeitgeordnetes Produkt schreiben,

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \prod_{t'=0}^t \left(1 - \frac{i}{\hbar} dt' \hat{H}(t') \right), \quad (2.1.20)$$

was insbesondere für die numerische Auswertung nützlich ist und uns später zur Pfadintegraldarstellung führen wird.

Noch einige grundsätzliche Bemerkungen:

- Die Schrödingergleichung (SG) ist eine *lineare* Differentialgleichung (DGL) *erster Ordnung* in t . Zu ihrer Lösung benötigt man als Anfangswert also nur den Zustand $|\alpha, t_0\rangle$ zur Zeit $t = t_0$. Dies steht im Gegensatz zu den klassischen Bewegungsgleichungen für kanonische Koordinatenpaare. Wir werden jedoch sehen, dass man in gewissem Sinne Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion als kanonisch konjugiert zueinander auffassen kann (\rightarrow Kohärente Zustände des Harmonischen Oszillators).
- Die Zeitentwicklung des Zustands $|\alpha\rangle$ unter der SG ist *völlig deterministisch*. Der probabilistische Charakter der Quantenmechanik kommt erst durch den Messprozess zustande. Das ungestörte Teilchen propagiert *unitär*.

Von besonderem Interesse sind im folgenden die

Energie-Eigenzustände:

Im folgenden betrachten wir $\hat{H} \equiv \text{const.}$ in der Zeit, in welchem Fall die Eigenzustände $\{|a\rangle\}$ von \hat{H} ,

$$\hat{H}|a\rangle = E_a|a\rangle, \quad (2.1.21)$$

ebenfalls zeitunabhängig sind und eine Orthonormalbasis im unendlich-dimensionalen Hilbertraum bilden. Wir vergleichen die Zeitentwicklung eines solchen Energie-Eigenzustands mit der eines allgemeinen Zustands.

- Hierfür bestimmen wir zunächst die Zeitentwicklung des Energie-Eigenzustands $|a\rangle$:

$$\text{Sei } |\alpha, t_0\rangle = |a\rangle \quad \Rightarrow \quad |\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\alpha, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}|a\rangle. \quad (2.1.22)$$

Dies bedeutet, dass jeder Energie-Eigenzustand im Laufe der Zeitentwicklung lediglich mit einem Phasenfaktor multipliziert wird. Hieraus folgt daß der Erwartungswert eines beliebigen Operators \hat{B} bzgl. eines Energie-Eigenzustands zeitunabhängig ist,

$$\langle a|\hat{B}|a\rangle \rightarrow \langle a|e^{\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}\hat{B}e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}|a\rangle = \langle a|\hat{B}|a\rangle. \quad (2.1.23)$$

Ein Energie-Eigenzustand $|a\rangle$ heißt deshalb *stationärer Zustand* – seine zeitabhängige Phase läßt Erwartungswerte stationär.

- Zum Vergleich wählen wir einen allgemeinen Zustand $|\alpha\rangle$, welchen wir stets in den Energie-Eigenzuständen $\{|a\rangle\}$ entwickeln können,

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_a c_a(t_0)|a\rangle. \quad (2.1.24)$$

Der Zustand zur Zeit t lautet dann

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= \sum_a c_a(t) |a\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \sum_a c_a(t_0) |a\rangle \\ &= \sum_a c_a(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(t-t_0)} |a\rangle, \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

d.h., $c_a(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(t-t_0)} c_a(t_0)$. Der Zustand ist damit i.allg. ein *nicht-stationärer Zustand*, und zwar dann, wenn mehr als ein Eigenzustand $|a\rangle$ zur Summe beiträgt, also mehr als ein $c_a(t_0) \neq 0$ ist.

Wir formulieren hieraus folgende **allgemeine Lösungsstrategie** für die Schrödingergleichung, für den Fall eines zeitunabhängigen Hamilton-Operators:

- Entwickle $|\alpha, t_0\rangle$ in einer Eigenbasis von \hat{H} ,

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_a c_a(t_0) |a\rangle. \quad (2.1.26)$$

- Der Zustand zur Zeit t resultiert zu $|\alpha, t\rangle = \sum_a c_a(t) |a\rangle$ mit $c_a(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(t-t_0)} c_a(t_0)$.

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

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= \sum_a c_a(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(t-t_0)} |a\rangle \\ &= \sum_a \langle a | \alpha, t_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(t-t_0)} |a\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \sum_a |a\rangle \langle a | \alpha, t_0 \rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle, \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

wobei wir die Vollständigkeit der Basis, $\sum_a |a\rangle \langle a| = 1$, ausgenutzt haben.

2.2. Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator

2.2.1. Schrödingergleichung im Ortsraum

Im folgenden gehen wir einen Schritt zurück von unserer allgemeinen Formulierung mittels Zuständen im Hilbertraum und betrachten spezifische Darstellungen dieser Zustände, zunächst wieder im Ortsraum. Dies führt uns zur bekannten Form der Schrödingergleichung als Differentialgleichung in Raum und Zeit. Darüberhinaus werden wir die Schrödingergleichung für den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} in Ortsdarstellung kennenlernen. Eine solche Darstellung des Operators \hat{U} entspricht einer unendlichdimensionalen Matrix $\langle x | \hat{U} | y \rangle$, welche eng mit dem sogenannten Propagator der Schrödingergleichung verbunden ist.

Wir können die Schrödingergleichung (SG) für einen allgemeinen zeitabhängigen Zustand $|\alpha, t\rangle$,

$$i\hbar \partial_t |\alpha, t\rangle = \hat{H} |\alpha, t\rangle, \quad (2.2.28)$$

2.2. Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator

in eine Gleichung für die Wellenfunktion $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle$ umschreiben. Im gewöhnlichen Fall eines *zeitunabhängigen* Hamilton-Operators hat \hat{H} die Form

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad \text{mit} \quad \hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \quad \hat{V} = V(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.2.29)$$

Hier ist $\hat{T} = T(\hat{\mathbf{p}})$ der Operator der kinetischen und $V(\hat{\mathbf{x}})$ der Operator der potentiellen Energie. Wir werten die SG in Ortsdarstellung, definiert wie zuvor als $\langle \mathbf{x} | i\hbar\partial_t | \alpha, t \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{H} | \alpha, t \rangle$, mithilfe der folgenden Identitäten aus:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \alpha, t \rangle = -i\hbar\nabla\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.30)$$

$$\langle \mathbf{x} | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} | \alpha, t \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.31)$$

$$\langle \mathbf{x} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \alpha, t \rangle = V(\mathbf{x})\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.32)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\partial_t\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle. \quad (2.2.33)$$

Damit erhalten wir die Darstellung der

Schrödingergleichung im Ortsraum,

$$i\hbar\partial_t\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (2.2.34)$$

Beachte: Wenn $\psi(\mathbf{x}, t)$ Lösung ist, so ist $\psi(\mathbf{x}, -t)$ keine Lösung derselben SG, weil die SG eine DGL erster Ordnung in t und damit der Zeitentwicklungsoperator nicht symmetrisch unter der Zeitumkehr ist. Da der Zeitentwicklungsoperator $\sim i\partial_t$ proportional zur imaginären Einheit ist, und außerdem der Hamilton-Operator als invariant unter der Zeitumkehr angenommen wurde, ergibt sich also aus der SG, dass $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ genau dann eine Lösung ist, wenn $\psi(\mathbf{x}, t)$ eine Lösung ist. Dies bedeutet also, daß die SG invariant unter der Zeitumkehr $t \rightarrow -t$ ist, wenn man gleichzeitig die Lösung komplex konjugiert, d.h., sie besitzt Lösungen für positive wie für negative Zeitrichtung, welche voneinander abhängig sind,

$$t \rightarrow -t \quad \Rightarrow \quad \psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi^*(\mathbf{x}, -t).$$

Dies ist der tiefere Grund dafür, dass der Hilbertraum der Zustände ein *komplexer* Vektorraum sein muss. Andernfalls wäre keine Zeitumkehr-invariante Bewegungsgleichung erster Ordnung in t möglich. Unter der gegenteiligen Annahme, dass der Zustandsraum ein reeller VR sei, müsste $\hat{U}(t, t_0)$ orthogonal sein, d.h., $\hat{U}^T = U^{-1}$, um eine Norm-erhaltende Zeitentwicklung und damit die Wahrscheinlichkeitsinterpretation des Quadrats der Wellenfunktion sicherzustellen. Die SG wäre damit reell und nicht Zeitumkehr-invariant.³ Abschließend sei noch bemerkt, dass die Annahme der Zeitumkehrinvarianz von \hat{H} konsistent mit der Beobachtung ist, dass diese Symmetrie ausschließlich von der schwachen Wechselwirkung verletzt wird, deren Betrachtung wir hier ausschließen wollen.

Auch in der Ortsdarstellung ergibt sich aus der SG die einfache Zeitentwicklung für *Energie-Eigenzustände* $|a, t_0\rangle$, welche durch $\hat{H}|a, t_0\rangle = E_a|a, t_0\rangle$, mit, möglicherweise (teilweise) entarteten, Energie-

³Eine solche Form hat z.B. die Diffusionsgleichung, $\partial_t P(x, t) = D\Delta P(x, t)$, welche etwa das einseitige Zerfließen einer anfangs lokalisierten Verteilung $P(x, t)$ beschreibt. Die rückwärts in der Zeit laufende Entwicklung wird durch eine entsprechende Gleichung beschrieben, für die $D \rightarrow -D$ zu ersetzen ist.

Quantendynamik

Eigenwerten E_a , definiert sind:

$$\psi_a(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t - t_0) | a, t_0 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_a (t - t_0)} \psi_a(\mathbf{x}, t_0). \quad (2.2.35)$$

Eingesetzt in die SG ergibt dies die⁴

Stationäre Schrödingergleichung,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi_a(\mathbf{x}, t) = E_a \psi_a(\mathbf{x}, t), \quad \text{Erwin Schrödinger (1926),} \quad (2.2.36)$$

deren Lösungen die Wellenfunktionen der Energie-Eigenzustände darstellen.

Die allgemeinen Lösungen der zeitabhängigen SG $i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = (\hat{H}\psi)(\mathbf{x}, t)$ lassen sich damit wie folgt ermitteln:

- Finde eine Energie-Eigenbasis von Wellenfunktionen:

$$\hat{H}\chi_n(\mathbf{x}) = E_n \chi_n(\mathbf{x}), \quad \int d^3x \chi_m^*(\mathbf{x}) \chi_n(\mathbf{x}) = \delta_{mn}. \quad (2.2.37)$$

- Entwickle die Wellenfunktion des Anfangszustands in dieser Basis:

$$\psi(\mathbf{x}, t_0) = \sum_n c_n \chi_n(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad c_n = \int d^3y \chi_m^*(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.38)$$

- Es folgt sofort, dass

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)} \chi_n(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3y \sum_n \chi_n^*(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)} \chi_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

Damit erhält man

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) \psi(\mathbf{y}, t_0), \quad (2.2.40)$$

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)} \chi_n^*(\mathbf{y}) \chi_n(\mathbf{x}). \quad (2.2.41)$$

(2.2.41) definiert eine Darstellung des *Propagators* mittels der Energie-Eigenfunktionen.

2.2.2. Beispiel eines kräftefreien Teilchens

Wir demonstrieren dies am Beispiel des kräftefreien Teilchens in einer Dimension, dessen Hamilton-Operator keinen Potentialterm aufweist,

⁴Siehe die Serie der vier "Mitteilungen" Schrödingers in den Annalen der Physik, Ref. [19–22], eingereicht zwischen 27. Januar und 21. Juni 1926. Zur expliziten Form der zeitabhängigen Schrödingergleichung gelangte der Autor erst in der 4. Mitteilung [22].

2.2. Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.2.42)$$

Wir suchen zunächst die Energie-Eigenzustände, definiert durch $-(\hbar^2/2m)d^2u(x)/dx^2 = E u(x)$. Der Lösungsraum dieser Gleichung wird von den Funktionen

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad u_{-k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} = u_k^*(x) \quad (2.2.43)$$

aufgespannt. Die zugehörigen Energie-Eigenwerte lauten

$$E_{\pm k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.2.44)$$

welche aufgrund der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie $x \rightarrow -x$ (Paritätssymmetrie) des Hamilton-Operators \hat{H} (entsprechend derselben Symmetrie der klassischen Hamiltonfunktion) jeweils *zweifach entartet* sind.

Wir wollen nun, ausgehend von dieser Basis von Eigenzuständen zum kontinuierlichen Spektrum der kinetischen Energie die volle SG $i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = (\hat{H}\psi)(\mathbf{x}, t)$ lösen. Als Beispiel wählen wir hierfür einen Anfangszustand zur Zeit $t_0 = 0$, welcher durch ein **Gaußsches Wellenpaket**, $\psi(x, 0) = (a/\pi)^{\frac{1}{4}} \exp(-ax^2/2)$,⁵ definiert ist und folgen hernach unserem allgemeinen Lösungsschema:

1. Schritt: Expansion des Anfangszustands in Energie-Eigenfunktionen u_k :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk c(k) e^{ikx}, \quad \text{mit} \quad c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (2.2.45)$$

2. Schritt: Zeitpropagation:

$$\psi(x, t) = \int dk c(k) e^{ikx} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \int dk c(k) e^{ikx - i\hbar(k^2/2m)t}. \quad (2.2.46)$$

3. Schritt: Explizite Lösung: Mithilfe des in die komplexe Ebene erweiterten Gauß-Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ak^2 \pm ibk} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}} \quad (2.2.47)$$

berechnen wir

$$c(k) = \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-k^2/(2a)}, \quad \psi(x, t) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + i\gamma(t)}} e^{-\frac{1}{2}(x^2 a/[1+i\gamma(t)])}, \quad (2.2.48)$$

worin $\gamma(t) = \hbar a(t - t_0)/m$. Der Gaußsche Exponentialfaktor läßt sich in eine Amplitude und eine Phase faktorisieren,

$$\exp\left\{-\frac{x^2}{2} \frac{a}{1 + i\gamma(t)}\right\} = \exp\left\{-\frac{x^2 a}{2(1 + \gamma^2(t))}\right\} \exp\left\{i \frac{x^2 a \gamma(t)}{2(1 + \gamma^2(t))}\right\} \quad (2.2.49)$$

woraus folgt, dass die Breite des Gaußpakets entsprechend der Zeitabhängigkeit von γ zunimmt. Nach

⁵Vgl. Abschnitt 1.8.3.

Quantendynamik

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

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)_{t=0}^2}. \quad (2.2.50)$$

Wegen $(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \hbar^2 / 4$ zur Zeit $t = 0$, bei der die Wellenfunktion ein Gaußsches Wellenpaket darstellt, schreiben wir dies als

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{(\Delta p)_{t=0}^2}{m^2} t^2. \quad (2.2.51)$$

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

Zusätzliche Anmerkungen:

- Das Wellenpaket ist und bleibt zu allen Zeiten normiert:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 &= \int dx \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} \psi^*(k, t_0) \psi(k', t_0) e^{-i(k-k')x} e^{i\frac{\hbar}{2m}(k^2-k'^2)(t-t_0)} \\ &= \int \frac{dkdk'}{2\pi} \psi^*(k, t_0) \psi(k', t_0) 2\pi \delta(k-k') \exp\left\{i\frac{\hbar}{2m}(k^2-k'^2)(t-t_0)\right\} \\ &= \int dk |\psi(k, t_0)|^2 = 1 \quad \text{(Parseval Theorem)}. \end{aligned} \quad (2.2.52)$$

- Für $t = t_0$ ist die Wellenfunktion reell:

$$\psi_a(x, t_0) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{x^2 a}{2}\right\}. \quad (2.2.53)$$

Im Limes $1/a \rightarrow 0$ stellt

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \psi_a(x, t_0) = \delta(x) \quad (2.2.54)$$

eine Diracsche δ -Distribution dar, d.h. eine verallg. Eigenfunktion zum Ortsoperator mit Eigenwert $x_0 = 0$. Für eine Ortsunschärfe von

$$(\Delta x)_{t=t_0} = \sqrt{\frac{1}{2a}} \xrightarrow{a \rightarrow \infty} 0 \quad (2.2.55)$$

fließt, wegen $(\Delta p)_{t=t_0} = \hbar(\Delta x)_{t=t_0}^{-1}/2 = \hbar\sqrt{a/2}$, das Wellenpaket gemäß

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\frac{1}{2a}} [1 + \gamma^2(t)]^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{\gamma \gg 1} \frac{\hbar}{m} \sqrt{\frac{a}{2}} (t - t_0) \quad (2.2.56)$$

linear mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit $v = (\Delta p)_{t=t_0}/m = \hbar\sqrt{a/2}/m$ auseinander. Wir sehen also, dass ein einmal im Intervall der Breite $\sim a^{-1/2}$ lokalisiertes Teilchen nach infinitesimal kurzer Anfangsentwicklung, $\Delta t \sim 1/a$, mit Geschwindigkeit $v \sim \sqrt{a}$ delokalisiert ist. Diese Delokalisierung, $\Delta x \sim v(t - t_0)$, erfolgt wesentlich schneller als das durch die Diffusionsgleichung beschriebenes Zerfließen eines "Heat-Kernels" (Wärmeleitungskerns), der Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung, vgl. Fußnote 3 auf S. 59, dessen Breite mit $\Delta x \sim \sqrt{t - t_0}$ anwächst.

- Wir betrachten noch die "lokale Wellenzahl"

$$\begin{aligned} k(x) &= x^{-1} \arg[\psi(x, t)] \\ &= \frac{\phi(t)}{x} + \frac{a}{2} \frac{\gamma(t)}{1 + \gamma^2(t)} x, \end{aligned} \quad (2.2.57)$$

mit $\phi = \arg[(1+i\gamma)^{-1/2}]$. Für große Zeiten, $\gamma \gg 1$, ist $\phi \cong -\pi/4$ und die lokale Wellenzahl für $x \gg \sqrt{\pi\gamma/2a}$ ist näherungsweise

$$k(x) \cong \frac{1}{2\hbar} m \frac{x}{t - t_0} \quad (2.2.58)$$

entsprechend einer lokalen "Teilchengeschwindigkeit" $x/[2(t - t_0)]$.

2.2.3. Propagator

Abschließend stellen wir noch einige wichtige, aber etwas formale Betrachtungen zum Konzept des Propagators $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0)$ an, welcher durch die Zeitentwicklung der Wellenfunktion definiert ist,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.59)$$

$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0)$ stellt also den Zeitentwicklungsoperator in der Ortsbasis dar: Ausgehend von

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.2.60)$$

finden wir

$$\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) \int d^3y | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.2.61)$$

$$\Rightarrow \psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y \underbrace{\langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle}_{G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0)} \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.62)$$

In der Tat gilt, in Übereinstimmung mit (2.2.41), dass

$$\langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle = \sum_n \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | n \rangle \langle n | \mathbf{y} \rangle \quad (2.2.63)$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \chi_n^*(\mathbf{y}) \chi_n(\mathbf{x}). \quad (2.2.64)$$

Wir haben also folgende wichtige Interpretation des Propagators:

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) = \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{y} \rangle. \quad (2.2.65)$$

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

$$\begin{aligned} G(t-t_0) &= \int d^3y G(\mathbf{y}, t; \mathbf{y}, t_0) &&= \int d^3y \sum_n \langle \mathbf{y} | e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} | n \rangle \langle n | \mathbf{y} \rangle \\ &= \int d^3y \sum_n \langle n | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} &&= \sum_n \langle n | \underbrace{\int d^3y | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} |}_{=\mathbb{1}} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)}. \end{aligned} \quad (2.2.66)$$

$G(t-t_0)$ erhält Information über das Energiespektrum und führt zur Beschreibung der Quantenmechanik mittels Greenscher Funktionen. Diese spielen insbesondere in der Quantenfeldtheorie eine wichtige Rolle. Von zentraler Bedeutung dabei ist die *retardierte Greensche Funktion*

$$G^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t_0) \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle \equiv \langle \mathbf{x} | \hat{G}^R(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle, \quad (2.2.67)$$

welche nur für $t \geq t_0$ ungleich Null ist und die definierende, inhomogene Differentialgleichung

$$[(i\hbar\partial_t - \hat{H})\hat{G}^R(t, t_0)](\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(t - t_0)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.2.68)$$

löst. Sie ist somit die Ortsdarstellung der *Inversen* des Schrödingeroperators $i\hbar\partial_t - \hat{H}$ und spielt z.B. eine wichtige Rolle für die Lösung einer “inhomogenen” SG, bei der die Inhomogenität durch das Potential multipliziert mit der Wellenfunktion gegeben ist. Wir kommen im Rahmen der Streutheorie in Kap. 8 hierauf zurück.

2.3. Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung

Wir betrachten die Größe

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.69)$$

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

$$P(\text{Teilchen ist zur Zeit } t \text{ im Volumen } V) = \int_V d^3 \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.70)$$

Wir zeigen nun, dass gemäß der SG die Änderung von $\rho(\mathbf{x}, t)$ mit der Zeit durch eine *Kontinuitätsgleichung* beschrieben wird.

Ausgangspunkt für ihre Herleitung sind die Schrödingergleichung und ihre komplex Konjugierte,

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.3.71)$$

$$-i\hbar\partial_t\psi^*(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V^*(\mathbf{x})\right)\psi^*(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.72)$$

Damit erhalten wir die zeitliche Änderung von ρ als

$$\begin{aligned} \partial_t\rho(\mathbf{x}, t) &= (\partial_t\psi^*(\mathbf{x}, t))\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^*(\mathbf{x}, t)\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [-(\Delta\psi^*)\psi + \psi^*\Delta\psi] + \frac{i}{\hbar}(V^* - V)\psi^*\psi. \end{aligned} \quad (2.3.73)$$

Falls der Hamilton-Operator hermitesch und die Potentialfunktion somit reell ist, $V^* = V$, fällt es aus obiger Gleichung heraus,

$$\partial_t\rho = \frac{i\hbar}{2m}\nabla[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi], \quad (2.3.74)$$

wobei wir beim Herausziehen des Gradienten aus der Klammer zusätzlich berücksichtigt haben, dass sich die beim Wiedereinschieben zusätzlich ergebenden Terme $\sim \nabla\psi^*\nabla\psi$ wegheben. Diese Gleichung beschreibt die lokale Erhaltung eines Stroms j^μ ,

$$\partial_t\rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \partial_\mu j^\mu(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.3.75)$$

worin der räumliche Anteil \mathbf{j} des Stroms $j = (\rho, \mathbf{j})$ durch

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] \quad (2.3.76)$$

Quantendynamik

gegeben ist. Die Größe $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ beschreibt also eine räumliche *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*. Um die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit daraus abzuleiten, betrachten wir ein Volumen V mit Rand $\partial V = F$ und integrieren (2.3.75) über V . Dies ergibt

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = - \int_{\partial V} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.77)$$

Im zweiten Schritt haben wir den Gaußschen Integralsatz angewendet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Volumen V ändert sich gemäß der Differenz der aus dem Volumen heraus- und hineinströmenden Wahrscheinlichkeitsdichte. Diese Kontinuitätsgleichung ist uns von der Hydrodynamik inkompressibler Flüssigkeiten oder der Zeitentwicklung von Ladungsverteilungen in der Elektrodynamik her bekannt.

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

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (\text{Normerhaltung}). \quad (2.3.78)$$

Diese Eigenschaft ist mit der Kontinuitätsgleichung verträglich: Damit $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 < \infty$, bzw., in Kugelkoordinaten, $\int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 |\psi|^2 < \infty$, muss $|\psi|^2$ asymptotisch stärker abfallen als $1/r^3$. Damit fällt auch \mathbf{j} stärker ab als $1/r^3$. Wir beschreiben nun das Integral über \mathbb{R}^3 als Integral über eine Kugel $K(r)$ um den Ursprung mit Radius r , im Limes $r \rightarrow \infty$. Die rechte Seite von (2.3.77) verhält sich wie

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\partial K(r)} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{j} \lesssim \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi \frac{r^2}{r^3} \rightarrow 0, \quad (2.3.79)$$

was (2.3.78) entspricht.

Bemerkung: Die Erhaltung der Norm erfordert, dass das Potential reell ist,

$$V(\mathbf{x}) = V^*(\mathbf{x}). \quad (2.3.80)$$

Komplexe Potentiale $V(\mathbf{x}) \neq V^*(\mathbf{x})$ und damit nichthermitesche Hamilton-Operatoren beschreiben dagegen Prozesse, bei denen die Norm nicht erhalten ist, z.B. die Absorption oder den Verlust von Teilchen.

Die Existenz des erhaltenen 4-er Stroms j^μ , d.h. die Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung ist mathematisch eine Konsequenz des *Noether-Theorems* (Emmy Noether, 1918 [23, 24]), welches besagt, dass jede kontinuierliche Symmetrie einer Wirkung S , welche die Bewegungsgleichungen invariant läßt, einem erhaltenen Strom entspricht.

Für nichthermitesche Potentiale, z.B. $V = \gamma/2i$, mit reeller Zerfallskonstante $\gamma \in \mathbb{R}$, erhält die Kontinuitätsgleichung Korrekturen, $\partial_\mu j^\mu = -\gamma j^0$, welche i.allg. die Nichterhaltung der Norm zur Folge haben. Aber auch in diesem Fall kann man einen erhaltenen Strom konstruieren, wenn, wie hier, der Potentialterm $U(1)$ -invariant ist.⁶

Wir werden auf das Noether-Theorem und die zugehörigen Erhaltungsgrößen in Abschnitt 5.3.3 zurückkommen.

Wir beschäftigen uns nun noch etwas näher mit der physikalischen Interpretation von $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$: Aus $\hat{\mathbf{p}} =$

⁶Siehe dazu, z.B., mein Skript zur Vorlesung über Quantenfeldtheorie von Vielteilchensystemen, Kap. 2.1 (auf Anfrage erhältlich).

$-i\hbar\nabla$ folgt

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{x}, t) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\mathbf{x}, t) (\hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{x}, t))^* \right). \quad (2.3.81)$$

Dies ist gleichbedeutend mit

$$\int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle(t)}{m}. \quad (2.3.82)$$

Dieser Zusammenhang wird relevant in Kombination mit der folgenden Beobachtung: Schreiben wir die Wellenfunktion mittels der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie einer reellen Phase S als

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{x}, t)}, \quad (2.3.83)$$

(sogen. Madelung-Darstellung), so erhalten wir, dass

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} e^{-\frac{i}{\hbar} S} \left(\frac{\nabla \rho}{2\sqrt{\rho}} e^{\frac{i}{\hbar} S} + \sqrt{\rho} e^{\frac{i}{\hbar} S} \frac{i}{\hbar} \nabla S \right) = \frac{1}{2} \nabla \rho + \frac{i}{\hbar} \rho \nabla S. \quad (2.3.84)$$

und daraus die Stromdichte in der Form

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \frac{\nabla S(\mathbf{x}, t)}{m}, \quad (2.3.85)$$

d.h., der Gradient der Phase gibt die *Richtung des Wahrscheinlichkeitsstromes* an. Definiert man ein Geschwindigkeits-“Feld” \mathbf{v} durch $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, so ergibt sich

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{m} \nabla S(\mathbf{x}, t), \quad (2.3.86)$$

und der Erwartungswert des Impulses lautet $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle(t) = m \int d^3x \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Damit nimmt die Kontinuitätsgleichung die folgende, ebenfalls aus der Hydrodynamik vertraute Form an:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.3.87)$$

Wir betonen hier, dass in der konventionellen Kopenhagenschen Interpretation der Quantenmechanik die Identifizierung von $\mathbf{v} = \nabla S(\mathbf{x}, t)/m$ mit der Geschwindigkeit des Teilchens lediglich eine formale Analogie darstellt, da ein Teilchen mit festem Impuls in der QM **keine lokalisierte Trajektorie** durchläuft.

Bemerkung: Die Gleichung $\mathbf{v} = \nabla S(\mathbf{x}, t)/m$ ist Ausgangspunkt der sogenannten “Bohmschen Interpretation der Quantenmechanik”, einer von der Kopenhagenschen abweichenden Interpretation der Quantenmechanik, in der \mathbf{v} das Geschwindigkeitsfeld des Teilchens darstellt.

Wir werden auf diese nah mit Beschreibungen in der klassischen Mechanik verwandten Aspekte auch nochmals in Abschnitt 7.3 im Zusammenhang mit Wirkungswellen zurückkommen. Bereits in der klassischen Mechanik, im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Theorie, konnte die Dynamik eines Teilchens als eine Art Wellenausbreitung der klassischen Wirkung formuliert werden. Von dieser Beschreibung ausgehend hätte man bereits dort ein Analogon der Schrödingergleichung identifizieren können, deren geometrisch-optischer Grenzfall die Punktteilchen-Dynamik ergibt.

2.4. Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild

2.4.1. Heisenbergbild und Bewegungsgleichung für Operatoren

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

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

Von praktischem physikalischen Interesse sind weniger die Zeitentwicklung der Zustände, sondern vielmehr die Dynamik von Observablen bzw. von Matrixelementen der Observablen bzgl. gegebener Basis.

Aus diesen ergeben sich die Wahrscheinlichkeiten für alle Meßgrößen. Wir betrachten daher im Folgenden die Zeitentwicklung der Matrixelemente von Operatoren bzgl. einer gegebenen Basis,

$$U(t) : \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \text{ bei } t = t_0 = 0 \quad \longrightarrow \quad \langle \alpha | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0) | \beta \rangle \text{ für } t > 0. \quad (2.4.88)$$

Hier rechnen wir die Zeitentwicklungsoperatoren \hat{U} den Zuständen $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ zu. Alternativ können wir die Zeitentwicklung der Matrixelemente aber auch über eine Zeitentwicklung der Operatoren anstelle der der Zustandsvektoren darstellen. In dieser Form ergibt sich die Zeitentwicklung wie folgt:

$$U(t) : \quad \hat{A} \quad \longrightarrow \quad \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0), \quad |\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad |\alpha\rangle. \quad (2.4.89)$$

Im folgenden schreiben wir: $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)$.

- Die Observable im Heisenberg-Bild ist definiert als

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t), \quad (2.4.90)$$

wobei \hat{A}_S den Operator im Schrödinger-Bild bezeichnet. Insbesondere stimmen die Operatoren zu einem (willkürlich gewählten) Referenzzeitpunkt $t_0 \equiv 0$ überein,

$$\hat{A}_H(t = 0) = \hat{A}_S. \quad (2.4.91)$$

- Der Zustandsvektor ist zeitunabhängig und

$$\forall t : \quad |\alpha, t\rangle_H = |\alpha, t_0 = 0\rangle \equiv |\alpha\rangle_H. \quad (2.4.92)$$

Damit kann man die Matrixelemente in beiden Bildern berechnen,

$${}_S \langle \alpha, t | \hat{A}_S | \alpha, t \rangle_S = {}_H \langle \alpha | \hat{A}_H(t) | \alpha \rangle_H. \quad (2.4.93)$$

Die Zeitentwicklung wird im Heisenberg-Bild durch eine Bewegungsgleichung für die Operatoren bestimmt, die sich aus der Schrödingergleichung herleiten läßt. Dazu nehmen wir zunächst an, dass \hat{A}_S keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, $\partial_t \hat{A}_S = 0$. Die Zeitableitung des Operators im Heisenberg-Bild ist dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= \frac{d}{dt} \left(\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t) \right) \\ &= (\partial_t \hat{U}^\dagger(t)) \hat{A}_S \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \partial_t \hat{U}(t). \end{aligned} \quad (2.4.94)$$

Mit $i\hbar\partial_t\hat{U} = \hat{H}\hat{U}$ und $-i\hbar\partial_t\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{H}$ folgt:⁷

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}_S\hat{H}\hat{U} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} \underbrace{\hat{U}^\dagger\hat{A}_S\hat{U}}_{\hat{A}_H(t)} + \underbrace{\hat{U}^\dagger\hat{A}_S\hat{U}}_{\hat{A}_H(t)} \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t)].\end{aligned}\quad (2.4.95)$$

Den Hamilton-Operator im Heisenberg-Bild bezeichnen wir als

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{U}(t) = \hat{H}_H(t), \quad (2.4.96)$$

und erhalten damit die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \quad (2.4.97)$$

Wenn \hat{H} zeitunabhängig⁸ ist, also $\hat{U}(t) = \exp\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\}$, ist $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$ und $d\hat{A}_H(t)/dt = [\hat{A}_H(t), \hat{H}]/(i\hbar)$. Wenn wir außerdem eine explizite Zeitabhängigkeit in \hat{A}_S haben, also $\partial_t\hat{A}_S(t) \neq 0$, finden wir die

Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = (\partial_t\hat{A})_H + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}], \quad (2.4.98)$$

$$\text{mit } (\partial_t\hat{A})_H = \hat{U}^\dagger(t)[\partial_t\hat{A}_S(t)]\hat{U}(t). \quad (2.4.99)$$

Bemerkungen:

- Das Heisenberg-Bild ist näher am klassischen Bild: Die Wellenfunktion bzw. der Zustandsvektor haben kein direktes klassisches Analogon, aber klassische Größen wie Energie, Ort und Impuls werden zu quantenmechanischen Observablen, die sich im Heisenberg-Bild dynamisch ändern. Insbesondere ist die Heisenberg-Gleichung (2.4.98) das quantenmechanische Analogon zu

$$\frac{d}{dt}F(q, p, t) = \partial_t F(q, p, t) + \{F(q, p, t), H\}_{\text{PB}}. \quad (2.4.100)$$

Hier ist $\{F, G\}_{\text{PB}} = (\partial_q F)(\partial_p G) - (\partial_p F)(\partial_q G)$ die klassische Poisson-Klammer.⁹

Berücksichtigt man, daß bei der kanonischen Quantisierung die Poissonklammer gemäß

$$\{ \quad , \quad \}_{\text{PB}} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\quad , \quad] \quad (2.4.101)$$

⁷Die Schrödingergleichung für \hat{U} gilt allgemein auch für einen explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator, vgl. (2.1.12), worin $\hat{H}(t)$ bei der Entwicklungszeit t von $\hat{U}(t, t_0)$ ausgewertet ist!

⁸ $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$ gilt auch ganz allgemein immer dann, wenn der Hamiltonoperator, zu verschiedenen Zeiten ausgewertet, kommutiert, $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] = 0$. In allen anderen Fällen stellt $\hat{H}_H(t)$ den von der Zeit t zur "Schrödingerbild-Referenzzeit" t_0 (hier = 0) zurückentwickelten zeitabhängigen Hamiltonoperator $\hat{H}(t)$ dar, wie das für jeden Heisenberg-Bild-Operator \hat{A}_H der Fall ist.

⁹Gl. (2.4.100) folgt aus der Kettenregel und den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen $\partial_t q = \partial H / \partial p$ sowie $\partial_t p = -\partial H / \partial q$.

durch den Kommutator ersetzt wird, rechtfertigt dies nachträglich die Identifikation des Generators $\hat{\Omega}$ der infinitesimalen Zeitentwicklung $\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i\hat{\Omega}(t_0)dt$ mit \hat{H}/\hbar , vgl. Gl. (2.1.3).

- Wir erinnern zum Vergleich an den entsprechenden Zusammenhang des Translationsoperators mit dem Impulsoperator als Generator infinitesimaler Translationen. Anstelle von $|x\rangle \rightarrow |x + \Delta x\rangle = \hat{T}(\Delta x)|x\rangle$ können wir die Translation in den Observablen vornehmen,

$$\hat{A} \rightarrow \hat{T}^\dagger(\Delta x)\hat{A}\hat{T}(\Delta x). \quad (2.4.102)$$

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

$$\begin{aligned} F(q, p) \rightarrow \tilde{F}(q, p) &= F(q + \delta q, p) = F(q, p) + \delta F, \\ \text{mit } \delta F &= \delta q \partial_q F = \delta q \{F, Q\}, \quad Q = p. \end{aligned} \quad (2.4.103)$$

Nach Quantisierung mittels (2.4.101) erhalten wir daraus den Zusammenhang $\hat{K} = \hat{p}/\hbar$, wie er bereits zuvor resultierte, vgl. Gl. (??).

2.4.2. Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem

Wir verdeutlichen die Zeitentwicklung der Operatoren im Heisenberg-Bild am Beispiel des freien Teilchens. Im Folgenden seien $\hat{x} = \hat{x}_H(t)$ und $\hat{p} = \hat{p}_H(t)$ Operatoren im Heisenberg-Bild. Der Hamilton-Operator für das freie Teilchen ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (2.4.104)$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung für den Impuls

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{p}}, H] = 0, \quad (2.4.105)$$

da $[\hat{p}_i, f(\hat{p}_j)] = 0$. Es folgt unmittelbar, daß der Impuls zeitunabhängig ist,

$$\hat{\mathbf{p}}(t) = \hat{\mathbf{p}}(0). \quad (2.4.106)$$

Die Bewegungsgleichung für $\hat{\mathbf{x}}$ lautet

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}]. \quad (2.4.107)$$

Man kann folgendes zeigen (Übungen):

$$[\hat{x}_i, f(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \right), \quad [\hat{p}_i, g(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right). \quad (2.4.108)$$

Damit läßt sich der Kommutator des Orts- mit dem Hamilton-Operator berechnen,

$$[\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{1}{2m} i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial p_i} \sum_{j=1}^3 p_j^2 \right) = \frac{1}{2m} i\hbar 2\hat{p}_i, \quad (2.4.109)$$

woraus die Bewegungsgleichung $d\hat{x}_i(t)/dt = \hat{p}_i(t)/m = \hat{p}_i(0)/m$ folgt, welche durch

$$\hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \frac{\hat{p}_i(0)}{m}t \quad (2.4.110)$$

gelöst wird. Wir finden also, dass den klassischen Bewegungsgleichungen Operatorgleichungen im Heisenberg-Bild entsprechen.

Auf dieser Grundlage betrachten wir das Zerfließen des Wellenpakets im Heisenberg-Bild. Der Kommutator zweier Operatoren im Heisenberg-Bild, welche zu *gleichen Zeiten* ausgewertet werden, läßt sich durch den Kommutator im Schrödinger-Bild wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} [\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)] &= [\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S\hat{U}(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{B}_S\hat{U}(t)] \\ &= \hat{U}^\dagger(t)[\hat{A}_S, \hat{B}_S]\hat{U}(t). \end{aligned} \quad (2.4.111)$$

Insbesondere ist $[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(t)] = 0$. Der Kommutator zweier zu unterschiedlichen Zeiten ausgewerteten Ortsoperatoren verschwindet hingegen *nicht*:

$$[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(0)] = [\hat{p}_i t/m, \hat{x}_j(0)] = -\frac{i\hbar t}{m}\delta_{ij}. \quad (2.4.112)$$

Aus der Unschärferelation $(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2$ folgt damit das Auseinanderfließen des Wellenpakets,

$$(\Delta x_i)_t^2 (\Delta x_i)_{t=0}^2 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}. \quad (2.4.113)$$

Als zweites Beispiel diene ein Teilchen im Potential $V(\mathbf{x})$, mit Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \quad (2.4.114)$$

Aus diesem Hamilton-Operator erhalten wir die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i}\hat{V}(\mathbf{x}) \quad (2.4.115)$$

sowie

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}] = \frac{\hat{p}_i}{m}, \quad (2.4.116)$$

da zu gleichen Zeiten ausgewertet Ort und Potential am selben Ort kommutieren, $[\hat{x}_i, V(\mathbf{x})] = 0$. Wir erhalten aus den obigen Bewegungsgleichungen eine Differentialgleichung zweiter Ordnung,

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}_i(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{d}{dt}\hat{x}_i, \hat{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hat{p}_i}{m}, \hat{H}\right] = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\hat{p}_i. \quad (2.4.117)$$

Zusammengenommen ergibt sich die folgende Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\hat{\mathbf{x}}_H(t) = -\nabla V(\hat{\mathbf{x}}_H). \quad (2.4.118)$$

Da $|\alpha\rangle_H$ unabhängig von t ist, ergibt sich daraus unmittelbar eine Bewegungsgleichung zweiter Ordnung in der Zeit für den Erwartungswert des Ortsoperators,

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{\mathbf{x}}) \rangle. \quad (2.4.119)$$

Gültig für allgemeine Hamiltonsche Bewegungsgleichungen bezeichnet man diese Relation als

Ehrenfestsches Theorem:

Die klassischen Bewegungsgleichungen gelten für die Erwartungswerte.

Wichtiger Hinweis: Es gilt jedoch keineswegs allgemein, daß $\langle \nabla V(\hat{\mathbf{x}}) \rangle = \nabla V(\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle)$. Dies bedeutet, daß nicht einfach die Erwartungswerte die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Im allgemeinen ergibt eine Taylorentwicklung des Potentials, insofern dieses unendlich oft differenzierbar ist, Potenzen beliebiger Ordnung in $\hat{\mathbf{x}}$. Für diese ist $\langle \hat{\mathbf{x}}^n \rangle \neq \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle^n$ für $n \geq 2$, so daß für Potentiale, welche Terme dritter und höherer Ordnung enthalten, der Erwartungswert der Bewegungsgleichung nicht der Bewegungsgleichung für die Erwartungswerte entspricht. Für $n \leq 2$, also für freie Teilchen sowie solche im linearen, etwa Gravitationspotential und im harmonischen Oszillatorpotential erfüllen die Erwartungswerte jedoch noch die klassischen Bewegungsgleichungen. Für diese Fälle entwickeln sich die Erwartungswerte unabhängig von der Schwankung der Observablen. Man bezeichnet solche Potentiale oft als quasiklassisch. In der Quantenfeldtheorie ist die sog. Molekularfeld-Näherung exakt für Systeme, welche sich durch Hamilton- bzw. Lagrange-Operatoren beschreiben lassen, welche maximal zweiter Ordnung in den Feldern sind.

2.4.3. Basis-Kets im Heisenberg-Bild

Wir wenden uns abschließend der Zeitentwicklung der Basis-Vektoren zu. Im Schrödinger-Bild gilt: $|\alpha, t\rangle_S = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle$, d.h. der Zustandsvektor entwickelt sich in der Zeit.

In einer Entwicklung nach Eigenvektoren eines zeitunabhängigen Schrödinger-Operators,

$$\hat{A}_S |a\rangle = a |a\rangle, \quad (2.4.120)$$

sind die entsprechenden Basis-Zustände ebenfalls zeitunabhängig. Die Zeitentwicklung des Zustandsvektors $|\alpha, t\rangle_S = \sum_a c_a(t) |a\rangle$ ist in den Koeffizienten enthalten,

$$c_a(t) = \langle a | \alpha, t \rangle_S = \langle a | \hat{U}(t) | \alpha, t_0 \rangle. \quad (2.4.121)$$

Der Übergang ins Heisenberg-Bild liefert dann:

$$\underbrace{\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t)}_{\hat{A}_H(t)} \hat{U}^\dagger(t) |a\rangle = \hat{U}^\dagger(t) a |a\rangle, \quad (2.4.122)$$

also

$$\hat{A}_H(t) (\hat{U}^\dagger(t) |a\rangle) = a (\hat{U}^\dagger(t) |a\rangle). \quad (2.4.123)$$

Somit ist $\hat{U}^\dagger(t) |a\rangle$ Eigenket zu $\hat{A}_H(t)$ mit Eigenwert a . Damit können wir die Eigenkets im Heisenberg-

Bild definieren:

$$|a, t\rangle_{\text{H}} = \hat{U}^\dagger(t) |a\rangle. \quad (2.4.124)$$

Sie erfüllen die “inverse Schrödinger-Gleichung”

$$i\hbar\partial_t |a, t\rangle_{\text{H}} = -\hat{H} |a, t\rangle_{\text{H}}. \quad (2.4.125)$$

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

$$\underbrace{|\alpha, t\rangle_{\text{H}}}_{= |\alpha, t_0\rangle} = \sum_a c_a(t) |a, t\rangle_{\text{H}}, \quad (2.4.126)$$

mit

$$c_a(t) = {}_{\text{H}}\langle a, t | \alpha, t \rangle_{\text{H}} = (\langle a | \hat{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle). \quad (2.4.127)$$

Wir sehen also, dass die $c_a(t)$ im Schrödinger- und im Heisenberg-Bild übereinstimmen.

3. Eindimensionale Probleme

Wir wollen nun die in den ersten beiden Kapiteln eingeführten Grundlagen nutzen, um für eine Reihe vielfältig relevanter Potentiale $V(x)$ die betreffende Quantendynamik zu berechnen und zu diskutieren. Speziell werden wir die Bewegung in einer Raumdimension betrachten und zunächst die jeweiligen Energieeigenzustände und zugehörigen Eigenwerte des Hamiltonoperators bestimmen. In Abschnitt 2.2.2 hatten wir dies bereits für das einfachste Beispiel eines kräftefreien Teilchens, also für die Bewegung im freien Raum, $V \equiv 0$, getan und die ebenen Wellen (2.2.43) zu den Impulsen $\pm k$ als Eigenfunktionen von \hat{H} mit entarteten Energie-Eigenwerten $E_{\pm k} = (\hbar k)^2/2m$ identifiziert. Darüberhinaus betrachten wir im Folgenden zunächst den harmonischen Oszillator mit $V(x) \sim x^2$, sowie die Potentialstufe (Abschnitt 3.2) und die Kombination zweier solcher Stufen zur Potentialbarriere (3.3) und zum Potentialtopf (3.4).

3.1. Harmonischer Oszillator

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m , welches sich im eindimensionalen Potential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ bewegt. $\omega = 2\pi/T$ bezeichnet die Kreisfrequenz (für eine Periode T), welche die Einheit $1/\text{Zeit}$ besitzt. Das quadratische Potential dient in vielen Situationen als führende Näherung im Sinne einer Taylorentwicklung, welche die Bewegung eines Teilchen um den stationären Punkt eines allgemeinen Potentials gut beschreibt. Es findet deshalb vielfache Anwendung, von der Festkörperphysik bis zur Quantenfeldtheorie.

Der quantenmechanische Hamilton-Operator für dieses Potential des harmonischen Oszillators (HO) lautet also

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 \hat{x}^2, \tag{3.1.1}$$

und es erweist sich als sinnvoll, zu einheitenlosen Größen überzugehen, da \hat{H} einem elliptischen Paraboloid im Phasenraum entspricht,

Definition 3.1.

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}, \tag{3.1.2}$$

Damit wird \hat{H} rotationssymmetrisch um den Ursprung, $\mathcal{X} = \mathcal{P} = 0$,

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2), \tag{3.1.3}$$

und der Kommutator einheitenlos, $[\hat{X}, \hat{P}] = i$.

3.1.1. Algebraische Lösung

Wir werden nun zeigen, dass die Kommutatoralgebra $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ eine hinreichende Bedingung dafür ist, den harmonischen Oszillator zu lösen, d.h. das Energiespektrum und die Energie-Eigenzustände bestimmen zu können. Dies geschieht am einfachsten mit Hilfe eines Wechsels von den Phasenraumkoordinaten \hat{X} und \hat{P} zu den sogenannten *Leiteroperatoren*:

Definition 3.2. Leiteroperatoren

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (3.1.4)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (3.1.5)$$

Diese erfüllen die

Kommutatorrelationen der Leiteroperatoren

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1; [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (3.1.6)$$

worin die erste aus

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{i}{2}([\hat{P}, \hat{X}] - [\hat{X}, \hat{P}]) = -\frac{i}{2}2i = 1, \quad (3.1.7)$$

folgt und die anderen beiden allgemein für identische Operatoren gelten. Die Bedeutung der Bezeichnung dieser Operatoren wird im weiteren Verlauf der Diskussion klar werden. Zunächst schreiben wir den Hamiltonoperator H mithilfe der Leiteroperatoren als

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}[(a + a^\dagger)^2 - (a - a^\dagger)^2] \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}[\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - (\hat{a}^\dagger)^2] \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger), \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

was wir noch mittels $\hat{a}\hat{a}^\dagger = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$ vereinfachen können zu¹

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \quad (3.1.9)$$

Definieren wir nun den sogenannten *Anzahloperator*

¹ Alternativ könnten wir die Operatoren auch "anti-normalordnen", d.h. den Hamiltonoperator als $H = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2})$ schreiben, jedoch ist dies inkonsistent mit der gleich erfolgenden Definition des "Vakuum-" d.h. Grundzustands.

3. Eindimensionale Probleme

Definition 3.3. Anzahloperator

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad \text{mit} \quad \hat{N}^\dagger = \hat{N}, \quad (3.1.10)$$

so erhalten wir den Zusammenhang von \hat{H} und \hat{N} als

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.1.11)$$

Vergleich mit Gl. (3.1.3) zeigt, dass wir $\hat{N} + 1/2$ als *Radius*²/2 des Harmonischen Oszillators (HO) im Phasenraum interpretieren können, welchen der Operator $(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)/2$ mißt. Welche Zahl dieser Anzahloperator genau zählt, werden wir noch diskutieren müssen. Zum jetzigen Zeitpunkt ist noch nicht klar, welche Eigenwerte n der Operator \hat{N} besitzt,

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (3.1.12)$$

und ob diese nur ganzzahlige Werte umfassen.

Erste Beobachtungen:

- Wir sehen jedoch leicht, dass \hat{N} nur nicht-negative Eigenwerte, haben kann, denn

$$\forall |\psi\rangle: \quad \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = \langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle = \|a|\psi\rangle\|^2 \geq 0, \quad (3.1.13)$$

und wegen der Normierung $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ folgt für einen Eigenzustand $|\psi\rangle = |n\rangle$, dass $n \geq 0$ ist.

- Desweiteren ist \hat{N} hermitesch, d.h. es gilt $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ entsprechend der Hermetizität von $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Daraus folgt sofort, dass alle Eigenwerte n von \hat{N} reell sein müssen.

Wir leiten im Folgenden die Energie-Eigenzustände und das Energie-Spektrum aus dem Spektrum von \hat{N} her: Wenn $|n\rangle$ Eigenzustand von \hat{N} gemäß (3.1.12) ist, so gilt auch

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (3.1.14)$$

Zusammen mit (3.1.12) ergibt sich das nach unten beschränkte Spektrum der Eigenenergien von \hat{H} zu

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad \text{da } n \geq 0. \quad (3.1.15)$$

Wir wollen herausfinden, welche Besetzungszahlen n (also welche Eigenwerte von \hat{N}) auftreten.

Die obige Bedingung $n \geq 0$ erlaubt die Annahme, dass es einen Eigenzustand $|0\rangle$ zu $\hat{N}|0\rangle = 0|0\rangle = 0$ gibt. Diesen können wir darüberhinaus o.B.d.A. als normiert annehmen. Aus der Eigenwertgleichung für $|0\rangle$ folgt direkt, dass²

$$0 = \langle 0 | a^\dagger a | 0 \rangle = \langle 0 | a a^\dagger | 0 \rangle - \underbrace{\langle 0 | [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] | 0 \rangle}_{= \langle 0 | 0 \rangle = 1}, \quad (3.1.16)$$

²Im folgenden lassen wir der besseren Lesbarkeit wegen Hüte über den Operatoren a und a^\dagger in der Regel weg.

woran sich zeigt, dass der Zustand $a^\dagger |0\rangle$ auf Eins normiert ist. Nun stellt sich die allgemeine Frage, wie $a^\dagger |0\rangle$ mit anderen Eigenzuständen von \hat{N} in Verbindung steht. Wir überprüfen dafür die Wirkung von \hat{N} :

$$\hat{N}a^\dagger |0\rangle = a^\dagger a a^\dagger |0\rangle = a^\dagger \underbrace{a^\dagger a |0\rangle}_{= \hat{N}|0\rangle = 0} + a^\dagger |0\rangle. \quad (3.1.17)$$

$a^\dagger |0\rangle$ ist also selbst Eigenzustand von \hat{N} , zum Eigenwert $n = 1$.

Wir systematisieren diese Herleitung, bei der wir effektiv im ersten Schritt \hat{N} und \hat{a}^\dagger vertauscht haben, mit Hilfe der Kommutatoren für \hat{a} , \hat{a}^\dagger : Aus der allgemeinen Relation

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (3.1.18)$$

folgt für die Kommutatoren von \hat{N} mit den Leiteroperatoren, dass

$$[\hat{N}, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{= 0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{= -1} a = -a, \quad (3.1.19)$$

$$[\hat{N}, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (3.1.20)$$

Hiermit verallgemeinern wir die obige Analyse von $a^\dagger |0\rangle$ auf $a |n\rangle$ sowie $a^\dagger |n\rangle$. Dazu betrachten wir

$$\hat{N}(a |n\rangle) = ([\hat{N}, a] + a\hat{N}) |n\rangle = -a |n\rangle + an |n\rangle, \quad (3.1.21)$$

was uns zu

$$\hat{N} a |n\rangle = (n - 1) a |n\rangle \quad (3.1.22)$$

führt. Das bedeutet, dass $a |n\rangle$ Eigenzustand von \hat{N} zum Eigenwert $n - 1$ ist. In entsprechender Weise finden wir, dass

$$\hat{N} a^\dagger |n\rangle = (n + 1) a^\dagger |n\rangle \quad (3.1.23)$$

gilt, also $a^\dagger |n\rangle$ Eigenzustand von \hat{N} zum Eigenwert $n + 1$ ist. Wir halten fest:

$$a \quad \text{erniedrigt den EW von } \hat{N} \text{ um } 1 \quad \longleftrightarrow \quad \text{Absteigeoperator} \quad (3.1.24)$$

$$a^\dagger \quad \text{erhöht den EW von } \hat{N} \text{ um } 1 \quad \longleftrightarrow \quad \text{Aufsteigeoperator} \quad (3.1.25)$$

Allgemein gilt also, dass

$$a^\dagger |n\rangle = c_{n+} |n + 1\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle n | a = c_{n+}^* \langle n + 1 |, \quad (3.1.26)$$

$$a |n\rangle = c_{n-} |n - 1\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle n | a^\dagger = c_{n-}^* \langle n - 1 |. \quad (3.1.27)$$

Die Werte von $c_{n\pm} \in \mathbb{C}$ leiten wir aus der Normierung der Zustände $|n\rangle$ ab: Wir beginnen mit

$$1 = \langle n + 1 | n + 1 \rangle = \frac{1}{|c_{n+}|^2} \langle n | a a^\dagger | n \rangle \quad (3.1.28)$$

3. Eindimensionale Probleme

und verwenden dann den bereits zuvor eingeführten Trick, dass

$$\langle n | aa^\dagger | n \rangle = \langle n | ([a, a^\dagger] + a^\dagger a) | n \rangle = \langle n | n \rangle + \underbrace{\langle n | N | n \rangle}_{=1} = (n+1) \langle n | n \rangle. \quad (3.1.29)$$

Damit finden wir, dass $1 = (1+n)/|c_{n+}|^2$, also $c_{n+} = \sqrt{n+1}$, wobei wir eine unbestimmte Phase gleich 1 wählen. In der gleichen Weise erhalten wir aus

$$1 = \langle n-1 | n-1 \rangle = \frac{1}{|c_{n-}|^2} \langle n | \underbrace{a^\dagger a}_N | n \rangle = \frac{n}{|c_{n-}|^2} \quad (3.1.30)$$

den Normierungsfaktor $c_{n-} = \sqrt{n}$. Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen:

Wirkung der Leiteroperatoren

$$a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle, \quad (3.1.31)$$

$$a | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle. \quad (3.1.32)$$

Es bleibt die Frage, welche Werte für n insgesamt zulässig sind. Bislang haben wir gezeigt, dass sich aus einem gegebenen Zustand niedrigster Energie, $|n_0\rangle$, mit $n_0 \geq 0$, mittels der Leiteroperatoren ein diskretes Spektrum höher-energetischer Zustände $|n\rangle$, $n = n_0 + m$, mit $m \in \mathbb{N}$ erzeugen läßt. Zentrale Fragen sind nun, welche Werte für $0 \leq n_0 < 1$ zulässig sind, und ob das Spektrum über diese Werte für n hinaus degeneriert ist.

Wie wir im folgenden zeigen werden, existiert ein eindeutiger qm. Grundzustand n_0 , welcher nicht degeneriert ist, und da sich, wie hier gezeigt, jedes Spektrum von Eigenzuständen mittels der Aufsteigeoperatoren aus einem solchen niedrigsten Zustand konstruieren läßt, werden auch die entsprechenden höher-energetischen Zustände eindeutig existieren und nicht entartet sein. Hierfür ist es wesentlich, dass a und a^\dagger eine vollständige Menge von Observablen bilden, was bedeutet, dass jede Observable eine Funktion von a und a^\dagger ist. Wäre das Spektrum degeneriert, so könnte man u.U. eine weitere Observable hinzunehmen, so dass diese Degenerierung aufgehoben wird. Es scheint hier vielleicht nicht a priori klar zu sein, ob es eine solche weitere Variable geben kann. Was den klassischen Phasenraum betrifft, so ist aufgrund der Struktur der Newtonschen Gleichungen, welche zweiter Ordnung in der Zeit sind, klar, dass der zweidimensionale Raum der $\{X, P\}$ geschlossen ist, so dass auch die daraus konstruierten Auf- und Absteiger diese Eigenschaft haben.

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

$$\hat{N} | n \rangle = n | n \rangle \quad (n \geq 0 \text{ weil, wie oben gezeigt, } \hat{N} \text{ positiv semi-definit ist}). \quad (3.1.33)$$

Wenden wir a wiederholt auf den Zustand $|n\rangle$ an, so ergeben sich die Zustände

$$\begin{aligned} a | n \rangle &= \sqrt{n} | n-1 \rangle, \\ a^2 | n \rangle &= \sqrt{n(n-1)} | n-2 \rangle, \\ &\vdots \\ a^k | n \rangle &= \sqrt{n(n-1)\dots(n-k+1)} | n-k \rangle. \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

Da $n \geq 0$ gemäß (3.1.13) und daher auch $n - k \geq 0$ in den Eigenzuständen $|n - k\rangle$ sein muss, so muss $n - k \in \mathbb{N}_0 = (\mathbb{N} \cup \{0\})$ sein. Ansonsten würde für jedes $0 < n - k < 1$ der Zustand $|n - k - 1\rangle$ mit $-1 < n - k - 1 < 0$ existieren, was im Widerspruch zu $n - k \geq 0$ steht. Damit ist das Spektrum der Eigenwerte von \hat{N} gleich \mathbb{N}_0 , mit kleinstem Eigenwert $n = n_0 = 0$.

Formal gilt: Aufgrund der Eigenschaften der Auf- und Absteigeoperatoren und der Bedingung, dass $n \geq 0$ sein muss, gibt es für alle n ein $\ell \in \mathbb{N}^{(+)}$, so dass $a^\ell |n\rangle = 0$. Das entspricht

$$0 = aa^{\ell-1} |n\rangle \quad \Rightarrow \quad a |n - \ell + 1\rangle = 0. \quad (3.1.35)$$

Wir nutzen diese Bedingung und schreiben

$$0 = \langle n - \ell + 1 | \underbrace{a^\dagger a}_N |n - \ell + 1\rangle = (n - \ell + 1) \langle n - \ell + 1 | n - \ell + 1\rangle = n - \ell + 1. \quad (3.1.36)$$

Damit umgekehrt $n - \ell + 1 = 0$ für irgendein $\ell \in \mathbb{N}$, muss $n \in \mathbb{N}_0$ positiv ganzzahlig oder gleich Null sein. Für solch ein gegebenes $n \in \mathbb{N}_0$ ist damit $\ell = n + 1$ der minimale Wert so dass $a^\ell |n\rangle = 0$. Insbesondere ist $a^{\ell-1} |n\rangle \neq 0$,

$$0 \neq a^{\ell-1} |n\rangle = a^n |n\rangle = \sqrt{n!} |0\rangle \quad \text{und} \quad a |0\rangle = 0. \quad (3.1.37)$$

Spektrum und Grundzustand von \hat{N}

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (3.1.38)$$

$$a |0\rangle = 0. \quad (3.1.39)$$

$|0\rangle$ ist also Eigenzustand zu minimalem Eigenwert $n = 0$. Da er gleichzeitig Eigenzustand zum niedrigsten Energie-Eigenwert $E_0 = \hbar\omega/2$ von \hat{H} ist, bezeichnet man ihn als Grundzustand oder auch Vakuumzustand. Letzterer Begriff stammt aus der Quantenfeldtheorie, in der n die Zahl ununterscheidbarer Teilchen mit exakt gleichen Eigenschaften zählt, und somit $n = 0$ bedeutet, dass mit der betreffenden Eigenschaft kein Teilchen vorhanden ist und somit das Vakuum "öd und leer gähnt" (D. Gromes). In Bezug auf den harmonischen Oszillator ist $|0\rangle$ Zustand minimaler Energie, welches ein Teilchen in dessen Potential annehmen kann. Er ist nicht zu verwechseln mit dem Nullvektor des Vektorraums, $|0\rangle \neq |\emptyset\rangle$, für den gilt, dass $\forall |\psi\rangle: |\psi\rangle + |\emptyset\rangle = |\psi\rangle$. Merke:

$$\text{Der Grundzustand ist normiert,} \quad \langle 0 | 0 \rangle = 1, \quad (3.1.40)$$

$$\text{im Gegensatz zu} \quad \langle \emptyset | \emptyset \rangle = 0, \quad \text{dem Nullvektor} \quad |\emptyset\rangle = a |0\rangle = 0. \quad (3.1.41)$$

Ausgehend von $|0\rangle$ kann dann jeder höhere Energiezustand durch Anwendung des Erzeugers oder "Aufsteigeoperators" a^\dagger erreicht werden:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a^\dagger |0\rangle, \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |0\rangle. \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.1.42)$$

Allgemein ergeben sich die

3. Eindimensionale Probleme

Anregungszustände des harmonischen Oszillators:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.1.43)$$

Dass der Grundzustand eindeutig und nicht-degeneriert ist, werden wir im nächsten Abschnitt zeigen, indem wir die eindeutige Wellenfunktion des Oszillators im Ortsraum bestimmen. Die Energie des Zustands $|n\rangle$ ist $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Insbesondere besitzt der Grundzustand die

Vakuum- bzw. Grundzustands-Energie

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (3.1.44)$$

In der Quantenfeldtheorie (QFT) dienen diese Zustände der Beschreibung der Quantendynamik oder -kinematik eines Feldes an einem Punkt in einem Konfigurationsraum, also meist im Orts- oder Impulsraum, oder auch bezüglich anderer Basen. Jeder Mode beziehungsweise jedem Punkt in einem der Räume wird eine solche ∞ Leiter von Eigenvektoren des Anzahloperators \hat{N} zugeordnet. Dieser Operator kann dann zum Beispiel als Teilchenzahloperator für den entsprechenden Raumpunkt aufgefasst werden oder als Besetzungszahloperator für die betreffende Feldanregung. Die Zustände

$$|n; \xi\rangle := \otimes_{\xi} |n_{\xi}\rangle$$

für alle möglichen Anregungskombinationen der mit ξ bezeichneten Moden/Raumpunkte bildet eine **Basis des Zustandsraums der Quantenfeldtheorie**, des sogenannten **Fock-Raums**.

Wir kehren zum harmonischen Oszillator zurück und diskutieren abschließend die Unschärferelation für die Eigenzustände $|n\rangle$ von \hat{H} . Es lässt sich leicht zeigen, dass (\rightarrow Übungen)

$$(\Delta x)_n^2 (\Delta p)_n^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2, \quad (3.1.45)$$

wobei wie üblich $(\Delta x)_n^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{x} | n \rangle^2$ etc. bezeichnet. Der Grundzustand $|0\rangle$ saturiert demnach die Unschärferelation, vgl. (1.7.173). Die Existenz der **nichtverschwindenden Vakuumenergie** ist eine Konsequenz der Unschärferelation: Zunächst gilt, dass bezüglich jedes Energie-Eigenzustands die Mittelwerte von Ort und Impuls gleich Null sind, $\langle n | \hat{x} | n \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$. Dies folgt direkt aus der Orthonormierung der Eigenzustände $\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$ und der Tatsache, dass Ort und Impuls Linearkombinationen von a und a^\dagger darstellen – es sei an Gln. (3.1.4), (3.1.5) erinnert! Die Orthogonalität verschiedener Eigenzustände, $\langle n | n' \rangle$, o.B.d.A. unter der Annahme, dass $n < n'$, lässt sich wie folgt zeigen:

$$\langle n | n' \rangle = \frac{1}{\sqrt{n'!}} \langle n | (a^\dagger)^{n'} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n'!}} \left(\langle 0 | a^{n'} | n \rangle \right)^* = \sqrt{\frac{n!}{n'! (n' - n)!}} \left(\langle 0 | a^{n' - n} | 0 \rangle \right)^* = 0, \quad (3.1.46)$$

während man für $n > n'$ dieselbe Rechnung nach komplexer Konjugation zu $(\langle n' | n \rangle)^*$ durchführt. *qed.* Da also die Mittelwerte verschwinden, ist der Erwartungswert der Energie durch die Varianzen von Ort

und Impuls bestimmt und damit echt größer als 0,

$$\begin{aligned}\langle n | \hat{H} | n \rangle &= \hbar\omega \left(\langle n | \hat{X}^2 | n \rangle + \langle n | \hat{P}^2 | n \rangle \right) \\ &= \hbar\omega \left[(\Delta X)_n^2 + (\Delta P)_n^2 \right] > 0 \quad \text{für alle } n.\end{aligned}\quad (3.1.47)$$

3.1.2. Ortsraumdarstellung der Energie-Eigenzustände des HO

Im folgenden bestimmen wir die Wellenfunktionen der Eigenzustände $|n\rangle$ des HO und beginnen dafür mit dem Grundzustand, definiert in den ursprünglichen Einheiten durch

$$|\emptyset\rangle = a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) |0\rangle. \quad (3.1.48)$$

Wir nutzen nun, dass auch das entsprechende Matrixelement mit dem Ortseigenzustand gleich Null ist,

$$0 = \langle x | a | 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x | \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) | 0 \rangle, \quad (3.1.49)$$

um daraus mittels $\langle x | \hat{x} | 0 \rangle = x \langle x | 0 \rangle$ und $\langle x | \hat{p} | 0 \rangle = -i\hbar \partial_x \langle x | 0 \rangle$ eine Differentialgleichung für die Wellenfunktion des Grundzustands herzuleiten:

$$0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \langle x | 0 \rangle, \quad \text{mit der Oszillatorlänge } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \Leftrightarrow \omega = \frac{\hbar}{mx_0^2}. \quad (3.1.50)$$

Die Wellenfunktion $\psi_0(x) \equiv \langle x | 0 \rangle$ ergibt sich damit aus der Lösung $f_0(x/x_0) = \psi_0(x)$ der Differentialgleichung

$$\frac{df_0(x)}{dx} = -x f_0(x), \quad (3.1.51)$$

also aus der Exponentialfunktion $f_0(x) = e^{-x^2/2}$ zu

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} e^{-(x/x_0)^2/2}. \quad (3.1.52)$$

Die Normierung \mathcal{N} folgt aus der L^2 -Norm,

$$1 = \int dx |\psi_0(x)|^2 = \int dx |\mathcal{N}|^2 e^{-(x/x_0)^2} = |\mathcal{N}|^2 \sqrt{\pi x_0^2}, \quad (3.1.53)$$

d.h. $\mathcal{N} = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2}$. Insgesamt resultiert die

Grundzustandswellenfunktion des HO

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2}. \quad (3.1.54)$$

Wir sehen also, dass die Wellenfunktion des Grundzustands ein **Gaußsches Wellenpaket** mit $a = 1/x_0^2$, d.h. 1/e-Breite handelt, welche durch die Oszillatorlänge x_0 gegeben ist. Als Grundzustandswellenfunktion ist sie stationär, zerfließt also nicht in der Zeit. Dieses Ergebnis ist mit unserem obigen Befund konsistent, dass der Grundzustand die Heisenbergsche Unschärferelation saturiert und damit einen Zustand

3. Eindimensionale Probleme

minimaler Unschärfe darstellt. Überdies ist er eindeutig definiert und nicht degeneriert.

Nun finden wir die Wellenfunktion der angeregten Zustände $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ durch die n -fache Wirkung von a^\dagger in der Ortsraum-Darstellung,

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right), \quad (3.1.55)$$

auf den Grundzustand $|0\rangle$. Anschließend Multiplikation mit $\langle x|$ ergibt die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi_n(x) = \langle x|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x), \end{aligned} \quad (3.1.56)$$

was zu

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2} \quad (3.1.57)$$

führt. Daraus folgt, dass die angeregten Wellenfunktionen von ψ_0 generiert werden. Die so generierten Funktionen entsprechen Hermite-Polynomen, welche durch eine Exponential-, speziell Gauß-Funktion im Unendlichen regularisiert sind. Dies entnimmt man direkt der Definition der

Definition 3.4. Hermite-Polynome

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.1.58)$$

welche durch Ableitungen der Gauß-Funktion generiert werden, wonach die verbleibende Exponentialfunktion, anders als in den obigen Wellenfunktionen, wieder herausgeteilt wird. Explizit findet man die folgenden Hermite-Polynome niedrigster Ordnung:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi. \end{aligned} \quad (3.1.59)$$

Die Polynome (un)gerader Ordnung sind (un)gerade in ihren Argumenten, $H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi)$. Induk-

tiv findet man die allgemeinen Ausdrücke

$$H_{2n}(\xi) = \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \frac{(2n)!(2\xi)^{2k}}{(n-k)!(2k)!}, \quad (3.1.60)$$

$$H_{2n+1}(\xi) = 2\xi \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2n+1)!(2\xi)^{2n-2k+1}}{k!(2n-2k+1)!}. \quad (3.1.61)$$

Es sei noch angemerkt, dass eine alternative Darstellung der Hermite-Polynome aus

$$-\partial_\xi = e^{-\xi^2/2} (\xi - \partial_\xi) e^{\xi^2/2} \Rightarrow (-\partial_\xi)^n = e^{-\xi^2/2} (\xi - \partial_\xi)^n e^{\xi^2/2}, \quad (3.1.62)$$

folgt, nämlich

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \partial_\xi^n e^{-\xi^2}. \quad (3.1.63)$$

Aus $\langle m | n \rangle = \delta_{nm} = \int dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)$ läßt sich auch leicht auf die Orthogonalitätsrelation der Hermite-Polynome schließen:

$$\int d\xi e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) = \delta_{mn} \sqrt{\pi} 2^n n!. \quad (3.1.64)$$

Damit lauten die normierten

Wellenfunktionen der Energieeigenzustände des HO:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0}} e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right). \quad (3.1.65)$$

Wie die allgemeinen Zustände erfüllen Sie die Vollständigkeit:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1} \Leftrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(x') = \delta(x - x'), \quad (3.1.66)$$

Diskussion der Energie-Eigenfunktionen des HO:

- H_n und damit auch ψ_n haben n Knoten, d.h. n einfache reelle Nullstellen.
- Wie für stationäre Zustände zu erwarten ist, ist die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ reell. Dies steht im Einklang mit dem Verschwinden des Wahrscheinlichkeitsstromes \mathbf{j} für stationäre Zustände: Aus $\partial_t \rho = 0$ für eine stationäre Wellenfunktion (mit reiner Phasenentwicklung in der Zeit) folgt $\nabla \mathbf{j} = 0$, d.h. $\nabla S = 0$ für den Phasenwinkel S , so dass der Wahrscheinlichkeitsstrom verschwindet, vgl. (2.3.85).
- Die **Grundzustandsfluktuationen** gemäß der Wellenfunktion

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)},$$

welche, wie bereits betont, ein Gaußsches Wellenpaket mit $a = m\omega/\hbar = 1/x_0^2$ darstellt, lassen sich

3. Eindimensionale Probleme

durch die ersten beiden Momente charakterisieren,

$$\text{Mittelwert : } \langle \hat{x} \rangle = 0, \quad \text{Varianz : } (\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{x_0^2}{2}.$$

Im Grundzustand ist zwar der Mittelwert $\langle \hat{x} \rangle$ am Minimum des Potentials, die Wellenfunktion hat jedoch eine nichtverschwindende Ausdehnung, d.h. sie zeigt Grundzustandsfluktuationen, sogenannte Nullpunktsschwankungen. Diesen entspricht die Energie $E_0 = \hbar\omega/2$, welche auch aus der Unschärferelation herzuleiten ist: $\langle \hat{p}^2 \rangle \langle \hat{x}^2 \rangle \geq \hbar^2/4$, wegen $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$. Die Energie erfüllt dann

$$\begin{aligned} E = \langle \hat{H} \rangle &= \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle \\ &\geq \frac{1}{2m} \left(\langle \hat{p}^2 \rangle + \frac{m^2\omega^2\hbar^2}{4} (\langle \hat{p}^2 \rangle)^{-1} \right). \end{aligned} \quad (3.1.67)$$

Das Minimum der rechten Seite ergibt sich durch Ableiten nach $\langle \hat{p}^2 \rangle$ aus

$$1 - \frac{1}{4}m^2\omega^2\hbar^2 (\langle \hat{p}^2 \rangle)^{-2} = 0 \Rightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle_{\min} = \frac{\hbar\omega m}{2}, \quad (3.1.68)$$

$$\text{zu } E \geq \hbar\omega \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad \square \quad (3.1.69)$$

Die Nullpunktenergie ist die kleinste mit der Unschärferelation zu vereinbarende Energie.

- Was bedeuten die HO Wellenfunktionen? Wir betrachten dazu zum Vergleich Ort und Energie des klassischen Oszillators:

$$x = q_0 \sin \omega t, \quad E = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2.$$

Definition 3.5. Klassische "Aufenthaltswahrscheinlichkeit":

$$P_{\text{class}}(x) dx = 2 \frac{dt}{T}, \quad T = \frac{2\pi}{\omega}, \quad (3.1.70)$$

$$\text{Mit } dx = q_0\omega \cos \omega t dt = q_0\omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{q_0}\right)^2} dt, \quad (3.1.71)$$

$$\Rightarrow P_{\text{class}}(x) = \left[\pi q_0 \sqrt{1 - \left(\frac{x}{q_0}\right)^2} \right]^{-1}. \quad (3.1.72)$$

Wir vergleichen dies mit dem ($n = 1$) HO Zustand, $E_1 = (3/2)\hbar\omega$ für den sich ergibt, dass $q_0 = \sqrt{3}x_0$, sowie mit dem ($n = 10$)-Zustand, für den $q_0 = \sqrt{21}x_0$:

- Im Vergleich zum klassischen Grenzfall gibt es Interferenzmaxima und -minima, bei denen die Wahrscheinlichkeit verschwindet, die räumliche Phasen-angewaschene Verteilung folgt jedoch im Mittel der klassischen.
- Darüber hinaus dringt die Verteilung in den klassisch verbotenen Bereich ein, und es gibt Nullpunktsfluktuationen.

- **Für große n** werden die quantenmechanischen Eigenheiten weniger relevant (schwächere Phasenunschärfe, weniger Eindringen am Rand) → dies entspricht dem **klassischen Grenzfall**.

Mathematische Zusatzbemerkungen:

- Die definierende DGL für die Hermite-Polynome lautet

$$\left(\partial_x^2 - 2x\partial_x + 2n\right)H_n(x) = 0. \quad (3.1.73)$$

- Die Hermite-Polynome lassen sich i.allg. als Ableitungen einer Erzeugenden Funktion Z wie folgt generieren:

$$Z(t) = e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x) \quad \Rightarrow \quad H_n(x) = (\partial_t)^n Z(t) \Big|_{t=0}. \quad (3.1.74)$$

- **Heisenberg-Gruppe**

Soweit die algebraische Operatormethode zur Lösung der stationären Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators. Wir sprechen von einer algebraischen Lösung, da a und a^\dagger wie \hat{x} und \hat{p} einer Lie-Algebra angehören, der Heisenberg-Algebra. Sie ist durch die Lie-Klammer definiert, welche durch die Kommutatorrelationen der betreffenden Operatoren festgelegt ist. Diese Lie-Algebra enthält die Generatoren der Translationen in Orts- und Impulsraum, wie wir im Zusammenhang mit der Einführung des Impulsoperators und der Erinnerung an die Poisson-Klammer der klassischen Mechanik diskutiert haben. Die entsprechende Heisenberg Lie-Gruppe enthält die von diesen Generatoren erzeugten Translationen. Insgesamt stellt sie allerdings eine $2d + 1$ -parametrische Gruppe dar in d Raumdimensionen.

Die (kontinuierliche) Heisenberg-Gruppe läßt sich in einfachster Form als Gruppe oberer Diagonalmatrizen mit reellen Einträgen darstellen,

$$H_{2d+1}(\mathbb{R}) = \left\{ g; g = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{a}^T & c \\ \mathbf{0} & \mathbb{1}_d & \mathbf{b} \\ 0 & \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (3.1.75)$$

3. Eindimensionale Probleme

worin \mathbf{b} , \mathbf{a}^T , etc., d -dimensionale Spalten- bzw. Zeilenvektoren sind, $\mathbb{1}_d$ die d -dimensionale Einheitsmatrix. Die zugehörige Lie-Algebra besteht aus den Matrizen

$$h_{2d+1}(\mathbb{R}) = \left\{ h; h = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{a}^T & c \\ \mathbf{0} & 0_d & \mathbf{b} \\ 0 & \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix} \right\}, \quad (3.1.76)$$

und wird daher von den Basiselementen

$$\left\{ Q_i = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{e}_i^T & 0 \\ \mathbf{0} & 0_d & \mathbf{0} \\ 0 & \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix}, P_j = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}^T & 0 \\ \mathbf{0} & 0_d & \mathbf{e}_j \\ 0 & \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}^T & 1 \\ \mathbf{0} & 0_d & \mathbf{0} \\ 0 & \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix} \right\}, \quad (3.1.77)$$

mit $0_d = d \times d$ -Nullmatrix, aufgespannt, welche der Kommutator-(Lie-Klammer-)Algebra

$$[Q_i, P_j] = Z\delta_{ij}, \quad [Q_i, Z] = [P_j, Z] = 0. \quad (3.1.78)$$

genügen. Jedes Element der Heisenberg-Gruppe läßt sich schreiben als

$$g = \exp\{i(p_i Q_i + q_j P_j + \varphi)\}, \quad (3.1.79)$$

worin $p_i, q_j, \varphi \in \mathbb{R}$ $2d + 1$ reelle Parameter sind. In der Quantenmechanik identifizieren wir $Q_i \leftrightarrow \hat{x}_i$, $P_j \leftrightarrow \hat{p}_j$, und $Z \leftrightarrow i\hbar\mathbb{1}$.

Die Elemente der Heisenberg-Gruppe entsprechen den Translationen in Orts- und Impulsraum, sowie der Multiplikation mit einer konstanten Phase, d.h., für jede nichtverschwindende reelle Zahl \hbar können wir eine irreduzible unitäre Darstellung g_\hbar der Heisenberg-Gruppe H_{2d+1} definieren, welche auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^d)$ wie folgt wirkt:

$$[g_\hbar(\mathbf{a}, \mathbf{b}, c)\psi](\mathbf{x}) = e^{i\hbar c} e^{i\mathbf{b}\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x} + \hbar\mathbf{a}). \quad (3.1.80)$$

Diese wird als Schrödinger-Darstellung bezeichnet.

Da wir die Auf- und Absteigeoperatoren für den harmonischen Oszillator einfach als zwei unabhängige Linearkombinationen des Orts- und Impulsoperators definiert haben, bleibt dadurch die Lie-Klammer invariant, und a , a^\dagger und $i\hbar$ charakterisieren nach wie vor die Heisenberg Lie-Algebra, welche wir hier nutzen, um rekursiv die Eigenzustände des harmonischen Oszillators zu konstruieren. Ähnliche Generator-Algebren werden wir im Zusammenhang mit der Quantisierung des Drehimpulses kennenlernen. Dort werden die quantenmechanischen Drehimpuls-Operatoren u.a. als Leiteroperatoren dienen, um die einzelnen Eigenzustände zu verschiedenen Magnetquantenzahlen m_F miteinander zu verbinden, d.h., einen Zustand m_F in einen anderen mit $m_F \pm 1$ zu transformieren.

Über die Wirkung einzelner Leiteroperatoren hinaus führen die Translationen $T(\alpha) \sim \exp\{\alpha a^\dagger\}$ im komplexen Phasenraum $\{x, ip\}$, welche durch die Generatoren a und a^\dagger erzeugt werden, z.B. vom Grundzustand $|0\rangle$ zu den in Abschnitt 3.1.4 zu besprechenden kohärenten Zuständen $|\alpha\rangle$, welche in der Quantenteilchenphysik, insbesondere in Quantenoptik und Quantenfeldtheorie von großer Relevanz sind.

3.1.3. Direkte Lösung der Ortsraum-Schrödingergleichung

Alternativ zur algebraischen Operatormethode können wir den harmonischen Oszillator auch direkt im Ortsraum lösen. Ausgangspunkt ist die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.1.81)$$

In dimensionslosen Einheiten $\xi = x/x_0$, $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ und $\lambda = 2E/(\hbar\omega)$ erweist sie sich als *Hermiteische Differentialgleichung*

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \lambda\right)\psi(\xi) = 0. \quad (3.1.82)$$

Wir wenden folgende allgemeine Lösungsstrategie an:

- Bestimme zunächst die asymptotische Lösung $u(\xi)$, für $\xi \rightarrow \infty$, d.h., die Lösung der Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right)u(\xi) = 0, \quad (\lambda \ll \xi^2), \quad (3.1.83)$$

welche somit $u(\xi) \cong \exp\{-\frac{1}{2}\xi^2\}$ lautet. Die zweite mögliche Lösung, $\exp\{\frac{1}{2}\xi^2\}$ ist nicht normierbar und spielt daher für die weitere Diskussion keine Rolle.

- Mit dem Produktansatz $\psi(\xi) = u(\xi)v(\xi)$ für die allgemeine Lösung von (3.1.82) lautet die

Hermiteische Differentialgleichung:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \lambda - 1\right)v(\xi) = 0. \quad (3.1.84)$$

Die möglichen Eigenwerte $-\lambda$ des Differentialoperators ergeben sich aus der Forderung nach der Normierbarkeit von v . Um sie zu berechnen, wählen wir den Potenzreihenansatz

$$v(\xi) = \xi^m \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n. \quad (3.1.85)$$

Einsetzen in die DGL ergibt

$$\begin{aligned} 0 &= \xi^{m-2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left[(m+n)(m+n-1) \underbrace{-2(m+n)\xi^2 + (\lambda-1)\xi^2}_{\text{ersetze } n \rightarrow n-2} \right] \xi^n \\ &= \xi^{m-2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n (m+n)(m+n-1) - \sum_{n=2}^{\infty} c_{n-2} \xi^n [2(m+n-2) - (\lambda-1)] \right]. \end{aligned} \quad (3.1.86)$$

Diese Bedingung soll für beliebige ξ gelten, so dass jeder Koeffizient der Reihe einzeln verschwinden muss. Für $n \geq 2$ erhält man eine Rekursionsrelation, während $n < 2$ gesondert zu behandeln ist:

- (a) $n = 0$: $m(m-1)c_0 = 0$,
- (b) $n = 1$: $(m+1)mc_1 = 0$,
- (c) $n \geq 2$: $(m+n)(m+n-1)c_n = [2(m+n-2) - \lambda + 1]c_{n-2}$.

Mögliche Fälle für die Wahl der initialen Koeffizienten sind:

- (i) $c_0 = c_1 = 0 \Rightarrow$ wegen (c) : $c_n = 0 \Rightarrow v \equiv 0$ trivial, aber nutzlos ;
- (ii) $c_0 \neq 0, c_1 \neq 0 \Rightarrow m = 0$ nach (a, b) ;
- (iii) $c_0 = 0, c_1 \neq 0 \Rightarrow m \in \{0, -1\}$ nach (b) ;
- (iv) $c_0 \neq 0, c_1 = 0 \Rightarrow m \in \{0, 1\}$ nach (a) .

3. Eindimensionale Probleme

Fälle (iii), $m = -1$ und (iv), $m = 0$, sowie (iv), $m = 1$ und (iii), $m = 0$ sind jeweils identisch, da aus (iii), $m = -1$ folgt:

$$v(\xi) = c_1 + c_3\xi^2 + c_5\xi^4 + \dots, \quad (3.1.87)$$

aus (iv), $m = 0$:

$$v(\xi) = c_0 + c_2\xi^2 + c_4\xi^4 + \dots, \text{ etc.} \quad (3.1.88)$$

Wir wählen also o.B.d.A. $m = 0$. Damit folgt die Rekursionsrelation

$$c_n = \frac{2(n-2) - \lambda + 1}{n(n-1)} c_{n-2}. \quad (3.1.89)$$

Für große n gilt (wobei wir annehmen, dass $\lambda \notin \mathbb{Z}$), dass

$$\frac{c_n}{c_{n-2}} \leq \begin{cases} 2/n & \text{für } n \text{ gerade} \\ 2/(n-1) & \text{für } n \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (3.1.90)$$

Die Potenzreihe ist demnach asymptotisch kleiner als

$$\begin{aligned} & c_0 \left(1 + \frac{2}{2}\xi^2 + \frac{2^2}{2 \cdot 4}\xi^4 + \frac{2^3}{2 \cdot 4 \cdot 6}\xi^6 + \dots \right) \\ & + c_1 \left(\xi + \frac{2}{2}\xi^3 + \frac{2^2}{2 \cdot 4}\xi^5 + \frac{2^3}{2 \cdot 4 \cdot 6}\xi^7 + \dots \right) \\ & = (c_0 + c_1\xi) \exp\{\xi^2\}. \end{aligned} \quad (3.1.91)$$

Diese Reihe divergiert zu stark, um durch Multiplikation mit $e^{-\xi^2/2}$ quadratintegrierbar zu werden. Normierbare Lösungen existieren also nur, wenn entweder $c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$ ist, oder $c_1 = 0$, $c_0 \neq 0$, und die mit dem jeweils anderen Koeffizienten gestartete Reihe abbricht.

Die Reihe $v(\xi)$ reduziert sich auf ein Polynom, falls $c_{n+2} = 0$, $c_n \neq 0$, d.h.:

$$0 = 2n - \lambda + 1, \quad \text{d.h.} \quad \frac{\lambda}{2} = \frac{E}{\hbar\omega} = n + \frac{1}{2}, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Damit haben wir wiederum das Energie-Spektrum des harmonischen Oszillators bestimmt.

Die zugehörigen Polynome sind abwechselnd gerade und ungerade und genügen der Hermitschen DGL (3.1.84), so dass die angesetzten Polynome proportional zu den Hermite-Polynomen sind.

Lösungen der Hermiteschen Differentialgleichung:

Das Eigenwert-Problem

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2\right) \varphi(\xi) = \epsilon \varphi(\xi), \quad (3.1.92)$$

für $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$ -Funktionen φ , wird gelöst durch die Eigenfunktionen

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (3.1.93)$$

mit den Eigenwerten

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2}. \quad (3.1.94)$$

Die Energie-Eigenfunktionen des Harmonischen Oszillators im Ortsraum,

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \quad (3.1.95)$$

erhält man aus den Lösungen der hermiteschen DGL durch die Ersetzung $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$, mit den Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.1.96)$$

3.1.4. Kohärente ZuständeDie Fockraum-Zustände $|n\rangle = (n!)^{-1/2} (a^\dagger)^n |0\rangle$ sind Energie-Eigenzustände und somit stationär:

$$|n; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |n; t_0\rangle = e^{-i\omega(n+1/2)(t-t_0)} |n; t_0\rangle. \quad (3.1.97)$$

Insbesondere ist zu jedem Zeitpunkt t

$$\langle \hat{x} \rangle_t = 0, \quad \langle \hat{p} \rangle_t = 0. \quad (3.1.98)$$

Charakteristisch für die klassische Lösung des harmonischen Oszillators sind dagegen Oszillationen von x und p mit Frequenz ω . Um ein solches Verhalten auch quantenmechanisch beschreiben zu können, führt man die sogen. **kohärenten Zustände** ein.Um diese zu motivieren, erinnern wir uns zunächst an den Phasenraum der klassischen Koordinaten, $\{X, P\}$, und fassen diesen entsprechend der Definition der Leiteroperatoren als die komplexe Ebene der Variablen $\alpha = (X + iP) / \sqrt{2}$ auf. Eine klassische harmonische Oszillation mit Kreisfrequenz ω entspricht dann einer Rotation in der komplexen Ebene um $(X, P) = (0, 0)$, z.B. mit folgender Phasenlage,

$$X_\omega(t) = X_0 \cos \omega t, \quad P_\omega(t) = -P_0 \sin \omega t. \quad (3.1.99)$$

3. Eindimensionale Probleme

Falls $X_0 = P_0$, durchläuft die Phasenraumkoordinate eine Kreisbahn,

$$\alpha_\omega(t) = \frac{X_0}{\sqrt{2}} \exp\{-i\omega t\}, \quad (3.1.100)$$

d.h. eine Phasenrotation.

Die Idee ist nun, einen quantenmechanischen Eigenzustand des Operators a zu finden, dessen Eigenwert gleich α ist und die obige Zeitentwicklung, mit $\alpha(0) = X_0/2$, durchläuft:

Definition 3.6. Ein kohärenter Zustand $|\alpha\rangle$ ist ein Eigenzustand des Leiteroperators a zum Eigenwert α :

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (3.1.101)$$

Existiert ein solcher Eigenzustand, so muß er sich als Linearkombination der Elemente des vollständigen Satzes an Energie-Eigenfunktionen des HO schreiben lassen:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle. \quad (3.1.102)$$

Aus der Eigenwertgleichung erhalten wir:

$$\alpha|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle \stackrel{(m=n-1)}{=} \sum_{m=0}^{\infty} c_{m+1} \sqrt{m+1} |m\rangle. \quad (3.1.103)$$

Hieraus können wir ablesen, dass

$$c_{m+1} \sqrt{m+1} = c_m \alpha \quad (3.1.104)$$

$$\Rightarrow \frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{\alpha}{\sqrt{m+1}} \Rightarrow c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0, \quad \forall n \geq 1. \quad (3.1.105)$$

Damit ergibt sich der kohärente Zustand als die unendliche Superposition

$$\Rightarrow |\alpha\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.1.106)$$

Die Normierung des Zustands folgt aus der Tatsache, dass die Koeffizienten eine Exponentialreihe bilden:

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \exp\{|\alpha|^2\}. \quad \Rightarrow \quad |c_0| = e^{-|\alpha|^2/2} \quad (3.1.107)$$

Der normierte kohärente Zustand läßt sich schlußendlich in einer Form schreiben, in der der Aufsteigeoperator als Argument einer Exponentialfunktion wirkt. Er erzeugt somit die

Kohärenten Zustände durch eine Translation des Vakuums im Phasenraum,

$$\Leftrightarrow |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle, \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}. \quad (3.1.108)$$

Hierbei haben wir $|n\rangle = (1/\sqrt{n!})(a^\dagger)^n |0\rangle$ verwendet und eine totale Phase gleich 1 gewählt.

Mathematische Anmerkungen:

- Die drei "Operatoren" \hat{X} , \hat{P} und \hbar spannen als Generatoren der Heisenberg-Gruppe der Translationen in Orts- und Impulsraum sowie der Multiplikationen mit einer konstanten Phase die entsprechende Lie-Algebra auf. Dies gilt ebenso für $\{a, a^\dagger, \hbar\}$, welche wir als linear unabhängige Kombinationen der Phasenraum-Operatoren definiert hatten. Vor diesem Hintergrund stellen die Transformationen $\exp\{\alpha a^\dagger\}$, $\exp\{\alpha^* a\}$ ebenfalls Translationen im (komplexen) Phasenraum ($\alpha = (X + iP)/\sqrt{2}$) dar, wie man sich mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff Formel,

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}, \quad (3.1.109)$$

für zwei beliebige Operatoren oder quadratische Matrizen leicht klar macht. Gl. (3.1.109) ist über die Taylor-Reihe der Exponentialfunktion definiert und läßt sich mit Hilfe von Hadamards Lemma beweisen, welches besagt, dass

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} [A, B]_n / n!, \quad (3.1.110)$$

worin $[A, B]_n = [A, [A, B]_{n-1}]$ und $[A, B]_0 = B$ (Übung für Interessierte).

Mittels (3.1.109) zeigt man zunächst, dass sich der kohärente Zustand allgemeiner als $e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = \hat{D}(\alpha) |0\rangle$ schreiben läßt, mit dem Verschiebungs-(Displacement-)Operator

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} = e^{ip\hat{X} - ix\hat{P}}. \quad (3.1.111)$$

Dann zerlegt man, ebenfalls mittels (3.1.109), \hat{D} in ein Produkt,

$$\hat{D}(\alpha) = e^{ip\hat{X}} e^{-ix\hat{P}} e^{ipx} = e^{-ix\hat{P}} e^{ip\hat{X}} e^{-ipx}, \quad (3.1.112)$$

so dass klar wird, dass sich die Erzeugung des kohärenten Zustands aus dem Grundzustand als Translation im Phasenraum sowie, gemäß der Heisenberg-Algebra, der Multiplikation mit einer Phase darstellen läßt. Die Phase unterscheidet dabei zwischen den beiden möglichen Reihenfolgen der Orts- und Impuls-Translationen.

- Weiterhin kann zeigen, dass der Überlapp zweier kohärenter Zustände

$$\langle \beta | \alpha \rangle = e^{\beta^* \alpha - (|\alpha|^2 + |\beta|^2)/2} \quad (3.1.113)$$

ist, konsistent mit ihrer Normierung (3.1.107). Hierin wird jedoch sichtbar, dass $\langle \beta | \alpha \rangle \neq 0$ für $\alpha \neq \beta$, d.h., unterschiedliche kohärente Zustände sind nicht orthogonal zueinander.

Um eine physikalische Interpretation der kohärenten Zustände zu geben, betrachten wir ihre Zeitentwicklung von $t_0 = 0$ nach t . Wir nehmen \hat{H} als zeitunabhängig an und berechnen den Zeitentwicklungsoperator

3. Eindimensionale Probleme

gemäß (2.1.13) und (3.1.11),

$$\begin{aligned}
 |\alpha; t\rangle &= e^{-i\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})t} |\alpha; 0\rangle \\
 &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+1/2)t} |n\rangle \\
 &= e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}; 0\rangle
 \end{aligned} \tag{3.1.114}$$

Bis auf eine multiplikative, t -abhängige Phase besteht die Zeitentwicklung also in einer Phasenrotation der komplexen Phasenraumkoordinate

$$\alpha(t) = \alpha(0) e^{-i\omega t}, \tag{3.1.115}$$

gleich der Zeitentwicklung des klassischen harmonischen Oszillators, denn es gilt, dass

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha(t) | \hat{a} | \alpha(t) \rangle &= \langle \alpha(t) | \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) | \alpha(t) \rangle \\
 &= \alpha(t) = \alpha(0) [\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)].
 \end{aligned} \tag{3.1.116}$$

Es folgt, dass die Projektion auf die Ortskoordinate eine klassische harmonische Oszillation ausführt,

$$\langle \alpha(t) | \hat{X} | \alpha(t) \rangle = \sqrt{2}\alpha(0) \cos(\omega t), \tag{3.1.117}$$

und analog der Impuls \hat{P} .

Entsprechend gilt für die ursprünglichen Operatoren \hat{x} , \hat{p} :

$$\langle \hat{x} \rangle_{\alpha,t} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha(0) \cos(\omega t) = q_0 \cos(\omega t) \tag{3.1.118}$$

$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha,t} = -\sqrt{2\hbar m\omega} \alpha(0) \sin(\omega t) = -m\omega q_0 \sin(\omega t) \tag{3.1.119}$$

$$\Rightarrow \alpha(0) = q_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} = \frac{q_0}{\sqrt{2}x_0} \tag{3.1.120}$$

Als nächstes möchten wir nun die Wellenfunktion bestimmen. Dazu betrachten wir

$$(a - \alpha)|\alpha\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle x | a - \alpha | \alpha \rangle = 0. \tag{3.1.121}$$

Wir erhalten damit

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) - \alpha \right] \psi_{\alpha}(x) = 0, \tag{3.1.122}$$

was gleichbedeutend mit

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} - \sqrt{2}\alpha \right) \psi_{\alpha}(x) = 0 \tag{3.1.123}$$

ist. Diese DGL lösen wir mithilfe des Ansatzes

$$\psi_{\alpha}(x) = \mathcal{N}_{\alpha} e^{-Ax^2+Bx+C}. \tag{3.1.124}$$

Eingesetzt in (3.1.123) führt dies zu dem Ergebnis

$$\psi_\alpha(x) = \mathcal{N}_\alpha e^{-\frac{1}{2x_0} [x - \sqrt{2\text{Re}(\alpha)x_0}]^2 + i\delta(x,t)}, \quad (3.1.125)$$

worin die Phase durch $\delta(x,t) = \sqrt{2} \frac{x}{x_0} \text{Im}(\alpha(t))$ definiert ist. Denn damit

$$\left(\frac{x}{x_0} + Bx_0 - 2Ax_0 - \sqrt{2}\alpha \right) \psi_\alpha = 0 \quad (3.1.126)$$

für alle x gilt, muss separat $A = 1/(2x_0^2)$, $B = \sqrt{2}\alpha/x_0$ sein. Damit ist

$$\begin{aligned} -Ax^2 + Bx + C &= -\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 + \sqrt{2}\alpha \frac{x}{x_0} - [\text{Re}(\alpha)]^2 \\ &= \frac{(x - \sqrt{2}x_0 \text{Re}(\alpha))^2}{2x_0^2} + i\delta(x,t). \end{aligned} \quad (3.1.127)$$

$C \in \mathbb{R}$ kann frei gewählt werden, da es einfach \mathcal{N}_α umdefiniert.

Zeitabhängige Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsdichte des kohärenten Zustands mit $\alpha(0) = q_0/(\sqrt{2}x_0)$:

$$\psi_\alpha(x,t) = \left(\frac{1}{\pi x_0^2} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{x - q_0 \cos(\omega t)}{x_0} \right]^2 - i \frac{x q_0}{x_0^2} \sin(\omega t) \right\}, \quad (3.1.128)$$

$$\rho_\alpha(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi} x_0} \exp \left\{ - \left[\frac{x - q_0 \cos(\omega t)}{x_0} \right]^2 \right\}. \quad (3.1.129)$$

- (3.1.128) ist ein **nicht-dispersives**, um $x(t) = q_0 \cos(\omega t)$ zentriertes, **klassisch oszillierendes Gaußsches Wellenpaket**, dessen Breite durch die Oszillatorlänge $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ gegeben ist. ψ_α vereint damit die Eigenschaften der klassischen Oszillation mit denen der Quantenmechanik: (1) Die Oszillation des Mittelwerts gibt die Bewegung der Teilchenposition im Potential wieder. (2) Das Wellenpaket ist gaußsch verbreitert, unterliegt damit minimaler Impuls-Orts-Unschärfe. (3) Die Funktion unter der gaußschen Einhüllenden gibt mit ihrer räumlichen Oszillation einer ebenen Welle, mit zeitabhängiger Wellenzahl $\propto \sin(\omega t)$ den momentanen Impuls des Teilchens wieder, welcher ebenfalls harmonisch oszilliert, relativ zum Ort um eine Phase $\pi/2$ verschoben.

Animationen der Zeitentwicklung der Wellenfunktion (3.1.128) finden sich auf der Webseite der Vorlesung,

https://www.kip.uni-heidelberg.de/gasenzer/teaching/ss24_qm_material.

- Kohärente Zustände bilden das Bindeglied zwischen klassischer Physik und Quantenmechanik. Besonders häufig werden sie in der Elektrodynamik eingesetzt, wo sich viele zu einer Laserwelle überlagerte Photonen im Mittel wie eine klassische elektromagnetische Welle verhalten, die Quantenfluktuationen aber durch die kohärenten Zustände beschrieben sind.

Zum Abschluß betrachten wir noch die Eigenschaften der **Verteilung über die Quantenzahlen n** , wenn

3. Eindimensionale Probleme

man den kohärenten Zustand als Superposition der Energie-Eigenzustände $|n\rangle$ auffasst:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n c_n |n\rangle, \quad (3.1.130)$$

$$\Rightarrow |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \text{Poisson-Verteilung}, \quad (3.1.131)$$

welche durch die Varianz

$$\begin{aligned} (\Delta N)^2 &= e^{-|\alpha|^2} \sum_n n^2 |c_n|^2 - \langle \hat{N} \rangle_\alpha^2 \\ &= \langle \alpha | a^\dagger \underbrace{aa^\dagger}_{=a^\dagger a + [a, a^\dagger]} a | \alpha \rangle - \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle^2 \\ &= \langle \alpha | a^\dagger a^\dagger a a | \alpha \rangle + \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle - \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle^2 \\ &= |\alpha|^4 + |\alpha|^2 - (|\alpha|^2)^2 = |\alpha|^2 = \langle \hat{N} \rangle_\alpha = \bar{N}, \end{aligned} \quad (3.1.132)$$

charakterisiert ist, welche also gleich dem Mittelwert in n ist. Daraus folgt:

$$\Rightarrow \frac{\text{Schwankung}}{\text{Mittelwert}} = \frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}} = \frac{1}{|\alpha|}, \quad (3.1.133)$$

wie bei einer Normalverteilung.

Die statistischen Momente 1. und 2. Ordnung der Poissonverteilung stehen also im selben Verhältnis zueinander, wie die der Gaußverteilung. Für große \bar{N} ähneln sich Poisson- und Gaußverteilung in der Umgebung ihrer Maxima zunehmend.

Damit schließen wir unsere Diskussion der kohärenten Zustände und gehen zu einer weiteren Klasse wichtiger Eigenwertprobleme der stationären Schrödingergleichung über, den sich stufenweise verändernden Potentialen.

3.2. Potentialstufen

Bislang haben wir Potentiale $V(x)$ mit Ortsabhängigkeit betrachtet, welche entweder

- $V(x) \equiv \text{konstant}$ waren und die wir o.B.d.A. als $= 0$ wählen konnten, da ein konstantes Potential V_0 zu einer unphysikalischen konstanten Phase $\exp\{-iV_0t/\hbar\}$ führt, oder es galt
- $V(x) \propto x^2$, im Fall des harmonischen Oszillators.

Als nächsten Schritt wollen wir jetzt Potentiale $V(x)$ betrachten, welche stückweise konstant sind und dazwischen eine Unstetigkeit aufweisen.

3.2.1. Stückweise stetige Potentiale

Allgemeiner können wir stückweise, innerhalb von Regionen I und II, stetige Potentiale betrachten, welche dazwischen eine Stufe aufweisen:

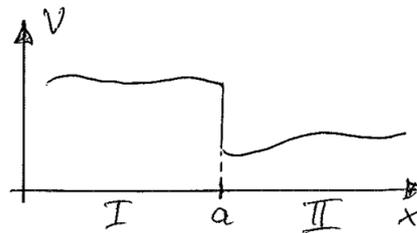


Abbildung 3.1.: Stückweise stetiges Potential mit Stufe

Ziel ist die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x). \quad (3.2.134)$$

Wie wird $\psi(x)$ durch die Potentialstufe bei $x = a$ beeinflusst? Dazu nehmen wir an, dass auch die Wellenfunktion oder ihre Ableitung dort eine Stufe aufweist:

$$(i) \quad \begin{aligned} \psi(x) &\sim \theta(x-a) \text{ in einer } \epsilon\text{-Umgebung von } a, \text{ ist also unstetig bei } a \\ &\Rightarrow \psi''(x) \sim \delta'(x-a) \end{aligned} \quad (3.2.135)$$

$$(ii) \quad \begin{aligned} \psi'(x) &\sim \theta(x-a) \text{ um } x = a \\ &\Rightarrow \psi''(x) \sim \delta(x-a) \end{aligned} \quad (3.2.136)$$

Beide Annahmen führen jedoch zu einem Widerspruch, da für eine entsprechende Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung der Term der kinetischen Energie einer δ -Distribution bzw. ihrer Ableitung, der Potentialterm dagegen einen endlichen Sprung aufweisen würde,

$$\psi''(x) \sim \underbrace{V(x)}_{\text{endlicher Sprung } \sim \theta(x-a)} \underbrace{\psi(x)}_{\text{endlicher Sprung oder Knick}}, \quad (3.2.137)$$

und sich beide daher nicht zur der mit dem Energie-Eigenwert E multiplizierten Wellenfunktion addieren können. Daraus folgern wir: ψ und ψ' müssen beide stetig bei $x = a$ sein.

3. Eindimensionale Probleme

Anschlussbedingungen für die Wellenfunktionen $\psi_{I,II}$ beiderseits einer Potentialstufe:

$$\begin{cases} \psi_I(a) = \psi_{II}(a) , \\ \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a) . \end{cases} \quad (3.2.138)$$

Diese Bedingungen lassen sich auch in Quotientenform schreiben,

$$\frac{\psi'_I(a)}{\psi_I(a)} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)} \leftrightarrow (\ln \psi_I)'_{x=a} = (\ln \psi_{II})'_{x=a} \quad (3.2.139)$$

Wir bemerken, dass für den Fall, dass das Potential selbst einer Distribution gleicht am Anschlußpunkt, $V(x) \sim \delta(x)$, die obige Argumentation ihre Gültigkeit verliert.

3.2.2. Potentialstufe

Nun betrachten wir den vereinfachten Fall des stückweise konstanten Potentials $V(x) = V_0\theta(x - x_0)$, mit $V_0 \geq 0$:

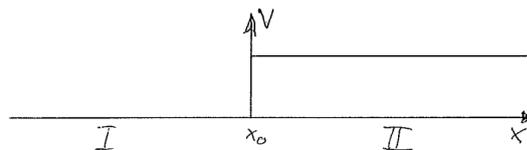


Abbildung 3.2.: Potentialstufe

Der Einfachheit halber wählen wir $x_0 = 0$, und wir erhalten damit die folgenden Schrödingergleichungen beiderseits der Stufe:

$$I : \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi =: -k_I^2 \psi'' , \quad \text{für } x < 0 , \quad (3.2.140)$$

$$II : \psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi =: -k_{II}^2 \psi'' , \quad \text{für } x > 0 . \quad (3.2.141)$$

Zur Lösung der Schrödingergleichung für das Gesamtsystem müssen wir unterscheiden, ob die Energie größer als das höhere der Potentialniveaus bei $x > 0$ ist oder darunter liegt:

Fall 1: $E > V_0$:

In diesem Fall entspricht die Lösung beiderseits der Stufe einer ebenen Welle mit $k_I, k_{II} \in \mathbb{R}$. Die Schrödingergleichung wird in I und II also durch die zwei möglichen Funktionen mit (bis auf ein Vorzeichen) gleicher Wellenzahl,

$$e^{ikx}, e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k = \begin{cases} k_I & ; \quad x < 0 , \\ k_{II} & ; \quad x > 0 , \end{cases} \quad (3.2.142)$$

gelöst. O.B.d.A. nehmen wir an, dass die Welle $e^{ik_I x}$ von links einfällt und teilweise reflektiert und teilweise transmittiert wird. Links von der Stufe setzen wir die Lösung daher als Superposition an, während

rechts nur eine auslaufende Welle beiträgt:

$$\psi_I(x) = e^{ik_I x} + R e^{-ik_I x}, \quad x < 0, \quad (3.2.143)$$

$$\psi_{II}(x) = T e^{ik_{II} x}, \quad x > 0, \quad (3.2.144)$$

$$\psi(x) = [1 - \theta(x)] \psi_I(x) + \theta(x) \psi_{II}(x). \quad (3.2.145)$$

Aus den Anschlussbedingungen (3.2.138) bei $x = 0$ erhalten wir:

$$\text{für } \psi : \quad 1 + R = T, \quad (3.2.146)$$

$$\text{für } \psi' : \quad ik_I(1 - R) = ik_{II}T, \quad (3.2.147)$$

Durch Kombination erhalten wir, dass

$$R = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}, \quad T = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}. \quad (3.2.148)$$

Da die obigen Lösungen als ebene Wellen im jeweiligen Halbraum angesetzt sind, ist auch die kombinierte Lösung nicht normierbar über \mathbb{R} . Um Normierbarkeit zu erreichen, könnte man die ebenen Wellen z.B. mittels einer Gauß-Einhüllenden zu einer im Unendlichen abfallenden und damit quadratintegrierbaren Wellenfunktion machen. Das hier bestimmte Verhalten in der Umgebung von $x = 0$ würde dann lokal weiterhin gelten. Graphische Darstellungen der Wellenfunktion (3.2.145) für durchstimmbares V_0 finden sich auf der Webseite der Vorlesung.³

Um die Lösung mittels ebener Wellen physikalisch zu interpretieren, betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichten:

$$\begin{aligned} j_I(x) &= \frac{\hbar}{2mi} \left[(e^{-ik_I x} + R^* e^{ik_I x}) ik_I (e^{ik_I x} - R e^{-ik_I x}) - \text{c.c.} \right] \\ &= \frac{\hbar k_I}{m} (1 - |R|^2) = j_{\text{ein}} - j_{\text{reflektiert}}, \end{aligned} \quad (3.2.149)$$

$$j_{II}(x) = \frac{\hbar k_{II}}{m} |T|^2 = j_{\text{transmittiert}}. \quad (3.2.150)$$

Hierin sind:

$$\text{Reflexionskoeffizient :} \quad r = \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{ein}}} = |R|^2, \quad (3.2.151)$$

$$\text{Transmissionskoeffizient :} \quad t = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}} = \frac{k_{II}}{k_I} |T|^2. \quad (3.2.152)$$

Diskussion der obigen Ergebnisse:

- Man bedenke, dass es klassisch in diesem Fall keine Reflexion gäbe. Würden wir $V_0 < 0$ wählen, so könnte man das Problem "umgekehrt" auffassen und für eine von rechts aus II einfallende und teilweise reflektierte und transmittierte Welle lösen. Allgemein können wir durch Superposition

³https://www.kip.uni-heidelberg.de/gasenzert/teaching/ss24_qm_material

3. Eindimensionale Probleme

dieser und der oben bestimmten Lösungen Wellen konstruieren, welche auf beiden Seiten ein- und auslaufende Komponenten haben.

Es ist daher auch möglich, eine von links einlaufende Welle zu betrachten, welche auf eine solche abfallende Stufe, $V_0 < 0$, trifft und dort teilweise transmittiert und reflektiert wird. Dann finden wir im Grenzfall $V_0 \rightarrow -\infty$, dass $T \rightarrow 0$ und $|R| \rightarrow 1$ geht, was ebenfalls klassisch nicht möglich ist.

Quantenmechanisch erhalten wir ein Wellenphänomen ähnlich wie bei Licht beim Durchgang durch eine Grenzfläche zwischen Medien mit verschiedenen Brechungsindizes.

- Wir betrachten den **Grenzfall** $E \rightarrow \infty$, ($E \gg |V_0|$):

$$\Rightarrow k_{II} \rightarrow k_I, \quad (3.2.153)$$

$$\Rightarrow R \rightarrow 0, \quad T \rightarrow 1. \quad (3.2.154)$$

Wegen der scharfen Stufe wird der klassische Grenzfall gemäß Ehrenfest-Theorem erst für $E \rightarrow \infty$ erreicht. (Betrachtet man alternativ keine Stufe, sondern etwas ein stetig über eine Distanz d variierendes Potential, z.B. $V = V_0 [1 + \tanh(x/2d)] / 2$, so werden Teilchen mit $k \gg d^{-1}$ nicht reflektiert.)

- **Teilchenzahl-Erhaltung:** Aus den Lösungen für R, T folgt:

$$k_I (1 - |R|^2) = k_{II} |T|^2, \quad (3.2.155)$$

$$\Rightarrow j_I = j_{II}, \quad \Rightarrow j_{\text{ein}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{trans}}. \quad (3.2.156)$$

Die letzte Gleichung entspricht der Kontinuitätsgleichung, da $\dot{\rho} \equiv 0$.

- Wir betrachten die Phasen- und Amplituden-Beziehungen. Diese sind leicht grafisch aus

$$\psi|_{x=a} = \text{stetig}, \quad \text{und} \quad \psi'|_{x=a} = \text{stetig} \quad (3.2.157)$$

abzulesen, s. Abb. 3.3 auf S. 99.

Fall 2: $E < V_0$

In diesem Fall ist die Energie rechts der Stufe niedriger als das Potential, so dass dort $k^2/(2m) = E - V_0 < 0$ ist und der Impuls daher imaginär sein muss, $k_{II} \in i\mathbb{R}$:

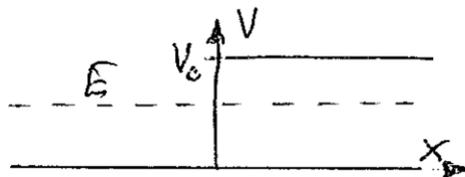


Abbildung 3.4.: Potentialstufe

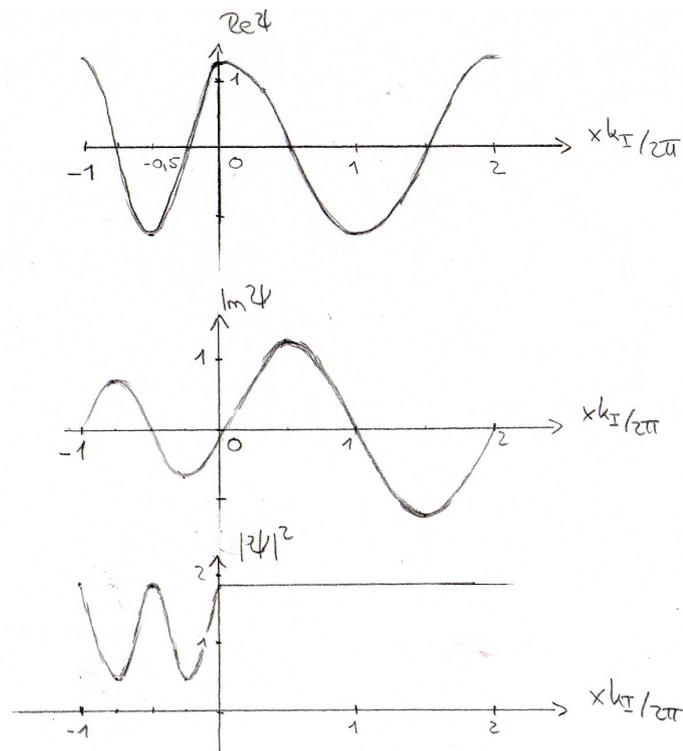


Abbildung 3.3.: Der Realteil und der Imaginärteil von $\psi(x)$ und die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ gegen $x k_I / (2\pi)$, für Einfallenergie $E = 4V_0/3$, d.h. $k_{II}/k_I = 1/2$.

Die Wellenfunktion fällt daher in x exponentiell ab,

$$\psi_{II}(x) = T e^{-\kappa_{II} x}, \quad \text{worin } \kappa_{II} = -i k_{II} \in \mathbb{R} \quad (3.2.158)$$

Mit Hilfe der gleichen Argumentationsschritte wie oben, d.h. , den Bedingungen, dass ψ und ψ' an der Stufe sein müssen, erhalten wir:

$$R = \frac{k_I - i \kappa_{II}}{k_I + i \kappa_{II}} \in \mathbb{C}; \quad T = \frac{2k_I}{k_I + i \kappa_{II}}, \quad (3.2.159)$$

$$\text{woraus folgt, dass } |R|^2 = 1 \rightarrow \text{vollständige Reflexion.} \quad (3.2.160)$$

Da der Transmissionskoeffizient nicht verschwindet, $T \neq 0$, dringt die Wellenfunktion bis $x \sim \kappa_{II}^{-1}$ in die Potentialbarriere ein:

$$\psi(x) = \left[\left(\cos(k_I x) - \frac{\kappa_{II}}{k_I} \sin(k_I x) \right) (1 - \theta(x)) + e^{-\kappa_{II} x} \theta(x) \right] \frac{2}{1 + i \kappa_{II}/k_I}. \quad (3.2.161)$$

3. Eindimensionale Probleme

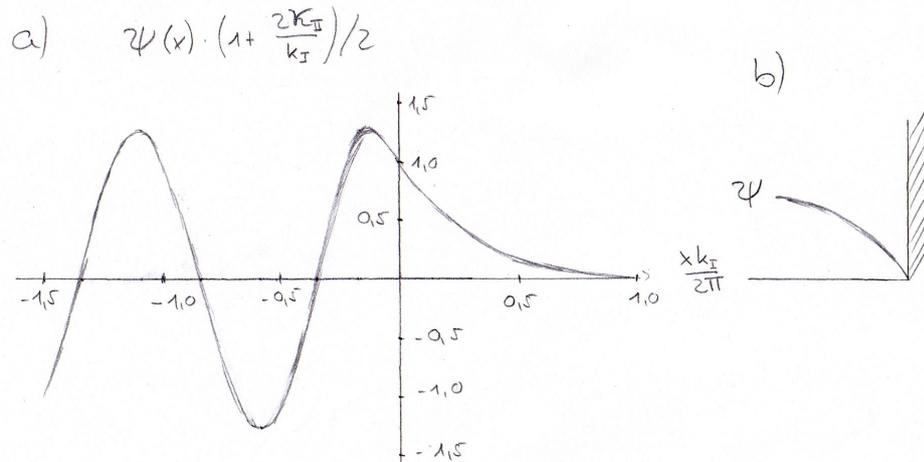


Abbildung 3.5.: (a) Die Wellenfunktion für $\kappa_{II}/k_I = 3/4$. (b) Wellenfunktion an einer Unendlichkeitsstelle.

Fall 3: $V_0 \rightarrow \infty$

In diesem Grenzfall einer unendlich hohen Wand versiegt die Transmission und die Welle wird totalreflektiert:

$$\Rightarrow \kappa_{II} \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad T \rightarrow 0, \quad R \rightarrow -1; \quad (3.2.162)$$

$$\Rightarrow \psi(x) \rightarrow i \sin(k_I x) (1 - \theta(x)). \quad (3.2.163)$$

Insbesondere gilt, dass

$$\psi(x) \Big|_{x = \text{Position der Wand}} = 0 \quad (\text{Dirichlet - Randbedingung}). \quad (3.2.164)$$

$\psi'(x) \Big|_{\text{Wand}} = ik_I$ ist durch das Potential links der Schwelle (hier $V(x < 0) = 0$), sowie den Eigenwert E festgelegt. (Ohne Randbedingung bei $x \rightarrow -\infty$ ist $E > 0$ beliebig wählbar.)

3.3. Potentialbarriere und Tunneleffekt

Bereits beim harmonischen Oszillator hatten wir festgestellt, dass die Wellenfunktion in den klassisch "verbotenen" Bereich eindringt, innerhalb dessen die Gesamtenergie kleiner als die Höhe des Potentials ist. Mit der Potentialbarriere zwischen stückweise konstanten Potentialebenen konnten wir dieses Eindringen formal durch eine exponentiell abfallende Wellenfunktion beschreiben, in welcher die Abfallkonstante durch die "imaginäre Wellenzahl" $\kappa = \text{Im} \sqrt{2m(E - V)}$ gegeben ist. Wählen wir nun die Ausdehnung des Bereichs, in dem ein solcher exponentieller Abfall der Wahrscheinlichkeitsamplitude vorliegt, endlich groß, so kann die Wahrscheinlichkeit über die Breite dieser Potentialbarriere nicht auf Null abgefallen sein. Jenseits der Barriere muß also eine endliche Wahrscheinlichkeit verbleiben, mit der das von links einlaufende Teilchen dort gefunden werden und somit durch die Barriere "getunnelt" sein kann. Diese Wahrscheinlichkeit läßt sich leicht aus der bereits berechneten Funktion innerhalb der Barriere

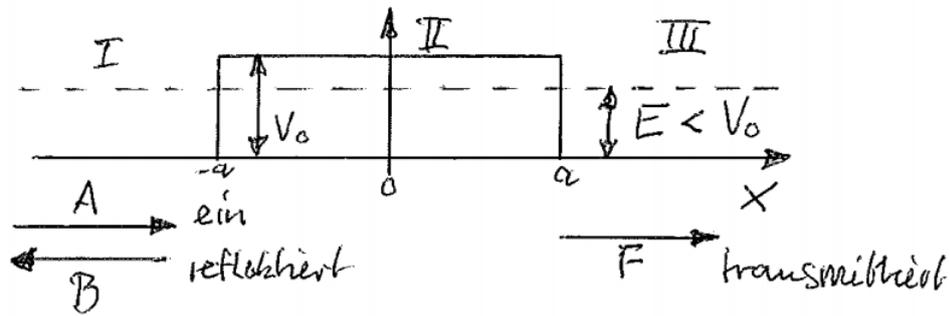


Abbildung 3.6.: Potentialbarriere

re ableiten. Um die Wellenfunktion im gesamten Raum zu bestimmen, gehen wir an der zweiten Barriere ebenso vor wie an der ersten und berücksichtigen dort wieder die Anschlußbedingungen für ψ und ψ' .

Der Einfachheit halber legen wir die Potentialbarriere symmetrisch um den Ursprung, zwischen $x = -a$ und a , siehe Abb. 3.6:

$$V(x) = V_0 \theta(a - |x|). \quad (3.3.165)$$

O.B.d.A. betrachten wir wieder eine von links einfallende Welle. Für Energien $E < V_0$ gilt für die Wellenzahlen in den Bereichen I bis III, in Analogie zur einfachen Potentialstufe:

$$k_I = k_{III} \equiv k, \quad -ik_{II} = \kappa_{II} = \kappa. \quad (3.3.166)$$

Die Wellenfunktion setzen wir nun allgemein jeweils als Superposition ebener Wellen bzw. abfallender/ansteigender Funktionen zu beiden Vorzeichen an. Da die Potentialbarriere endliche Ausdehnung hat, sind positive wie negative κ zulässig,

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \theta(-a - x) [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] \\ & + \theta(a - |x|) [Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}] \\ & + \theta(x - a) [Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}]. \end{aligned} \quad (3.3.167)$$

Die Anschlussbedingungen für ψ und ψ' bei $x = \pm a$ liefern 4 Gleichungen für 6 Unbekannte, welche es erlauben, z.B. A, B, C, D durch F, G auszudrücken. Beispielsweise ergibt sich nach Elimination von C und D (s. z.B. F. Schwabl, Quantenmechanik, Kap. 3.3 [1]), dass

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (3.3.168)$$

mit

$$\alpha = \left(\cosh(2\kappa a) + \frac{i}{2} \epsilon \sinh(2\kappa a) \right) e^{2ika}, \quad (3.3.169)$$

$$\beta = \frac{i}{2} \eta \sinh(2\kappa a), \quad (3.3.170)$$

$$\text{worin} \quad \epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}. \quad (3.3.171)$$

Nun betrachten wir den Spezialfall eines von links einlaufenden Teilchens. Hierfür ist $G = 0$, siehe

3. Eindimensionale Probleme

Abb. 3.6, und man erhält

$$A = \alpha F, \quad B = \beta^* F. \quad (3.3.172)$$

Aus dieser Lösung ergibt sich die

Definition 3.7. *Transmissionsamplitude:*

$$S(E) = \frac{F}{A} = \alpha^{-1} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\kappa a) + i(\epsilon/2) \sinh(2\kappa a)} \quad (3.3.173)$$

und hieraus den

Definition 3.8. *Durchlässigkeitskoeffizient:*

$$|S(E)|^2 = \left[1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right) \sinh^2(2\kappa a) \right]^{-1} \\ \triangleq \text{Transmissions-Wahrscheinlichkeit} \quad (3.3.174)$$

Wir untersuchen nun den Durchlässigkeitskoeffizienten, d.h. die Transmissionsamplitude:

$$|S(E)|^2 \cong \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right)^{-1} 4e^{-4\kappa a} = \frac{16(\kappa k)^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a} \\ = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-4\sqrt{2m(V_0-E)}a/\hbar} \\ = \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0-E)} + \ln \left[16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \right] \right\}. \quad (3.3.175)$$

Vernachlässigt man den logarithmischen Term, welcher im Vergleich zum Exponentialfaktor nur schwach in E/V_0 abfällt, erhält man

$$|S(E)|^2 \simeq \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0-E)} \right\}. \quad (3.3.176)$$

Während ein klassisches Teilchen für $V_0 > E$ an der Barriere reflektiert würde, bleibt im quantenmechanischen Fall für $\kappa a < \infty$ eine endliche Durchgangswahrscheinlichkeit. Dies bezeichnet man als den **Tunneleffekt**.

Beispiele für das Vorkommen des Tunneleffekts sind:

- Beim α -Zerfall von Kernen tunneln α -Teilchen, bestehend aus zwei Protonen und zwei Neutronen, der Form nach also Helium-4-Kerne, aus dem Verband eines größeren Kerns heraus. Dieser radioaktive Zerfall geschieht mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit, welche durch die Halbwertszeit des instabilen Kerns festgelegt ist und läßt sich als Tunnelprozess innerhalb der durch die Kern- und elektromagnetischen Kräfte verursachten Kräfte und somit Potentiale beschreiben.
- Elektronen können durch Anlegen eines elektrostatischen Potentials (Feldemission) oder aufgrund hoher Temperaturen aus einem Festkörper, etwa einem Metall entweichen. Bei niedrigen Temperaturen wird die Emission allein durch den Tunneleffekt möglich bleiben (Kalte Emission). Der Tunneleffekt bei der kalten Emission wird z.B. bei der Rastertunnelmikroskopie ausgenutzt.

Die Riemann-Zerlegung erlaubt die Verallgemeinerung des obigen Ansatzes und so können wir auch kontinuierliche Potentialberge beschreiben. Für den Grenzfall hoher Barrieren gilt dann im Rahmen der WKB-Näherung (siehe Abschnitt 7.4), dass

$$|S(E)|^2 = \exp \left\{ -2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} \right\}. \quad (3.3.177)$$

3.4. Potentialtopf

Abschließend besprechen wir noch den Potentialtopf, in gewissem Sinne die inverse Potentialbarriere, welcher an vielen Stellen der Quantenphysik, von fundamentalen Zusammenhängen zu technischen Anwendungen eine wesentliche Rolle spielt. Beispielsweise lassen sich die Potentiale, in denen Nukleonen der Kerne zusammengehalten sind, näherungsweise als Potentialtöpfe beschreiben (Kernschalenmodell). Niederenergie-Potentialstreuung kann man näherungsweise mittels einfacher Potentialtöpfe erfassen (s. Kapitel 8), und moderne Quantengasexperimente realisieren Fallenpotentiale, welche in guter Näherung durch einen Potentialtopf zu charakterisieren sind.

O.B.d.A. können wir den Potentialtopf endlicher Tiefe wieder um den Ursprung zentriert definieren,

$$V(x) = -V_0 \theta(a - |x|), \quad V_0 > 0 \quad (3.4.178)$$

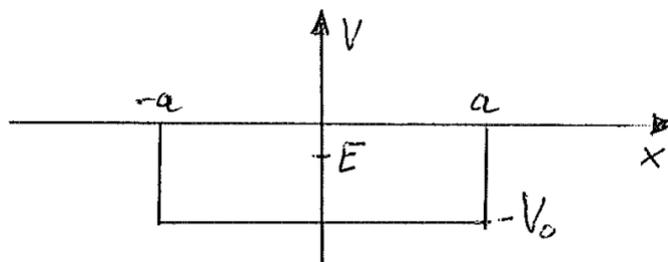


Abbildung 3.7.: Potentialtopf

Wie zuvor können wir die Lösungen der Schrödingergleichung hinsichtlich der Lage der Eigenenergie des Hamiltonoperators relativ zur Höhe des Potentials einteilen, d.h. gebundene Zustände ($-V_0 < E < 0$) und Streuzustände ($E > 0$) unterscheiden.

3.4.1. Gebundene Zustände des Potentialtopfs

Wir betrachten zunächst die gebundenen Zustände des Potentialtopfs, für die die Energie hinreichend groß ist, um Anregungen innerhalb des Topfs zu ermöglichen, diese jedoch außerhalb des Topfs exponentiell abfallen, d.h. $-V_0 \leq E < 0$. Für $|x| > a$ hat die Schrödinger Gleichung also die Lösungen

$$\psi(x) = e^{\mp \kappa x}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}. \quad (3.4.179)$$

3. Eindimensionale Probleme

Aus Gründen der Normierbarkeit für $x \rightarrow \pm\infty$ kommt jeweils nur die abfallende Lösung $\psi(x) = e^{-\kappa|x|}$ in Frage. Wegen der Spiegelsymmetrie $P: x \rightarrow -x$ von $V(x)$ ist es sinnvoll zwischen P -symmetrischen und P -antisymmetrischen Lösungen zu unterscheiden:

$$\psi^{(+)}(x) = \theta(a - |x|) A \cos(kx) + \theta(|x| - a) B e^{-\kappa|x|}, \quad (3.4.180)$$

$$\psi^{(-)}(x) = \theta(a - |x|) A \sin(kx) + \theta(|x| - a) \operatorname{sgn}(x) B e^{-\kappa|x|}, \quad (3.4.181)$$

$$\text{mit } k = \sqrt{2m(E + V_0)}, \quad (3.4.182)$$

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} +1 & x \geq 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases}. \quad (3.4.183)$$

Aus den Anschlussbedingungen für ψ, ψ' bei $x = \pm a$ erhalten wir die Form der entsprechenden Lösungen: (Übungen)

(i) **Gerade Funktion** $\psi^{(+)}$:

$$\tan(ka) = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\left(\frac{\zeta}{ka}\right)^2 - 1}, \quad (3.4.184)$$

$$\text{worin } \zeta = \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar}. \quad (3.4.185)$$

Aus $-V_0 \leq E \leq 0$ folgt, dass die Wellenzahl einer oberen Schranke unterworfen ist:

$$0 \leq ka \leq \zeta. \quad (3.4.186)$$

Die Lösung lässt sich graphisch bestimmen. Für die Anzahl der Schnittpunkte und somit der geraden Lösungen gilt:

$$n_b^{(+)} = \left[\frac{\zeta}{\pi} \right], \quad (3.4.187)$$

wobei $[\alpha]$ die nächst-größere natürliche Zahl zu α ist. Damit gibt es mindestens einen gebundenen P -geraden Zustand, dessen Energie sich für $V_0 \rightarrow 0$ wie

$$E_0 \cong -\frac{2ma^2V_0^2}{\hbar^2}$$

der Schwelle des Topfes annähert.

(ii) **Ungerade Funktion** $\psi^{(-)}$:

$$-\cot(ka) = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\left(\frac{\zeta}{ka}\right)^2 - 1}. \quad (3.4.188)$$

Auch hierfür lässt sich wieder eine graphische Lösung finden. Im Bereich

$$\frac{\pi}{2} (2n_b^{(-)} - 1) < \zeta < \frac{\pi}{2} (2n_b^{(-)} + 1) \quad (3.4.189)$$

hat (3.4.188) genau $n_b^{(-)}$ Lösungen. Erst für

$$\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2} \quad (3.4.190)$$

gibt es ungerade Lösungen mit $n_b^{(-)}$ Knoten.

3. Eindimensionale Probleme

3.4.2. Grenzfall des unendlich tiefen Potentialtopfs

Wir betrachten den Grenzfall, dass der Topf unendlich tief wird, was gleichbedeutend ist mit unendlich hohen Wänden, so dass in der Region außerhalb des Topfs die Wellenfunktion exakt gleich Null sein muss. Dies können wir durch entsprechende Grenzbetrachtung der bisherigen Resultate herleiten, für

$$V_0 \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \zeta \rightarrow \infty. \quad (3.4.191)$$

Wir erhalten damit aus den Lösungen der transzendenten Gleichungen (3.4.184) und (3.4.188), dass ka alle möglichen Werte annehmen kann, für die die jeweiligen linken Seiten dieser Gleichungen divergieren, $\tan(ka) \rightarrow \infty$, $\cot(ka) \rightarrow \infty$. Aus diesen Bedingungen können wir für die möglichen Energie-Eigenzustände im Potentialtopf gerade und ungerade Funktionen unterscheiden:

$$\varphi_q^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \theta(a - |x|) \cos(qx), \quad \text{mit } qa = (s + 1/2)\pi, \quad s \in \mathbb{N}_0, \quad (3.4.192)$$

$$\varphi_q^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \theta(a - |x|) \sin(qx), \quad \text{mit } qa = s\pi, \quad s \in \mathbb{N}. \quad (3.4.193)$$

Diese Lösungen lassen sich in einer allgemeinen Form zusammenfassen,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \theta(a - |x|) \sin[(x + a)k_n], \quad \text{mit } k_n = (n + 1) \frac{\pi}{2a}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.4.194)$$

Deren Eigenenergie resultiert als

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n + 1)^2}{8ma^2}. \quad (3.4.195)$$

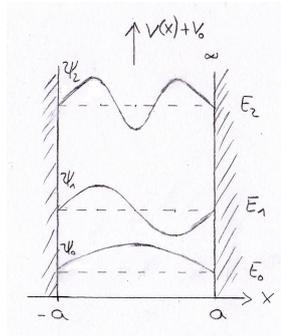


Abbildung 3.8.: Unendlich tiefer Potentialtopf

Die Lösung der Schrödingergleichung für den unendlich tiefen Potentialtopf erscheint in der Regel einfach: Innerhalb des Topfs verschwindet das Potential, und als Lösungen kommen alle ebenen Wellen in Frage. Durch die unendlich hohen Wände wird das Eindringen der Wellenfunktionen unterbunden, woraus folgt, dass die Wellenfunktion außerhalb gleich Null sein muss. Damit sind erste und zweite Ableitungen außerhalb ebenso gleich Null. Sorgt man nun bei den innerhalb zur Verfügung stehenden ebenen Wellen dafür, dass die Dirichlet-Randbedingung für die Wellenfunktion erfüllt ist und diese damit stetig in ihren Wert außerhalb übergeht, so ergibt sich daraus bereits das vollständige Energiespektrum. Die entsprechenden Lösungen sind – bis auf eine konstante Phase – alle Sinus- bzw. Cosinus-Wellen mit Knoten am Rand, mit Wellenzahlen wie in (3.4.194) gegeben. Die Stetigkeitsbedingung für die erste Ableitung wird hingegen irrelevant, obwohl sie nicht mehr erfüllt ist, da die Ableitung an der Wand innerhalb

der Box stets ungleich Null ist. Die zweite Ableitung ist zwar aufgrund der Form der Lösung am Rand innerhalb wie außerhalb gleich Null, für $|x| \rightarrow a$, $|x| < a$ und $|x| > a$, strenggenommen verbleibt jedoch am Rand ein Sprung in der ersten Ableitung, dessen "Höhe" aus dem Wert der Ableitung innerhalb des Topfes und damit letztlich aus Wellenzahl und Normierung folgt. Diesem Sprung entspricht dann eine Singularität der zweiten Ableitung am Rand, die jedoch gemäß der oben ausgeführten Diskussion des Grenzfalles $V_0 \rightarrow \infty$, $\psi_n(a) \rightarrow 0$ nicht auftritt solange V_0 endlich ist und daher keine Rolle spielt!

Es sei an dieser Stelle an die Tatsache erinnert, dass die stetigen Funktionen auf einem endlichen Intervall, mit Skalarprodukt, keinen Hilbertraum, lediglich einen Prähilbertraum bilden, da es in ihnen konvergente Cauchy-Folgen gibt, welche gegen nicht-stetige Funktionen konvergieren. Dies gilt hier für die erste Ableitung der Wellenfunktion auf einem Intervall, welches die beiden Stufen des endlich tiefen Potentialtopfs einschließen. Geht man asymptotisch zum unendlich tiefen Topf über, so sind die Energie-Eigenfunktionen und ihre Ableitungen stetig, solange der Limes nicht erreicht ist. Die Ableitung $\psi_n(x)$ weist am Rand einen Knick auf, und die Funktion nähert sich mit $V_0 \rightarrow \infty$ einer Heaviside-Stufenfunktion.

3.4.3. Streuzustände und Resonanzen

Zum Abschluss wollen wir uns noch mit den Streuzuständen des Potentialtopfs beschäftigen, welche für $E > 0$, also Energien oberhalb der Schwelle existieren, bei denen das Teilchen sich, im Gegensatz zu den Bindungszuständen, auch außerhalb des Topfs aufhalten kann. Die entsprechenden Lösungen der Schrödingergleichung erhält man leicht aus den Zuständen der in Abschnitt 3.3 diskutierten Potentialbarriere, indem man $V_0 \rightarrow -V_0$ ersetzt:

- Im Außenraum, $|x| > a$, lauten die möglichen Wellenzahlen

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \in \mathbb{R}, \quad (3.4.196)$$

- während im Innern des Potentialtopfs, $|x| < a$, noch die Tiefe V_0 des Potentials hinzukommt,

$$q = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \in \mathbb{R}. \quad (3.4.197)$$

Im Vergleich zur Potentialbarriere ersetzen wir hier $\kappa \rightarrow \kappa = iq$.

Wir wählen nun wieder o.B.d.A. als Ansatz eine von links einfallende ebene Welle, so dass in der zuvor verwendeten Notation der Koeffizient $G = 0$ ist. Unter Zuhilfenahme der Relationen

$$\cosh(iqa) = \cos(qa), \quad \sinh(iqa) = i \sin(qa) \quad (3.4.198)$$

finden wir damit die Transmissionsamplitude

$$\Rightarrow S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2qa) - \frac{i}{2}\epsilon \sin(2qa)}, \quad (3.4.199)$$

$$\text{mit} \quad \epsilon = \frac{q}{k} + \frac{k}{q}, \quad (3.4.200)$$

3. Eindimensionale Probleme

welche dem Transmissionskoeffizienten

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\epsilon^2 - 1) \sin^2(2qa)} \quad (3.4.201)$$

$$\text{mit } \epsilon^2 - 1 = \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 = \frac{V_0^2}{E(E + V_0)} \quad (3.4.202)$$

entspricht. Wir diskutieren im folgenden die mathematischen Eigenschaften und physikalische Bedeutung dieser Lösung.

(i) Analytische Eigenschaften der Transmissionswahrscheinlichkeit $|S(E)|^2$

Da $\epsilon^2 - 1 > 0$ für $V_0 > 0$ und $\sin^2(2qa) \geq 0$, ergibt sie der Wertebereich von S zu

$$0 \leq |S(E)|^2 \leq 1. \quad (3.4.203)$$

Insbesondere erfolgt keine Streuung,

$$|S(E)|^2 = 1 \quad \text{wenn } 2qa = n\pi, \quad (3.4.204)$$

und in diesen Fällen ist die Energie der Lösung

$$E = E_R^{(n)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2} - V_0 \quad (3.4.205)$$

worin $n \in \mathbb{N}$ und $n > \left[8ma^2 V_0\right]^{1/2} / (\hbar\pi)$, so dass die notwendige Bedingung $E_R^{(n)} \geq 0$ für die hier betrachteten Streuzustände erfüllt ist. Für die diskreten Werte $q = n\pi/(2a)$ liegt demnach ein Transmissionsmaximum vor, d.h. V ist vollkommen durchlässig. Zwischen diesen Maxima findet man Transmissionsminima, ungefähr bei den Wellenzahlen $q = (n + \frac{1}{2})\pi/(2a)$ (s. Abb. ??).

Anmerkungen:

- Die Energien der Transmissionsmaxima fallen mit denen, (3.4.195), des unendlich tiefen Potentialtopfs zusammen.
- Für $\zeta = \sqrt{2mV_0}a/\hbar \gg 1$, $E \ll V_0$, ergeben sich gut ausgeprägte Transmissions-**Resonanzen**, d.h., je größer ζ (tiefer/breiter der Potentialtopf) ist, desto schärfer sind die Resonanz-Peaks ausgeprägt.

(ii) Eigenschaften von $S(E)$ in der komplexen Energieebene

Die komplexe Transmissionsamplitude (3.4.199) weist bei $\{q(E), k(E)\}$, an denen der Nenner von $S(E)$ verschwindet und S somit divergiert:

$$\cos(2qa) = \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right) \sin(2qa) \quad (3.4.206)$$

Mit $\cot(2x) = (\cot x - \tan x) / 2$ folgt:

$$\underbrace{\cot(qa)}_f - \underbrace{\tan(qa)}_{f^{-1}} = \underbrace{\frac{ik}{q}}_g - \underbrace{\frac{q}{ik}}_{g^{-1}}, \quad (3.4.207)$$

$$\Rightarrow f - f^{-1} = g - g^{-1}. \quad (3.4.208)$$

Dies entspricht einer quadratischen Gleichung in f oder g , mit den Lösungen $f = g$ bzw. $f = -g^{-1}$, so dass

$$\tan(qa) = -i \frac{k}{q}, \quad \text{oder} \quad \cot(qa) = i \frac{k}{q}. \quad (3.4.209)$$

In den Lösungen dieser Gleichungen erkennen wir für negative Energien E die zuvor diskutierten Bindungszustände des Potentialtopfs wieder, während für $E > 0$ sowie Energien unter dem Bodenniveau des Topfs keine Lösungen reeller Energie existieren:

(a) $E < -V_0$:

$$k \in i\mathbb{R}, \quad q \in i\mathbb{R}. \quad (3.4.210)$$

\Rightarrow Da der Sinus eines imaginären Arguments imaginär ist, sind keine Lösungen der Gleichungen (3.4.209) möglich.

(b) $-V_0 \leq E < 0$ (Bindungszustände):

$$\Rightarrow k = i \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = ik \in i\mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R}. \quad (3.4.211)$$

Die Eindring-Konstante κ und Wellenzahl q lösen die Gleichungen (3.4.209) und entsprechen den geraden/ungeraden Bindungszuständen im Potentialtopf (siehe Abschnitt 3.4.1).

(c) $E > 0$:

$$k \in \mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R}. \quad (3.4.212)$$

\Rightarrow In diesem Energiebereich sind ebenfalls keine Lösungen von (3.4.209), mit Energien $E \in \mathbb{R}$ möglich.

Diskussion der Pole

zu (b): Wir erinnern uns:

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{\text{Amplitude der nach rechts auslaufenden Welle}}{\text{Amplitude der von links einlaufenden Welle}}. \quad (3.4.213)$$

Wegen $E < 0$ muss $A = 0$ sein, da sonst ψ für $x \rightarrow -\infty$ ins unendliche anwachsen würde. F und die Amplitude B der links auslaufenden Welle sind jedoch endlich wegen des exponentiell abfallenden Verhaltens $\psi(|x| \rightarrow \infty) \sim e^{-\kappa|x|}$. Daher muss für die Bindungsenergien $S(E_b) \rightarrow \infty$ divergieren. Dies ist an den Polen bei $E = E_b < 0$ gegeben.

zu (c): Nun wollen wir $S(E)$ bei den Resonanzen ($E \cong E_R$) betrachten und schreiben dazu (3.4.199) als

$$S(E) e^{2ika} = \frac{1}{\cos(2qa)} \frac{1}{1 - \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa)}. \quad (3.4.214)$$

3. Eindimensionale Probleme

Wir erinnern uns, dass die Resonanzen mit Energie E_R bei den Wellenzahlen $2qa = n\pi$ auftreten. Daraus folgt, dass

$$\cos(2qa) \Big|_{E_R} = (-1)^n, \quad \tan(2qa) \Big|_{E_R} = 0. \quad (3.4.215)$$

Wir Taylor-entwickeln den Term, der die Position der Resonanzen festlegt, um $E = E_R$, in erster Ordnung in der Abweichung $E - E_R$:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) = \frac{2}{\Gamma} (E - E_R) + \dots, \quad (3.4.216)$$

$$\text{mit } \frac{2}{\Gamma} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \frac{d(2qa)}{dE} \right]_{E=E_R} \quad (3.4.217)$$

Einsetzen von $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ ergibt:

$$\frac{2}{\Gamma} = \frac{\sqrt{2ma}}{2\hbar} \frac{2E_R + V_0}{\sqrt{E_R}(E_R + V_0)}, \quad (3.4.218)$$

und für einen tiefen Potentialtopf ($V_0 \gg E_R$) erhalten wir, dass

$$\frac{2}{\Gamma} \approx \frac{\sqrt{2mV_0}a}{2\hbar} \frac{1}{\sqrt{V_0E_R}} = \frac{a}{v_R\hbar} = \frac{\zeta}{2\sqrt{V_0E_R}} \quad (3.4.219)$$

mit der klassischen Einfallsgeschwindigkeit $v_R = \sqrt{2E_R/m}$ entsprechend der Resonanzenergie E_R . Wir erhalten damit die Transmissionsamplitude in der genäherten Form

$$S(E) e^{2ika} \approx (-1)^n \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2} \quad (3.4.220)$$

in der Umgebung der Resonanzen bei $E = E_R$. Daraus folgt, dass $S(E)$ Pole in der komplexen Ebene bei

$$E \approx E_R - i\frac{\Gamma}{2} \quad (3.4.221)$$

aufweist, vgl. Abb. 3.9. In der Nähe dieser Pole gilt:

Transmissionswahrscheinlichkeit \approx Lorentz- bzw. Breit-Wigner-Funktion:

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (3.4.222)$$

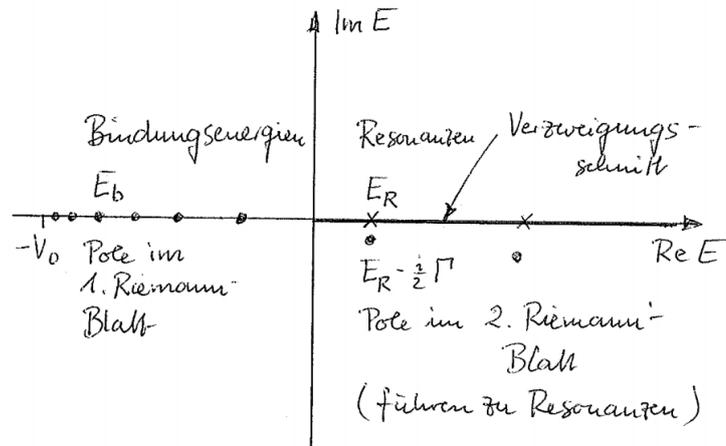


Abbildung 3.9.: Pole von $S(E)$ in der komplexen Energieebene: Die Position der Pole bei $E = E_b < 0$ im 1. Blatt entsprechen den Bindungsenergien. Die Pole bei $E = E_R - i\Gamma/2$ im 2. Blatt entsprechen Resonanzen bei $E = E_R$. Die Breite einer Resonanz bei E_R wird durch $\Gamma = \Gamma(E_R)$ bestimmt.

Anmerkungen:

- Drückt man $S(E)$ mittels einer reellen Amplitude und einem Phasenwinkel aus,

$$S(E) = |S(E)| e^{i(\delta(E) - 2ka)},$$

mit $\tan(\delta(E)) = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) \cong \frac{2}{\Gamma} (E - E_R)$ (3.4.223)

in Resonanznähe, so findet man die Phasenverschiebung

$$\delta(E) = \arctan \left[\frac{2}{\Gamma} (E - E_R) \right] \quad (3.4.224)$$

zwischen transmittierter und einlaufender Welle:

3. Eindimensionale Probleme

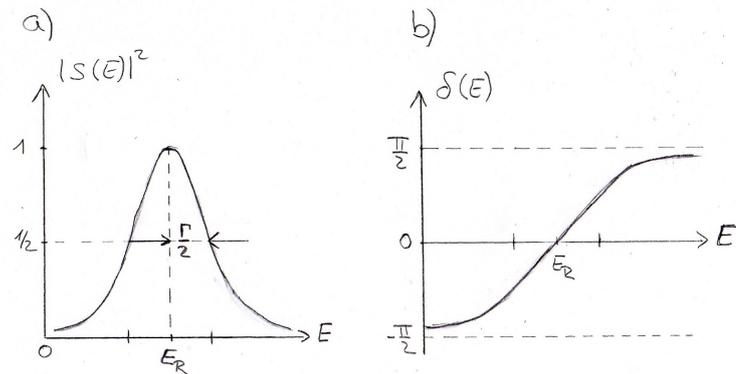


Abbildung 3.10.: a) Breit-Wigner-Funktion, b) Phasenverschiebung

Dies entspricht einem charakteristischen Resonanzverhalten eines gedämpften Oszillators, wie es bereits aus der Mechanik und der Elektrodynamik bekannt ist.

- Für $\zeta \gg 1$, $|E_R| \ll V_0$ kann $\Gamma \ll E_R$ werden, was zu scharfen Resonanzen führt.
- Der Verzweigungsschnitt von \sqrt{E} ist hier willkürlich auf die positive $\text{Re}(E)$ -Achse gelegt.

$$\Rightarrow \sqrt{E} = |E|^{1/2}, \quad \sqrt{E}e^{2\pi i} = -|E|^{1/2}. \quad (3.4.225)$$

Damit liegen die Resonanzpole bei $E_R - i\Gamma/2$ im 2. Blatt, denn für sie soll im Limes $\Gamma \rightarrow 0$ gelten:

$$\sqrt{E_R - i\Gamma/2} \rightarrow +|E_R|^{1/2}. \quad (3.4.226)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

Wir nähern uns im nun folgenden Kapitel dem, historisch gesehen, ersten Höhepunkt der Quantenmechanik: Der Beschreibung der Eigenschaften des Wasserstoffatoms, insbesondere der Besonderheiten des Energiespektrums sowie dessen Modifikation in einem äußeren elektromagnetischen Feld. Hierfür werden wir die Schrödingergleichung erstmals in mehr als einer Raumdimension lösen müssen, und zwar für einen Fall, in dem ein einfacher Produktansatz $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{i=1,\dots,d} \psi_i(x_i)$ nicht mehr hinreicht. Letzteres wäre z.B. dann möglich, wenn gar kein Potential vorliegt und wir einfach ein freies Teilchen betrachten. Aber auch in jedem Potential, welches die Bewegung in den d Koordinaten unabhängig voneinander definiert, ist die Produktlösung möglich, so dass sich das Problem auf ein eindimensionales reduziert. Als Beispiel sei ein/e Potentialtopf/barriere der Form $V(\mathbf{x}) = V_0 \prod_{i=1,\dots,d} v(x_i)$, mit $v(x_i) = \theta(x_i - a_i)\theta(b_i - x_i)$, $a_i < b_i$ genannt.

Das Wasserstoffatom, und mit ihm auch alle anderen Atome, führen nun jenseits solcher in den kartesischen Komponenten unabhängig lösbarer Schrödingerprobleme. Wir wollen hier nur den ersten Schritt in der Beschreibung der Atome unternehmen und die Bewegung zunächst eines einzelnen Elektrons um den Kern beschreiben. Im H-Atom besteht dieser aus einem elementaren Proton, welches wir im einfachsten Fall durch das von diesem erzeugte Coulombpotential beschreiben werden. Dieses Potential, $V(\mathbf{r}) \propto 1/|\mathbf{r}|$, mischt aufgrund seiner sphärischen Symmetrie die drei Komponenten in einer nichttrivialen Weise. Diese Rotationssymmetrie werden wir jedoch gleichzeitig nutzen können, um die Energie-Eigenfunktionen in geeigneter Form, nämlich wiederum durch einen vereinfachenden Produktansatz schreiben zu können.

Um uns die hierzu notwendigen mathematischen Werkzeuge etwas vertraut zu machen, beginnt dieses Kapitel mit einer Diskussion der Symmetrieeigenschaften und der daraus folgenden Operatoralgebra von Generatoren der verschiedenen möglichen Rotationen. Wie bei den kontinuierlichen Translationen in Orts- und Impulsraum sind die Rotationen Elemente einer Lie-Gruppe, mit zugehöriger Lie-Algebra von Generatoren. Da die hierfür nötige Darstellungstheorie der Transformationen und Generatoren von weitreichender Bedeutung nicht nur in der Quanten- und Elementarteilchenphysik sind, sind die ersten Abschnitte der Lie-Theorie gewidmet, bevor auf deren Grundlage die Eigenzustände des Drehimpulses in einer Weise eingeführt werden, welche sich als sehr ähnlich zur algebraischen Behandlung des harmonischen Oszillators herausstellen wird.

4.1. Rotationen im \mathbb{R}^3 : Lie-Gruppe und Lie-Algebra

Ein rotationsinvariantes Potential wie das Coulomb-Potential, $V(\mathbf{r}) \equiv V(|\mathbf{r}|) \propto 1/|\mathbf{r}|$, erlaubt Zustände, welche entweder invariant unter Drehungen sind oder sich durch diese ineinander überführen lassen. Im folgenden diskutieren wir zunächst die für deren Bestimmung notwendige Formulierung der Drehungen als Operationen auf Zuständen.

Zur Erinnerung: Unser bisheriges Programm zur Definition von Observablen beruhte auf der Identifikation:

$$\text{Observable} \quad \leftrightarrow \quad \text{Generator einer Transformation,} \quad (4.1.1)$$

$$\text{Impuls } \hat{\mathbf{p}} \quad \leftrightarrow \quad \text{Translationen } \hat{T} = \exp(-i \Delta \mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar), \quad (4.1.2)$$

$$\text{Energie } H \quad \leftrightarrow \quad \text{Zeitentwicklung } \hat{U} = \exp(-i \Delta t \hat{H}/\hbar). \quad (4.1.3)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

In entsprechender Weise können wir den *Drehimpulsoperator* als Generator von Rotationen im \mathbb{R}^3 charakterisieren. Wir beginnen mit einem Exkurs über Rotationen im \mathbb{R}^3 , anhand derer wir die wichtigen Begriffe der Lie-Gruppe und Lie-Algebra kennenlernen.

4.1.1. Die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$ der Drehungen als Lie-Gruppe

Rotationen im Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 lassen sich als reelle 3×3 -Matrizen R darstellen, welche auf Vektoren $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ wirken,

$$R: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3: \mathbf{v} \mapsto R\mathbf{v}, \quad (4.1.4)$$

worin R eine d -dimensionale orthogonale Matrix, $RR^T = \mathbb{1} = R^T R$, ist, so dass $\det R = 1$. Die Rotationen R bilden eine *Gruppe* bzgl. der Multiplikation, die Spezielle Orthogonale Gruppe $SO(3)$:

$$SO(3) = \{R \in \mathbb{R}^{3,3} : RR^T = \mathbb{1}, \text{ mit } \det R = 1\}. \quad (4.1.5)$$

In dreidimensionaler Matrixdarstellung lauten die Elemente der $SO(3)$:

$$R_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad R_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.1.6)$$

Diese beschreiben aktive Drehungen um den Winkel ϕ um die jeweiligen Koordinatenachsen, welche unter den Drehungen somit invariant bleiben. Eine allgemeine Drehung läßt sich durch 3 Parameter festlegen, denn $R^T R = \mathbb{1}$ ergibt 6 Bedingungen für 9 Matrixelemente. Die beiden gängigen Parametrisierungen von Drehungen im \mathbb{R}^3 sind:

- Hintereinanderausführungen von Drehungen um zwei Achsen um die drei Euler-Winkel,

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\gamma)R_y(\beta)R_x(\alpha), \quad \text{mit } 0 \leq \alpha, \beta, \gamma < 2\pi; \quad (4.1.7)$$

- Eine einzelne Drehung um den Winkel α um eine beliebige festgelegte Achse $\mathbf{n} = \alpha/\alpha$. Da die Drehung um \mathbf{n} um den Winkel α und die Drehung um $-\mathbf{n}$ um den Winkel $2\pi - \alpha$ identisch sind, können wir α auf das Intervall $0 \leq \alpha \leq \pi$ einschränken, müssen aber beachten, dass für $\alpha = \pi$ die Drehungen um \mathbf{n} und $-\mathbf{n}$ identisch sind.

Bemerkung: Da die Gruppe $SO(3)$ *kontinuierlich* von 3 reellen Parametern abhängt, fungiert sie als Beispiel für eine *Lie-Gruppe*:

Definition 4.1. Eine *Lie-Gruppe* ist eine Gruppe mit der Struktur einer glatten Mannigfaltigkeit, d.h. dass die differenzierbare Struktur mit den Gruppeneigenschaften verträglich ist.

Was bedeutet diese Definition? Zunächst einmal ist eine Mannigfaltigkeit für unsere Zwecke ein glatter Raum, der lokal aussieht wie \mathbb{R}^n . Genauer gesagt gibt es eine stetige Abbildung vom \mathbb{R}^n in die Mannigfaltigkeit. Diese muss nicht global definiert sein. Lokal, also in offenen Umgebungen eines jeden Punktes, liefert sie jedoch eine stetige Abbildung zwischen dem \mathbb{R}^n und der Mannigfaltigkeit. Für eine glatte, d.h. unendlich oft differenzierbare Mannigfaltigkeit ist diese Abbildung differenzierbar – dies bezeichnet

man als eine differenzierbare Struktur.¹ Wir haben also einen Parameterbereich als eine Teilmenge von \mathbb{R}^n vorliegen, sowie eine Abbildung von diesem Parameterbereich auf die Mannigfaltigkeit. Im Falle einer Lie-Gruppe ordnet diese Abbildung einem Element β des Parameterbereichs ein Gruppenelement zu. Konkret bedeutet dies:

Definierende Eigenschaften einer **Lie-Gruppe** G : Sei $g_\beta \in G$ das Gruppenelement zu Parameter β . Dann ist

$$g_{\beta_1} g_{\beta_2} = g_{\beta_3} \in G, \quad (4.1.8)$$

mit einer glatten, d.h., unendlich oft differenzierbaren Funktion

$$\beta_3 = f(\beta_1, \beta_2). \quad (4.1.9)$$

Die glatte Funktion $f(\beta_1, \beta_2)$ muss nun verträglich sein mit

- dem Assoziativgesetz,

$$\begin{aligned} (g_{\beta_1} g_{\beta_2}) g_{\beta_3} &= g_{\beta_1} (g_{\beta_2} g_{\beta_3}), \\ g_{f(\beta_1, \beta_2)} g_{\beta_3} &= g_{\beta_1} g_{f(\beta_2, \beta_3)}, \\ \Rightarrow f(f(\beta_1, \beta_2), \beta_3) &= f(\beta_1, f(\beta_2, \beta_3)); \end{aligned} \quad (4.1.10)$$
- der Existenz der Eins: Wenn $\beta = 0$ dem Element $g_{\beta=0} = \mathbb{1}$ entspricht, ist

$$f(\beta, 0) = f(0, \beta) = \beta; \quad (4.1.11)$$
- der Existenz des Inversen:

$$\forall \beta \exists \beta^l : \quad (g_\beta)^{-1} =: g_{\beta^l}, \quad \text{mit} \quad f(\beta^l, \beta) = 0. \quad (4.1.12)$$

Beachte:

- Rotationen um verschiedene Achsen kommutieren nicht, z.B. ist

$$R_x(\alpha) R_y(\beta) \neq R_y(\beta) R_x(\alpha). \quad (4.1.13)$$

Deshalb ist $SO(3)$ eine **nicht-abelsche** Lie-Gruppe.

- Rotationen um eine feste Achse \mathbf{n} bilden eine abelsche, *ein-parametrische Untergruppe*, gegeben durch Drehungen

$$R_{\mathbf{n}}(\phi) \quad \text{mit} \quad R_{\mathbf{n}}(\phi_1) R_{\mathbf{n}}(\phi_2) = R_{\mathbf{n}}(\phi_1 + \phi_2). \quad (4.1.14)$$

4.1.2. Von der Lie-Gruppe zur Lie-Algebra

Die grundlegende Idee der Theorie der Lie-Gruppen besteht im Studium der Gruppeneigenschaften anhand des Konzepts der infinitesimalen Gruppenelemente. Aufgrund der Glattheit der Gruppenmannigfal-

¹Ein einfaches Beispiel einer Mannigfaltigkeit ist die Kugeloberfläche S^2 in \mathbb{R}^3 . Lokal, also in der Umgebung eines jeden Punktes, sieht S^2 aus wie \mathbb{R}^2 . Eine explizite Abbildung vom \mathbb{R}^2 auf S^2 ist durch die Kugelkoordinaten $(\theta, \varphi) \rightarrow (\sin \theta \sin \varphi, \sin \theta \cos \varphi, \cos \theta)^T$ gegeben. Der notwendige Parameterbereich ist $[0, \pi] \times [0, 2\pi)$, aber es gibt immer einen Punkt, hier den Südpol, der durch diese Abbildung nicht stetig erreicht wird. Insofern ist die Abbildung nicht global definiert.

4. Bewegung im Zentralpotential

tigkeit, und damit der Abbildung f , können wir den Limes betrachten:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} g_\beta = \mathbb{1}. \quad (4.1.15)$$

Dies erlaubt die Definition infinitesimaler Transformationen um die $\mathbb{1}$ im Sinne einer Taylorentwicklung. Anstelle einer formalen Definition betrachten wir gleich das Beispiel der $SO(3)$. Eine Rotationsmatrix, z.B. $R_x(\alpha)$, können wir in Potenzen von α entwickeln. Für allgemeine $R \in SO(3)$ erhält man so eine Entwicklung

$$R = \mathbb{1} + \Omega + \dots, \quad (4.1.16)$$

wobei $R^T R = \mathbb{1}$ erfordert, dass $\Omega^T = -\Omega$. In der Physik wählt man die infinitesimalen Rotationen vorzugsweise hermitesch durch Einfügen der imaginären Einheit i . Für infinitesimale Rotationen um die i -Achse, $i \in \{x, y, z\}$ schreibt man

$$R_j = \mathbb{1} - i\delta\phi_j F_j, \quad j = x, y, z \quad (4.1.17)$$

mit den hermiteschen Generatormatrizen $F_i = F_i^\dagger$,

$$F_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad F_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.18)$$

Die infinitesimalen Gruppenelemente sind aufgrund der folgenden Beobachtung von Interesse: *Alle* Gruppenelemente, die kontinuierlich mit der $\mathbb{1}$ verbunden sind, werden durch Hintereinanderausführung infinitesimaler Transformationen erreicht.² Für die $SO(3)$ heißt das:

$$R_i(\phi_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i \frac{\phi_i}{N} F_i \right)^N = e^{-i\phi_i F_i}. \quad (4.1.19)$$

Endliche Rotationen um eine feste Achse \mathbf{n} lassen sich also schreiben als

$$R_{\mathbf{n}}(\phi) = \exp(-i\phi \mathbf{n} \mathbf{F}) \equiv \exp(-i\phi[n_x F_x + n_y F_y + n_z F_z]). \quad (4.1.20)$$

Die F_i bezeichnet man als *Erzeugende* der $SO(3)$. Die Hintereinanderausführung der Gruppenmultiplikation für infinitesimale Transformationen entspricht in erster Ordnung dem Skalarprodukt des Vektors der Erzeugenden mit dem Vektor der entsprechenden Winkel,

$$R_i(\delta\alpha)R_j(\delta\beta) = (\mathbb{1} - i\delta\alpha F_i)(\mathbb{1} - i\delta\beta F_j) \quad (4.1.21)$$

$$= \mathbb{1} - i(\delta\alpha F_i + \delta\beta F_j) + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (4.1.22)$$

Das bedeutet, dass die Erzeugenden F_i einen Vektorraum \mathfrak{g} bezüglich der Addition bilden. Die nicht-abelsche Struktur der Gruppe wird erst in zweiter Ordnung sichtbar und ist durch den nicht-verschwindenden Kommutator zweier Erzeugender definiert. Führt man zwei Rotationen um zwei unterschiedliche Achsen nacheinander aus und dreht dann in der entgegengesetzten Reihenfolge wieder zurück, so ergibt sich bis in zweiter Ordnung:

$$R_i(\delta\alpha)R_j(\delta\beta) \left[R_j(\delta\beta)R_i(\delta\alpha) \right]^{-1} = \mathbb{1} - \delta\alpha \delta\beta [F_i, F_j] + \mathcal{O}(\delta\phi^3). \quad (4.1.23)$$

²Im allgemeinen muss die Lie-Gruppe keine zusammenhängende Mannigfaltigkeit darstellen. Wenn dies nicht der Fall ist, ist nur die Komponente, in der die $\mathbb{1}$ liegt, kontinuierlich mit dieser verbunden. Ein Beispiel einer nicht zusammenhängenden Gruppenmannigfaltigkeit ist die orthogonale Gruppe $O(3)$ mit den beiden Komponenten $\det O = 1$ und $\det O = -1$, entsprechend positiver bzw. negativer Parität, d.h., Drehungen mit und ohne Einschluß einer Punktspiegelung.

4.1. Rotationen im \mathbb{R}^3 : Lie-Gruppe und Lie-Algebra

Wie man sich leicht überlegen kann und auch die Gruppenstruktur der $SO(2)$ besagt, führt das Ergebnis dieser Hintereinanderausführung von (infinitesimalen) Drehungen wieder auf eine (infinitesimale) Drehung, welche sich durch die Erzeugenden der $SO(2)$ darstellen lassen muss. Hier ist der infinitesimale Winkel der resultierenden Nettodrehung offenbar $\delta\alpha\delta\beta$, und somit muß der Kommutator der beiden Erzeugenden wieder eine Erzeugende sein, in unserer Definition multipliziert mit i . Diese Bedingung ist konsistent damit, dass der Kommutator, multipliziert mit i , hermitesch ist, was für das Produkt zweier unterschiedlicher Erzeugenden $F, F' \in \mathfrak{g}$, $F \neq F'$, selbst nicht der Fall ist,

$$(i[F, F'])^\dagger = i[F, F'], \quad \text{aber} \quad (FF')^\dagger \neq (FF'). \quad (4.1.24)$$

Der Kommutator $[\cdot, \cdot]$ stellt deshalb eine Abbildung vom Vektorraum der Erzeugenden in den Vektorraum der Erzeugenden dar. Die Erzeugenden der Lie-Gruppe G bilden eine sogenannte *Lie-Algebra* \mathfrak{g} bzgl. der Verknüpfung $i[\cdot, \cdot]$.

Definition 4.2. Eine *Lie-Algebra* \mathfrak{g} ist ein Vektorraum mit einer bilinearen Verknüpfung

$$\circ : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}, \quad (4.1.25)$$

mit den Eigenschaften

- $A \circ B = -B \circ A$ (antivertauschend),
- $A \circ (B \circ C) + B \circ (C \circ A) + C \circ (A \circ B) = 0$ (Jacobi-Identität).

Tatsächlich erfüllt der Kommutator $i[\cdot, \cdot]$ diese Eigenschaften der definierenden Verknüpfung der Elemente einer Lie-Algebra, hier der Generatoren F_i . Er definiert die sogen. *Lie-Klammer* der Lie-Algebra. Für $\mathfrak{so}(3)$, die Lie-Algebra der Lie-Gruppe $SO(3)$, findet man explizit

$$[F_x, F_y] = iF_z, \quad \text{oder} \quad [F_i, F_j] = i\epsilon_{ijk}F_k, \quad (4.1.26)$$

wobei ϵ_{ijk} der total antisymmetrische Tensor ist mit $\epsilon_{123} = 1$, $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$, $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{jki}$. Konkret ist eine endlich-dimensionale Lie-Algebra durch Definition der obigen Abbildung 'o' auf einer Basis des Vektorraums definiert:

Definition 4.3. Eine endlich-dimensionale Lie-Algebra \mathfrak{g} ist definiert durch die Verknüpfung ('Lie-Klammer')

$$x_A \circ x_B = f_{AB}^C x_C, \quad (4.1.27)$$

auf einer Basis $\{x_a\}$, $a = 1, \dots, N$, des N -dimensionalen Vektorraums \mathfrak{g} .

f_{AB}^C heißen die **Strukturkonstanten** der Lie-Algebra.

Sie spiegeln die definierenden Eigenschaften der Verknüpfung \circ wieder:

- $f_{AB}^C = -f_{BA}^C$ (antivertauschend),
- $f_{AB}^D f_{CD}^E + f_{CA}^D f_{BD}^E + f_{BC}^D f_{AD}^E = 0$ (Jacobi-Identität).

Bemerkung: Für $\mathfrak{g} = \mathfrak{so}(3)$, die Lie-Algebra der Lie-Gruppe $SO(3)$, finden wir:

$$i[F_i, F_j] = -\epsilon_{ijk}F_k, \quad (4.1.28)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

oder, wie es üblicherweise geschrieben wird: $[F_i, F_j] = i\epsilon_{ijk}F_k$. Die Strukturkonstanten der $\mathfrak{so}(3)$ sind also die Elemente des total antisymmetrischen Tensors,

$$f_{jk}^i = -\epsilon_{ijk}. \quad (4.1.29)$$

4.2. Von der Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ zum Drehimpulsoperator

Bislang haben wir uns mit Rotationen als Elementen einer abstrakten (Lie-)Gruppe befasst. Zu einer Rotation $R \in \text{SO}(3)$ wollen wir nun den entsprechenden Rotations-Operator $\mathcal{D}(R)$ finden, der auf einem quantenmechanischen Zustand die Drehung R realisiert, also den Operator finden

$$R: |\alpha\rangle \rightarrow |R\alpha\rangle = \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle \quad (4.2.30)$$

Die Frage nach der *konkreten* Realisierung von $\mathcal{D}(R)$ stellen wir an dieser Stelle ausdrücklich hinten.

Beispiel: Ortseigenzustand: Man könnte etwa $\mathcal{D}(R)$ als den Operator definieren, der den Ortseigenzustand $|\mathbf{x}\rangle$ auf den Zustand $|R\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$ abbildet, mit $\mathbf{x}' = R\mathbf{x}$, wobei R hier die kanonische Darstellung mittels Drehmatrizen auf dem \mathbb{R}^3 bezeichnet.

Wir werden im folgenden weitere, allgemeinere Darstellungen $\mathcal{D}(R)$ des Drehoperators R kennenlernen. Unabhängig von der konkreten solchen Darstellung stellen wir die minimale Forderung, dass für $R_3 = R_1R_2$ auch $\mathcal{D}(R_3) = \mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)$ gelten soll.

Da die im folgenden zu besprechenden Zusammenhänge uns noch oft in der Physik begegnen werden, halten wir kurz inne, um uns zu vergegenwärtigen, was konzeptionell geschieht:

Konzept der Darstellungen einer Gruppe bzw. Algebra

- Gegeben sei eine abstrakte Gruppe G von Transformationen – hier die Lie-Gruppe $\text{SO}(3)$.
- Gegeben sei ein abstrakter Vektorraum V – hier der Hilbertraum der qm. Zustände $|\alpha\rangle$.

Zu jedem $g \in G$ – hier $R \in \text{SO}(3)$ – definieren wir einen linearen Operator

$$\mathcal{D}(g): V \rightarrow V, \quad (4.2.31)$$

der die Gruppe G auf V realisiert und verträglich mit der Gruppenstruktur ist:

$$\mathcal{D}(g_1 \circ g_2) = \mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2). \quad (4.2.32)$$

Insbesondere muss $\mathcal{D}(g)$ invertierbar sein, und es gilt, dass

$$\mathcal{D}(g^{-1}) = \mathcal{D}(g)^{-1}. \quad (4.2.33)$$

Definition 4.4. Ein $\mathcal{D}(g): V \rightarrow V$ mit obigen Eigenschaften heißt Darstellung von G , der Vektorraum V ist der Darstellungsraum.

Beispiel: Drehungen

- Die Drehmatrizen R_i , s. Gl. (4.1.6), bilden eine Darstellung der $\text{SO}(3)$ auf dem \mathbb{R}^3
- Die Generatormatrizen F_i , s. Gl. (4.1.18), bilden eine Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ auf dem \mathbb{R}^3 .

4.2. Von der Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ zum Drehimpulsoperator

Das Konzept der Darstellung ist in der gesamten modernen Physik von universeller und nicht zu unterschätzender Bedeutung:

(Lie-) Gruppe G	\leftrightarrow	Abstraktes Konzept/ "Idee" einer (kontinuierlichen) Operation
Darstellung $\mathcal{D}(g)$	\leftrightarrow	konkrete Realisierung auf physikalischem Raum

Die Frage, welche Darstellungen für eine gegebene Gruppe G möglich sind, beantwortet die mathematische Disziplin der *Darstellungstheorie*. Sie klassifiziert die möglichen Darstellungen einer Gruppe bzw. Algebra und damit die möglichen Realisierungen in der Physik. Deren faktische Existenz muss jedoch empirisch nachgewiesen werden (so z.B. in der Elementarteilchenphysik: Symmetrien erlauben es, Elementarteilchen zu postulieren, als Zustände, welche unter bestimmten Darstellungen der entsprechenden Symmetriegruppe invariant sind).

Kehren wir zurück zum Drehoperator. In der Quantenmechanik fordern wir Normerhalt unter Drehungen, d.h., die Darstellung ist unitär,

$$\mathcal{D}(R)^\dagger = \mathcal{D}(R)^{-1} : \quad \text{unitäre Darstellung.} \quad (4.2.34)$$

Tatsächlich gilt das mathematische

Theorem: Jede irreduzible³ Darstellung einer kompakten⁴ Lie-Gruppe kann unitär gewählt werden.

Ähnlich wie für die abstrakte Lie-Gruppe selbst, ist es nützlich, zunächst die Darstellung infinitesimaler Gruppenelemente in einer Taylorentwicklung zu betrachten. Angewendet auf die Drehgruppe suchen wir deshalb zunächst $\mathcal{D}(R)$ für eine infinitesimale Rotation um Achse \mathbf{n} und Winkel $\delta\phi$ und entwickeln

$$R_{\mathbf{n}}(\delta\phi) = \mathbb{1} - i\delta\phi \mathbf{G} \mathbf{n}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}^\dagger = \mathbf{G}. \quad (4.2.35)$$

Klassisch erzeugt der Drehimpuls Drehungen, so dass wir für den *Rotationsoperator*, welcher einen quantenmechanischen *Zustandsvektor* transformiert, genauso wie bei Orts- und Impulsraum-Translationen, die Äquivalenz

$$\hat{\mathbf{J}} = \hbar \mathbf{G} \quad (4.2.36)$$

zwischen dem Drehimpulsoperator und dem Generator der Drehungen postulieren. Da der Drehimpuls die Einheit einer Wirkung aufweist, $[xp] = \text{kg m}^2\text{s}^{-1} = \text{Nms}$, liefert die, experimentell zu überprüfende, Konstante \hbar wiederum den Proportionalitätsfaktor. Diese infinitesimale Drehung lautet dann

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{J}}, \quad (4.2.37)$$

bzw., für endliche Drehungen:

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-i\phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{J}}/\hbar}. \quad (4.2.38)$$

Die zentrale Einsicht ist, dass wegen der Darstellungseigenschaften die infinitesimalen Darstellungsoperatoren die Kommutatorrelationen der zugrundeliegenden Lie-Algebra erfüllen. In unserem Fall also er-

³Der Begriff der Irreduzibilität wird noch an Beispielen erläutert werden.

⁴Hier: abgeschlossene und beschränkte Menge der Winkel.

4. Bewegung im Zentralpotential

füllt \hat{J}_i die Kommutatorrelationen der Algebra $\mathfrak{so}(3)$,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k. \quad (4.2.39)$$

Unterscheide dabei

- die abstrakten Gruppenelemente: $R = e^{-i\phi\mathbf{F}}$, mit $[F_i, F_j] = i\epsilon_{ijk}F_k$ und die
- Darstellung $\mathcal{D}(R) = e^{-i\phi\hat{\mathbf{J}}/\hbar}$, mit $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$.

Wir werden also zunächst Darstellungen der Lie-Algebra suchen. Bis auf interessante Aspekte der globalen Struktur, welche wir noch behandeln werden, sind diese Grundlagen bereits ausreichend, um auch die Darstellungen der Lie-Gruppe zu bestimmen.

Wir betonen abschließend nochmals, dass die Kommutatorrelationen der Drehimpulsoperatoren allgemein aus dem Zusammenhang von Drehimpuls und Rotationen folgen, unabhängig von der konkreten Realisierung des Drehimpulsoperators – d.h. unabhängig von der expliziten *Darstellung*. Wie schon erwähnt ist im einfachsten Fall der einzige Effekt der Drehung die Rotation $|\mathbf{x}\rangle \rightarrow |\mathbf{x}'\rangle$. Der dazugehörige Drehimpuls heißt *Bahndrehimpuls* $\hat{\mathbf{L}}$.

Lie-Struktur des Bahndrehimpulses

Analog zur klassischen Physik, in der der Drehimpuls durch den Axialvektor $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ gegeben ist, gilt quantenmechanisch:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (4.2.40)$$

Die kartesischen Komponenten lauten demnach $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k$, und so findet man aus dem Kommutator von Orts- und Impulsoperator, $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$, leicht, dass $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$, der Bahndrehimpuls also die Lie-Klammer (4.2.39) der Drehimpuls-Algebra erfüllt.

$\hat{\mathbf{L}}$ ist eine mögliche Darstellung der Drehimpulsalgebra $\mathfrak{so}(3)$. Als eine weitere werden wir später den *Spin* kennenlernen. Unabhängig von der konkreten physikalischen Bedeutung von \hat{J}_i , beschreibe er den Bahndrehimpuls oder einen allgemeineren Spin, gilt für die Gruppe $SO(3)$ stets, dass der entsprechende Satz von Darstellungen der drei Erzeugenden die Lie-Klammer Strukturkonstanten gemäß (4.2.39) aufweist. Diese genügen bereits für eine Klassifizierung der Eigenzustände und Eigenwerte des Drehimpulses. Hierin erkennen wir eine enge Parallele zum harmonischen Oszillator, dessen Energieeigenzustände sich algebraisch aus der Lie-Klammer, $[a, a^\dagger] = 1$, $[a, 1] = [a^\dagger, 1] = 0$, der Heisenberg-Algebra konstruieren ließen, welche die Erzeugenden der Translationen in Orts- und Impulsraum sowie der $U(1)$ -Phasenrotationen verknüpfen.

4.3. Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses

Unabhängig von der konkreten Realisierung der Operatoren \hat{J}_i als Bahndrehimpuls oder allgemeinerer Spin, wollen wir nun alle möglichen Darstellungen der Drehgruppe, speziell ihrer Lie-Algebra, klassifizieren. Hierzu suchen wir die möglichen Eigenwerte und -zustände der Operatoren \hat{J}_i mit Vertauschungsrelationen gemäß Gl. (4.2.39). Da $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$, können die \hat{J}_i nicht gleichzeitig diagonalisiert werden. Betrachten wir nun allerdings den Gesamtdrehimpuls im Quadrat, $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, so stellen wir fest, dass dieser mit seinen Komponenten kommutiert:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (4.3.41)$$

4.3. Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses

Beweis (im Folgenden wird der Hut auf \hat{J}_i für bessere Lesbarkeit weggelassen):

$$\begin{aligned} [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_x, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y = 0. \end{aligned} \quad (4.3.42)$$

Wegen der Zyklizität der Strukturkonstanten folgt selbiges für die übrigen Kommutatoren. Die Tatsache, dass \mathbf{J}^2 und J_3 kommutieren bedeutet insbesondere, dass sie kompatible Observable darstellen, also gemeinsam "diagonalisiert" werden können, d.h., wir können eine gemeinsame Eigenbasis von \mathbf{J}^2 und J_z finden:

$$\begin{aligned} J^2 |a, b\rangle &= a |a, b\rangle, \\ J_z |a, b\rangle &= b |a, b\rangle. \end{aligned} \quad (4.3.43)$$

Um die möglichen Werte für a, b zu bestimmen, definieren wir die Operatoren

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y, \quad \text{mit} \quad J_+^\dagger = J_- . \quad (4.3.44)$$

Aus der Definition folgen die

Kommutatorrelationen der Operatoren J_\pm, J_z, \mathbf{J}^2 :

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad (4.3.45)$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, \quad (4.3.46)$$

$$[\mathbf{J}^2, J_\pm] = 0. \quad (4.3.47)$$

Wir erkennen, dass (4.3.46) analog zum Kommutator der Leiteroperatoren mit dem Anzahloperator des harmonischen Oszillator ist,

$$[N, a] = -a \quad \text{und} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad (4.3.48)$$

J_z aus dieser Sicht also analog zum Anzahloperator ist und J_\pm die Rolle der Auf- und Absteigeoperatoren einnehmen. Diese Interpretation läßt sich wie beim harmonischen Oszillator für die Eigenwerte b bestätigen:

$$J_z J_\pm |a, b\rangle = ([J_z, J_\pm] + J_\pm J_z) |a, b\rangle = (\pm\hbar + b) J_\pm |a, b\rangle. \quad (4.3.49)$$

J_+ erhöht demnach den Eigenwert b von J_z um \hbar , während J_- den Eigenwert um \hbar erniedrigt. Aus (4.3.47) folgt andererseits, dass J_\pm den Eigenwert a von \mathbf{J}^2 nicht beeinflussen:

$$\mathbf{J}^2 J_\pm |a, b\rangle = J_\pm \mathbf{J}^2 |a, b\rangle = a J_\pm |a, b\rangle. \quad (4.3.50)$$

Insgesamt gilt also:

$$J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle, \quad J_- |a, b\rangle = c_- |a, b - \hbar\rangle. \quad (4.3.51)$$

Um die möglichen Werte von a und b zu bestimmen, gehen wir ähnlich vor wie beim harmonischen Oszillator. Zunächst schreiben wir

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2. \quad (4.3.52)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

Der Operator $\mathbf{J}^2 - J_z^2$ ist demnach positiv-semidefinit, denn $\forall |\psi\rangle$:

$$\langle \psi | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | J_+ J_- + J_- J_+ | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\|J_- |\psi\rangle\|^2 + \|J_+ |\psi\rangle\|^2) \geq 0. \quad (4.3.53)$$

Also gilt für die Eigenzustände:

$$\langle a, b | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | a, b \rangle = (a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle \geq 0, \quad (4.3.54)$$

woraus wir, mit der Forderung, dass die Zustände eine nichtverschwindende Norm haben, wiederum folgern können, dass

$$a \geq b^2 \quad (4.3.55)$$

ist. Da jedoch $J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle$, muss es einen Wert b_{\max} geben so dass $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$. Andernfalls würde b durch wiederholte Anwendung von J_+ beliebig groß werden und damit $b^2 \leq a$ verletzen können. Damit gilt auch: $J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$. Das Produkt $J_\mp J_\pm$ lässt sich leicht berechnen:

$$J_\mp J_\pm = (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 \pm i(J_y J_x - J_x J_y) = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z. \quad (4.3.56)$$

Daraus folgern wir:

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle &= 0, \\ \Rightarrow (a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max}) |a, b_{\max}\rangle &= 0, \\ \Rightarrow a &= b_{\max}(b_{\max} + \hbar). \end{aligned} \quad (4.3.57)$$

Analog muss es einen Wert b_{\min} geben, so dass

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0. \quad (4.3.58)$$

Daraus folgt wieder analog, dass

$$\begin{aligned} 0 = J_+ J_- |a, b_{\min}\rangle &= (\mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |a, b_{\min}\rangle \\ &= (a - b_{\min}^2 + \hbar b_{\min}) |a, b_{\min}\rangle, \\ \Rightarrow a &= b_{\min}(b_{\min} - \hbar). \end{aligned} \quad (4.3.59)$$

Aus der Kombination von (4.3.57) und (4.3.59) finden wir, dass

$$b_{\max} = -b_{\min}, \quad \text{mit } b_{\max} \geq 0, \quad (4.3.60)$$

und somit, dass der Wertebereich der Eigenwerte b nach unten und oben durch Werte gleichen Betrags beschränkt ist:

$$b_{\max} \geq b \geq -b_{\max}. \quad (4.3.61)$$

Die möglichen Werte von b ergeben sich nun wie beim harmonischen Oszillator aus den Leiteroperatoren. Wir beginnen mit dem Zustand $|a, b_{\max}\rangle$. Soeben fanden wir, dass es einen Wert $n \in \mathbb{N}$ geben muss, so dass $J_-^{n+1} |a, b_{\max}\rangle = 0$, damit $a \geq b^2$ nicht verletzt ist. Hieraus folgt:

$$J_-^n |a, b_{\max}\rangle = c |a, b_0\rangle, \quad \text{mit } J_-^n |a, b_0\rangle = 0. \quad (4.3.62)$$

4.3. Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses

Da daraus wie oben gezeigt folgt, dass $a = b_0(b_0 - \hbar)$, muss $b_0 = b_{\min}$ oder $b_0 = \hbar - b_{\min}$ gelten. Da weiterhin $b_0 = -b_{\max} < 0$ gilt, bleibt nur $b_0 = b_{\min}$. Weiterhin ergibt sich daraus, dass

$$\begin{aligned} b_{\max} - n\hbar &= b_{\min} = -b_{\max}, \\ b_{\max} &= \frac{1}{2}n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (4.3.63)$$

Wir führen nun eine neue Notation ein und definieren $j = n/2$. In dieser Notation finden wir:

$$a = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{und} \quad b = \hbar m, \quad (4.3.64)$$

wobei $m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\}$.

Bemerkung: Es gilt, dass entweder

$$j \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow m \in \mathbb{Z}, \quad \text{oder} \quad j \in \frac{2\mathbb{N}_0 + 1}{2} \Rightarrow m \in \frac{2\mathbb{Z} + 1}{2}. \quad (4.3.65)$$

Wir haben damit alle möglichen gemeinsamen Eigenzustände $|j, m\rangle$ von \mathbf{J}^2 und J_z gefunden:

Gemeinsame Eigenzustände von \mathbf{J}^2 und J_z

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad (4.3.66)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \quad (4.3.67)$$

mit $m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\}$ und $j \in \mathbb{Z}$ oder $j \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}$.

Es verbleibt die Frage der Normierung und Orthogonalität der Zustände $|j, m\rangle$ zu unterschiedlichen j und m , von denen wir erwarten dass sie $\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$ erfüllen. Hierzu müssen wir insbesondere die Koeffizienten c_{jm}^\pm bestimmen, welche in den Leiteroperator-Relationen $J_\pm |j, m\rangle = c_{jm}^\pm |j, m \pm 1\rangle$ auftauchen.

Analog zum harmonischen Oszillator finden wir aus der Forderung der Normierung, dass

$$\begin{aligned} \|J_\pm |j, m\rangle\|^2 &= |c_{jm}^\pm|^2 \langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = |c_{jm}^\pm|^2 \\ &= \langle j, m | J_\pm^\dagger J_\pm |j, m\rangle = \langle j, m | J_\mp J_\pm |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (4.3.68)$$

Verwenden wir nun wiederum $J_\mp J_\pm = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z$, so können wir die Gleichungskette (4.3.68) wie folgt fortsetzen:

$$|c_{jm}^\pm|^2 = \langle j, m | \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z |j, m\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)]. \quad (4.3.69)$$

Damit haben wir die i.allg. komplexen Konstanten c_{jm}^\pm bis auf einen freien Phasenwinkel ϕ_{jm}^\pm in $c_{jm}^\pm = |c_{jm}^\pm| \exp\{i\phi_{jm}^\pm\}$ bestimmt, welchen wir identisch Null wählen:

$$|c_{jm}^\pm|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \mp 1)] = \hbar^2 [(j \mp m)(j \pm m + 1)]. \quad (4.3.70)$$

Zusammengefasst gilt also

4. Bewegung im Zentralpotential

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle. \quad (4.3.71)$$

Abschließende Bemerkungen:

- Die $(2j+1)$ Zustände $|j, m\rangle$, für gegebenes $j \geq 0$ sind zueinander orthogonal. Ebenso sind Zustände verschiedener j orthogonal, $\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$. Dies folgt direkt aus der Hermitizität von \mathbf{J}^2 und J_z .

- Die $(2j + 1)$ orthonormierten Zustände $|j, m\rangle$ mit $m \in \{-j, \dots, j\}$ bilden einen Untervektorraum des Gesamt-Hilbertraums, den Darstellungsraum von $\hat{\mathbf{J}}$, oder auch die " $(2j + 1)$ -dimensionale Darstellung". Drehungen führen aus diesem Unterraum nicht heraus, denn

$$\mathbf{J}^2 \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = j(j + 1) \mathcal{D}(R) |j, m\rangle. \quad (4.3.72)$$

- $\{|j, m\rangle\}$ besitzt keine invarianten Unterräume unter Drehungen $\mathcal{D}(R)$. Man nennt Darstellungen mit dieser Eigenschaft *irreduzibel*. Der Darstellungsraum läßt sich nicht als direkte Summe mehrerer invarianter Darstellungen schreiben.

- In die Klassifikation ging lediglich die Lie-Klammer (4.2.39) ein. Wir haben somit alle Darstellungen der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ charakterisiert. Die Frage nach den entsprechenden Darstellungen der Lie-Gruppe $SO(3)$ werden wir später stellen.

Mathematische Zusatzbemerkungen: Der Operator $\hat{\mathbf{J}}^2$ ist der sogen. *Casimir-Operator* der Drehgruppe $SO(3)$. Der Casimir Operator ist stets ein ausgezeichnetes Element des *Zentrums* der universellen einhüllenden Algebra einer Lie-Algebra, welche formal durch das *Poincaré-Birkhoff-Witt-Theorem* definiert ist. Für eine gegebene Lie-Algebra \mathfrak{g} , z.B. der Matrixdarstellungen einer Dimension, mit Strukturkonstanten f_{ijk} , besteht die universelle einhüllende Algebra $U(\mathfrak{g})$ die assoziative Algebra aus allen Elementen x_1, x_2, \dots , welche der Relation $x_i x_j - x_j x_i = f_{ijk} x_k$ und sonst keiner genügen, d.h., die Lie-Klammer wirkt hier als Kommutator. Das Poincaré-Birkhoff-Witt-Theorem macht dann eine Aussage über die Basiselemente der $U(\mathfrak{g})$ als Produkte der Potenzen der Elemente x_i .

Das *Zentrum* $\mathfrak{z}(\mathfrak{g})$ einer Lie-Algebra \mathfrak{g} besteht aus den Elementen, welche mit allen Elementen der Algebra kommutieren,

$$\mathfrak{z}(\mathfrak{g}) = \{x \in \mathfrak{g} \mid [x, s] = 0 \ \forall s \in \mathfrak{g}\}. \quad (4.3.73)$$

Der *Casimir-Operator* gehört definitionsgemäß zum Zentrum der Algebra, kommutiert also, wie oben für $\hat{\mathbf{J}}^2$ gezeigt, mit allen Elementen \hat{J}_k der Lie-Algebra. Die Lie-Gruppe $SO(3)$ ist vom Rang 1, so dass sie genau einen solchen Casimir-Operator besitzt. Der *Rang* einer Lie-Gruppe (bzw. der zugehörigen Lie-Algebra) ist die Dimension der zugehörigen *Cartan-Unteralgebra* $\mathfrak{c}(\mathfrak{g})$. Eine Unteralgebra $\mathfrak{c} \in \mathfrak{g}$ ist eine *Cartan-Unteralgebra*, wenn sie *nilpotent* und *selbstnormalisierend* ist, d.h., wenn für ein $n \in \mathbb{N}$

$$[X_1, [X_2, [\dots [X_n, Y] \dots]]] = 0, \quad \forall X_1, X_2, \dots, X_n, Y \in \mathfrak{c}. \quad (\text{nilpotent}) \quad (4.3.74)$$

$$\forall Y \notin \mathfrak{c} \ \exists X \in \mathfrak{c} : [X, Y] \notin \mathfrak{c}. \quad (\text{selbstnormalisierend}) \quad (4.3.75)$$

Die Selbstnormalisierungseigenschaft kann man auch schreiben als $\mathfrak{c} = N_{\mathfrak{g}}(\mathfrak{c}) = \{x \in \mathfrak{g} : [x, \mathfrak{c}] \in \mathfrak{c} \ \forall \mathfrak{c} \in \mathfrak{c}\}$. Beispielsweise bilden alle oberen Diagonalmatrizen sowie alle Diagonalmatrizen eine Cartan-Unteralgebra der Algebra der $n \times n$ Matrizen mit reellen Einträgen. In der $SO(3)$ bilden die Diagonalmatrizen die eindimensionale Cartan-Unteralgebra.

Für unitäre, irreduzible Darstellungen $\mathcal{D}^{(j)}$ der $SO(3)$ sind die Eigenwerte der Casimir-Invarianten diskret und reell und charakterisieren die jeweilige $2j + 1$ -dimensionale Darstellung, speziell gilt

$$\mathcal{D}^{(j)}(\hat{\mathbf{J}}^2) = -j(j+1)\mathbb{1}_{2j+1}, \quad (4.3.76)$$

d.h., der Casimir-Operator wird durch eine Einheitsmatrix multipliziert z.B. mit -2 für die 3-dimensionale Darstellung im Unterraum $j = 1$. Da diese Einheitsmatrix mit allen anderen Elementen der Lie-Algebra-Darstellung kommutiert, liegt sie klarerweise in der Cartan-Subalgebra.

In quantenmechanischen Systemen mit $SO(3)$ und auch anderen $SU(N)$ Symmetrien spielen die Leiteroperatoren J^{\pm} eine wesentliche Rolle. Sie werden aus den Elementen gebildet, welche nicht in der Cartan-Subalgebra liegen, und erlauben es, Abbildungen zwischen Zuständen verschiedener Drehimpuls-Eigenwerte zu realisieren, ohne dass diese die Eigenwerte der Casimir-Operatoren ändern, da der Casimir zum Zentrum der Lie-Algebra gehört. Im einfachen Fall der $SO(3)$ heißt dies, dass ein Leiteroperator J^{\pm} die Magnetquantenzahl m erhöht bzw. erniedrigt, aber j invariant läßt.

4.4. Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Wiederum analog zum harmonischen Oszillator bestimmen wir für die Klärung der Eindeutigkeit der Drehimpulseigenzustände deren Darstellungen im Ortsraum, welche wir überdies für die Lösung der Schrödingergleichung in Zentralkoordinaten benötigen werden. Wir bestimmen hierfür zunächst die Ortsraumdarstellung des Bahndrehimpulsoperators $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$,

$$\langle \mathbf{x} | L_i | \alpha \rangle = L_i \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle = (L_i \psi_{\alpha})(\mathbf{x}) \quad (4.4.77)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

welche direkt aus den Darstellungen von Orts- und Impulsoperator folgt,

$$L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x). \quad (4.4.78)$$

Nach Übergang zu sphärischen Koordinaten,

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta, \quad (4.4.79)$$

findet man

$$\begin{aligned} \partial_\phi &= \frac{\partial x}{\partial \phi} \partial_x + \frac{\partial y}{\partial \phi} \partial_y + \frac{\partial z}{\partial \phi} \partial_z \\ &= -r \sin \theta \sin \phi \partial_x + r \sin \theta \cos \phi \partial_y \\ &= -y \partial_x + x \partial_y \\ &= \frac{i}{\hbar} L_z. \end{aligned} \quad (4.4.80)$$

Damit lautet die

Sphärische Darstellung der Drehimpulskomponenten:

$$L_x = -i\hbar(-\sin \phi \partial_\theta - \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (4.4.81)$$

$$L_y = -i\hbar(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi), \quad (4.4.82)$$

$$L_z = -i\hbar \partial_\phi. \quad (4.4.83)$$

und des Drehimpuls-Quadrats

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) \right]. \quad (4.4.84)$$

Wir suchen nun die Eigenfunktionen $\langle \mathbf{x} | l, m \rangle$ zu $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$ in der obigen Darstellung. Da L_i unabhängig von r ist, genügt eine Darstellung in den *Kugelkoordinaten* θ und ϕ , den sogenannten

Kugelflächenfunktionen:

$$Y_l^m(\theta, \phi) := \langle \theta, \phi | l, m \rangle. \quad (4.4.85)$$

Aus $L_z | l, m \rangle = \hbar m | l, m \rangle$ und $\mathbf{L}^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l+1) | l, m \rangle$ folgen die Differentialgleichungen

$$[\partial_\phi - im] Y_l^m(\theta, \phi) = 0, \quad (4.4.86)$$

$$\left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + l(l+1) \right] Y_l^m(\theta, \phi) = 0. \quad (4.4.87)$$

Diese lassen sich mittels *Separationsansatz* lösen:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \Phi_m(\phi) \chi_{lm}(\theta). \quad (4.4.88)$$

Aus (4.4.86) ergibt sich:

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (4.4.89)$$

Eingesetzt in (4.4.87) ergibt dies

$$\left[\frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1) \right] \chi_{lm}(\theta) = 0. \quad (4.4.90)$$

Bevor wir die Lösung von χ_{lm} bestimmen, halten wir folgende wichtige Eigenschaft fest: Unter einer räumlichen Drehung um 2π muss der Eigenzustand $|\mathbf{x}\rangle = |r, \theta, \phi\rangle$ invariant sein. Das bedeutet

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \quad \Rightarrow \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (4.4.91)$$

in Übereinstimmung mit den allgemein algebraisch bestimmten Eigenwerten (4.3.65) von J_z/\hbar für geradzählige j . Für den Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ spielen die Darstellungen mit $l \in \mathbb{Z} + 1/2$ also keine Rolle.

Wir lösen nun Gl. (4.4.90) mittels der Variablensubstitution

$$\xi = \cos\theta, \quad \Rightarrow \quad \partial_\theta = -\sin\theta \partial_\xi, \quad (4.4.92)$$

und der Ersetzung

$$\chi_{lm}(\theta) \rightarrow P_{lm}(\xi). \quad (4.4.93)$$

Damit erhalten wir die

Allgemeine Legendresche Differentialgleichung

$$\left[\frac{d}{d\xi} (1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} + l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] P_{lm}(\xi) = 0. \quad (4.4.94)$$

Lösungen dieser gewöhnlichen Differentialgleichung existieren im Intervall $[-1, 1]$ nur dann, wenn l und m ganzzahlig sind, mit $0 \leq m \leq l$. Dies sind die

Assoziierten (zugeordneten) Legendrepolynome

$$P_{lm}(\xi) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \xi^2)^{m/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^{l+m} (\xi^2 - 1)^l, \quad m \geq 0, \quad (4.4.95)$$

welche sich mittels

$$P_{lm}(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^m P_l(\xi), \quad (4.4.96)$$

aus den **Legendre Polynomen**,

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^l (\xi^2 - 1)^l, \quad (4.4.97)$$

ableiten lassen.

4. Bewegung im Zentralpotential

Eigenschaften der (assozierten) Legendre-Polynome

- Die $P_l(\xi)$ sind Polynome l -ten Grades in ξ , und daher sind die $P_{lm}(\xi)$ $(l-m)$ -ten Grades in $\xi = \cos \theta$, multipliziert mit $(\sqrt{1-\xi^2})^m = (\sin \theta)^m$. Sie besitzen $(l-m)$ Nullstellen in $-1 < \xi < 1$.
- Es gelten die folgenden Rekursionsrelationen für P_l :

$$(l+1)P_{l+1} = (2l+1)\xi P_l - lP_{l-1}, \quad (4.4.98)$$

$$(1-\xi^2)dP_l/d\xi = l(P_{l-1} - \xi P_l). \quad (4.4.99)$$

- Die niedrigsten Legendre Polynome lauten:

$$P_0 = 1, \quad P_1 = \xi, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1), \quad P_3 = \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi), \quad \dots \quad (4.4.100)$$

- Die assoziierten Legendre Polynome weisen folgende Paritäts-Symmetrieeigenschaft auf:

$$P_{lm}(-\xi) = (-1)^{l+m} P_{lm}(\xi). \quad (4.4.101)$$

- Außerdem gilt:

$$P_{l0} = P_l, \quad P_{ll} = \frac{(2l-1)!!}{\equiv (2l-1)(2l-3)\dots 1} (1-\xi^2)^{l/2} \quad (4.4.102)$$

- Für die assoziierten Legendre-Polynome gelten im Intervall $\xi \in [-1, 1]$ zwei Orthogonalitätsrelationen:

$$\int_{-1}^1 d\xi P_{lm}(\xi) P_{l'm}(\xi) = \delta_{ll'} \frac{2}{\underbrace{2l+1}_{=: |N_\chi|^{-2}}} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad m \geq 0, \quad (4.4.103)$$

$$\int_{-1}^1 \frac{d\xi}{1-\xi^2} P_{lm}(\xi) P_{l'm'}(\xi) = \delta_{mm'} \frac{1}{m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad m > 0. \quad (4.4.104)$$

Kombination der Gleichungen (4.4.88), (4.4.89), (4.4.92) und (4.4.93) ergibt die Gesamtlösung ausgedrückt in den

Kugelflächenfunktionen:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} N_{lm} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (4.4.105)$$

$$\text{mit } N_{lm} = N_\phi N_\chi = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}. \quad (4.4.106)$$

Dabei haben wir die Phase $(-1)^{(m+|m|)/2}$ so gewählt, dass

$$(L_-)^m Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^0(\theta, \phi), \quad (4.4.107)$$

worin sich die Kugelflächenfunktion für $m = 0$ vereinfacht schreiben läßt als

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (4.4.108)$$

Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen:	
Symmetrie	$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*$, (4.4.109)
Orthogonalität	$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$, (4.4.110)
Vollständigkeit	$\sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^{m*}(\theta', \phi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta}$, (4.4.111)
Additionstheorem	$\sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^{m*}(\theta', \phi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta)$, (4.4.112)
Paritätssymmetrie $P: \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$:	$\Rightarrow P\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}) = \psi(\pi - \theta, \phi + \pi)$, $\Rightarrow P Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi)$ $\stackrel{(4.4.101)}{=} e^{im\pi} (-1)^{l+m} Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$. (4.4.113)

Zur Verdeutlichung geben wir die Kugelflächenfunktionen für die niedrigsten Quantenzahlen (l, m) an:³

m	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
3				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{-3i\varphi}$
2			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{-2i\varphi}$
1		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{-i\varphi}$
0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos^2 \theta)$
-1		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi}$
-2			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2i\varphi}$
3				$-\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{3i\varphi}$

Aus den ($l = 1, m = \pm 1, 0$) lassen sich die kartesischen p -Orbitale $p_x = (Y_1^1 - Y_1^{-1})/\sqrt{2} \sim \sin \theta \cos \phi$, $p_y = i(Y_1^1 + Y_1^{-1})/\sqrt{2} \sim \sin \theta \sin \phi$ und $p_z = Y_1^0 \sim \cos \theta$ superponieren, deren Wahrscheinlichkeitsdichten

³Für graphische Darstellungen siehe die handschriftlichen Notizen, die Folien, oder F. Schwabl: Quantenmechanik, 7. Auflage, Seite 119 [1].

4. Bewegung im Zentralpotential

$|p_x|^2 \sim \sin^2 \theta \cos^2 \phi$, $|p_y|^2 \sim \sin^2 \theta \sin^2 \phi$, $|p_z|^2 \sim \cos^2 \theta$ die bekannte Doppelkugel-Hantelform um die betreffende Achse annehmen.

4.5. Lösung der Schrödingergleichung im Zentralpotential

Wie zu Beginn dieses Kapitels diskutiert, benötigen wir die Darstellungen des Drehimpulsoperators und dessen Eigenzustände, um die Schrödingergleichung für Potentiale zu lösen, welche die Bewegung in den drei Raumrichtungen in einer Weise koppeln, die symmetrisch unter beliebigen Rotationen der $SO(3)$ ist. Dies bedeutet, dass die Potentiale zentralsymmetrisch sein müssen, damit der volle Satz an Eigenzuständen und somit an Kugelflächenfunktionen für die Entwicklung beliebiger Zustände notwendig ist.

4.5.1. Allgemeine Behandlung von Zentralpotentialen

Wir betrachten ein Teilchen im radialsymmetrischen Potential $V(\mathbf{x}) = V(r)$. Der zugehörige Hamilton-Operator ist dann

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{r}), \quad M = \text{Masse des Teilchens.} \quad (4.5.114)$$

(Wir schreiben die Masse jetzt mit großem M , um eine Verwechslung mit der Drehimpulsquantenzahl m zu vermeiden.) Aufgrund allgemeiner Prinzipien stellen wir fest:

- $\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ sind gemeinsam diagonalisierbar. Der Grund dafür ist, dass beliebige Drehungen durch \mathbf{L} generiert werden und Operatoren \hat{A} unter diesen Drehungen wie

$$\hat{A} \rightarrow (e^{-i\phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}/\hbar})^\dagger \hat{A} e^{-i\phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \quad (4.5.115)$$

transformieren, für infinitesimale Drehwinkel also wie

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \mathbf{n} [\hat{A}, \hat{\mathbf{L}}]. \quad (4.5.116)$$

Damit impliziert die Invarianz unter Drehungen, dass

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0 = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i]. \quad (4.5.117)$$

- Die Energieeigenwerte sind bezüglich der L_z -Quantenzahl m degeneriert: Betrachte den Energieeigenzustand $|E_{l,m}, l, m\rangle$ mit $\hat{H} |E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m} |E_{l,m}, l, m\rangle$. Wegen $[\hat{H}, \hat{L}_\pm] = 0$ ist

$$H L_\pm |E_{l,m}, l, m\rangle = L_\pm H |E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m} L_\pm |E_{l,m}, l, m\rangle. \quad (4.5.118)$$

Wir haben aber bereits gesehen, dass L_\pm die Quantenzahl m um \hbar erhöht bzw. erniedrigt. Deshalb müssen die Energieeigenwerte unabhängig von m sein. Umgekehrt ausgedrückt lautet dieses Argument, dass die Entartung der Energieeigenwerte bezüglich m eine weitere Erhaltungsgröße jenseits von L_z – hier L_\pm bzw. \mathbf{L} – impliziert.

Betrachten wir nun die Darstellung von H in Kugelkoordinaten. Dazu schreiben wir zunächst den Impulsoperator als

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad \text{mit} \quad \nabla = \mathbf{e}_r \partial_r + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi. \quad (4.5.119)$$

4.5. Lösung der Schrödingergleichung im Zentralpotential

Die explizite Auswertung von $\Delta = \nabla^2$ ergibt:

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta(\sin\theta \partial_\theta) \right]. \quad (4.5.120)$$

Dies läßt sich leicht mittels der partiellen Ableitungen der Einheitsvektoren des sphärischen Koordinatensystems,

$$\partial_\theta \mathbf{e}_r = \mathbf{e}_\phi \sin\theta, \quad \partial_\theta \mathbf{e}_r = \mathbf{e}_\theta, \quad (4.5.121)$$

$$\partial_\phi \mathbf{e}_\phi = -(\mathbf{e}_r \sin\theta + \mathbf{e}_\theta \cos\theta) = -\mathbf{e}_\perp = -R_\zeta(\phi) \mathbf{e}_x, \quad \partial_\phi \mathbf{e}_\phi = 0, \quad (4.5.122)$$

$$\partial_\phi \mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_\phi \cos\theta, \quad \partial_\theta \mathbf{e}_\theta = -\mathbf{e}_r, \quad (4.5.123)$$

sowie $\partial_r \mathbf{e}_i = 0$, beweisen, nach Quadrieren von (4.5.119).

Ein Vergleich mit dem Operator \mathbf{L}^2 in Gleichung (4.4.84) ergibt den Zusammenhang

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2\hbar^2} \mathbf{L}^2. \quad (4.5.124)$$

Damit können wir den

Hamiltonoperator in Kugelkoordinaten,

$$H = \frac{p_r^2}{2M} + \frac{\mathbf{L}^2}{2Mr^2} + V(r), \quad (4.5.125)$$

schreiben, wobei

$$p_r = -i\hbar \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) \quad (4.5.126)$$

den Radialteil des Impulses darstellt.

Wir lösen nun die stationäre Schrödingergleichung $\hat{H}\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$ mittels Separationsansatz $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$. Aus $\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$ folgt die radiale Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r). \quad (4.5.127)$$

Wegen $\hat{p}_r 1/r = -i(\hbar/r)\partial_r$ definieren wir nun noch $u(r) := rR(r)$, wodurch sich die Schrödingergleichung zu der folgenden eindimensionalen Form vereinfacht:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r), \quad (4.5.128)$$

mit dem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}, \quad (4.5.129)$$

worin der zweite Term ein abstoßendes Zentrifugalpotential $V_{\text{Zentr.}}$ darstellt. Ein wichtiges Beispiel für V , für welches wir im nachfolgenden Abschnitt die stationäre Schrödingergleichung lösen werden, stellt das Coulomb-Potential $V(r) \propto -1/r$ dar.

Abhängig von der relativen Stärke von V und $V_{\text{Zentr.}}$ existieren einer oder mehrere Bindungszustände. Von

4. Bewegung im Zentralpotential

den entsprechenden Lösungen erwarten wir

- Normierbarkeit:

$$\int d^3x |\psi(x)|^2 = \int d\Omega |Y_l^m|^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty, \quad (4.5.130)$$

woraus folgt, dass $\lim_{r \rightarrow \infty} |u(r)| < a/r^{1/2}$ gelten muss. Demnach muss $|u(r)|^2$ schneller abfallen als $1/r$.

- Reguläres Verhalten bei $r \rightarrow 0$:

$$\Delta \left(\frac{u(r)}{r} \right) = \left(\Delta \frac{1}{r} \right) u(r) + \dots \text{ (Produktregel)}. \quad (4.5.131)$$

Es gilt $\Delta \frac{1}{r} = 4\pi\delta(r)$. Dies bedeutet, dass, falls $V(r) \neq \delta(r)$, $u(0) = 0$ gelten muss.

Wir bestimmen die Form der asymptotischen Lösungen für

- $r \rightarrow 0$:

Unter der Annahme, dass $V_{\text{Zentr.}} \sim 1/r^2$ bei $r \rightarrow 0$ dominiert (wie für das Coulomb-Potential $\propto -1/r$ der Fall), ergibt sich asymptotisch für $r \rightarrow 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right] u(r) \Big|_{r \rightarrow 0} = 0. \quad (4.5.132)$$

Der Lösungsansatz $u(r) = r^k$ führt zu $-k(k-1) + l(l+1) = 0$, was durch $k = l+1$ oder $k = -l$ erfüllt wird. Die allgemeine Lösung hat also die Form

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \quad (4.5.133)$$

aber $u(0) = 0$ erzwingt $B = 0$.

- $r \rightarrow \infty$: Unter der Annahme $V_{\text{eff}}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = E u(r). \quad (4.5.134)$$

Für geeignete V_{eff} der Form (in der hier einzufügenden Skizze) existieren Bindungszustände mit $E < 0$, also

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = |E| u(r), \quad \Rightarrow \quad u(r) = e^{\pm \kappa r}, \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar}. \quad (4.5.135)$$

Die Normierbarkeit der Wellenfunktion schränkt die Lösung auf $u(r) = Ce^{-\kappa r}$ ein.

4.5.2. Das Coulombpotential

Das Potential für ein Elektron der Ladung $-e_0$ in Wechselwirkung mit einem Kern der Ladung Ze_0 lautet

$$V(r) \stackrel{\text{SI}}{=} -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} \stackrel{\text{cgs}}{=} -\frac{e_0^2 Z}{r}, \quad (4.5.136)$$

mit $e_0 \stackrel{\text{cgs}}{=} 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ esu}$, $q \stackrel{\text{SI}}{=} 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, und $Z = \text{Kerladungszahl}$.

4.5. Lösung der Schrödingergleichung im Zentralpotential

Wir führen den dimensionlosen Radius $\rho = \kappa r$ mit $\kappa = \sqrt{2M|E|}/\hbar$ ein. Damit können wir für die Bindungszustände ($E < 0$) die Schrödingergleichung wie folgt schreiben:

Radialgleichung für die Wellenfunktionen der Bindungszustände des Coulomb-Potentials:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u(\rho) = 0, \quad \text{mit} \quad \rho_0 = e_0^2 Z \frac{\kappa}{|E|} = \frac{e_0^2 Z}{\hbar} \sqrt{\frac{2M}{|E|}}. \quad (4.5.137)$$

Nun wählen wir einen Ansatz für $u(\rho)$, welcher dem asymptotischen Verhalten für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$ genügt;

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho). \quad (4.5.138)$$

Eingesetzt in die Radialgleichung (4.5.137) erhalten wir eine

Differentialgleichung für w :

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dw}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] w(\rho) = 0. \quad (4.5.139)$$

Sie entspricht der Laguerreschen Differentialgleichung (4.5.162) für den Fall, dass ρ_0 eine gerade ganze Zahl ist.

4. Bewegung im Zentralpotential

Um die Bedingungen an ρ_0 und damit das Energiespektrum $\{E_n\}$ zu bestimmen, wählen wir einen Potenzreihenansatz

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad (4.5.140)$$

wobei Potenzen $k < 0$ aufgrund der Regularitätsbedingung für $\rho \rightarrow 0$ ausgeschlossen werden können. Wir verwandeln mit diesem Ansatz die Differential- in eine algebraische Gleichung,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \{k[(k-1) + 2(l+1)]\rho^{k-1} + [-2k + \rho_0 - 2(l+1)]\rho^k\} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \{a_{k+1}(k+1)[k + 2(l+1)] + a_k[-2k + \rho_0 - 2(l+1)]\}\rho^k. \end{aligned} \quad (4.5.141)$$

Da die Gleichung für alle ρ gelten muss, müssen die Koeffizienten jeder Potenz ρ^k separat verschwinden. Dies entspricht der Bedingung, dass

$$a_{k+1}(k+1)[k + 2(l+1)] + a_k[-2k + \rho_0 - 2(l+1)] = 0, \quad (4.5.142)$$

und führt zu der Rekursionsrelation

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k, \quad k \geq 0. \quad (4.5.143)$$

Wir stellen uns nun die Frage, ob die damit bestimmte Lösung $w(\rho)$ normierbar ist. Betrachten wir das asymptotische Verhalten der Reihe, welches durch $a_k, k \rightarrow \infty$ bestimmt wird, so finden wir, dass in diesem Limes

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2}{k}. \quad (4.5.144)$$

Daher beschränkt die Funktion $e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} 2^k \rho^k / k!$ die Funktion w für $\rho \rightarrow \infty$ nach oben, wobei w für $\rho \rightarrow \infty$ gegen $e^{2\rho}$ konvergiert. $w(\rho) \exp(-\rho) \rho^{l+1} \sim \rho^{l+1} \exp(\rho)$ ist daher nicht normierbar. Die Wellenfunktion kann somit allein dann normierbar bleiben, wenn die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ bei einer endlichen Ordnung abbricht, d.h.

$$\exists N \in \mathbb{N}_0 : a_k = 0 \quad \forall k \geq N+1. \quad (4.5.145)$$

Aus der Rekursionsformel folgt damit

$$2(N+l+1) - \rho_0 = 0. \quad (4.5.146)$$

Wir definieren die *Hauptquantenzahl* $n := N+l+1 \in \mathbb{N}$ und finden damit die *Quantisierungsbedingung* an ρ_0 und aus (4.5.137) für die Eigenenergien E : $2n = \rho_0 \equiv e_0^2 Z \sqrt{2M/|E|} / \hbar$. Daraus ergeben sich die

Energieeigenwerte für das Coulomb-Potential in 3 Raumdimensionen:

$$E_n = -\frac{MZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{(Ze_0)^2}{2a_B n^2} = -\frac{1}{2} M c^2 \left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2 \quad (4.5.147)$$

$$a_B = \frac{\hbar^2}{M e_0^2} = 0.529 \text{ \AA} \quad (\text{Bohr-Radius}), \quad M = 0.511 \text{ MeV}/c^2 \quad (\text{Ruhemasse des } e^-), \quad (4.5.148)$$

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (\text{Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante}). \quad (4.5.149)$$

Das Energiespektrum $\{E_n, n \in \mathbb{N}\}$ ist entartet:

- Für jede gegebene "Hauptquantenzahl" n sind für die Drehimpulsquantenzahl $l = n - 1 - N$, $N \in \mathbb{N}_0$, die Werte $l \in \{0, 1, \dots, n - 1\}$ möglich.
- Wie zuvor besprochen entspricht jedem dieser l ein Multipllett von $2l + 1$ Zuständen $|l, m\rangle$ mit $m \in \{l, l - 1, \dots, -l\}$.

Dies bedeutet, dass es zu jedem E_n ein Multipllett von

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (4.5.150)$$

Eigenzuständen gibt, d.h.:

Der *Entartungsgrad* zur Hauptquantenzahl n ist n^2 .

- Die Entartung der Energien E_n bezüglich der L_z -Quantenzahl m konnte aufgrund der Radialsymmetrie $V = V(r)$ erwartet werden.
- Die Entartung bezüglich l gilt nur im speziellen Fall $V(r) = -1/r$ und deutet auf eine Symmetrie über $SO(3)$ hinaus hin.

Die $SO(3)$ Quantenzahlen (l, m) sind offenbar nicht ausreichend zur Spezifizierung des Eigenwertes von \hat{H} . Folglich gibt es einen weiteren Operator \hat{O} mit

$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0 \quad (4.5.151)$$

Für $V(r) = -e_0^2/r$ ist dies der

Laplace-Runge-Lenz-Vektor⁴

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2M} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e_0^2}{r} \hat{\mathbf{r}}. \quad (4.5.152)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

Für ihn kann man zeigen, dass gilt

$$[\hat{\mathbf{A}}, H] = 0. \quad (4.5.153)$$

Klassisch bedeutet die Erhaltung des Lenz-Runge-Vektors, welcher entlang der Hauptachse der elliptischen Bahn ausgerichtet ist, dass diese Hauptachse feststeht, sowie die Exzentrizität der Bahn. Abweichungen vom $1/r$ -Potential brechen diese Erhaltung und führen in erster Ordnung zur Periheldrehung (z.B. Mehrkörpersysteme oder Einstein-Gravitation). Aus

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k, \quad (4.5.154)$$

(Beweis: Übung!) folgt, dass \mathbf{A} als (Axial-)Vektor transformiert und A_z die Entartung der Energieeigenwerte aufhebt. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass, mit einer passenden Konstante c ,

$$\hat{J}_i^\pm = \frac{1}{2}(\hat{L}_i \pm c\hat{A}_i) \quad (4.5.155)$$

eine $\mathfrak{so}(3) \times \mathfrak{so}(3)$ Algebra bilden, welche eine algebraische Lösung des Coulomb-Problems ermöglicht:

Man findet die Kommutatorrelation

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{2}{Me_0^4} \hat{H} \hat{L}_k, \quad (4.5.156)$$

wobei $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2M - e_0^2/r$ ist. Für die Lösung der Schrödingergleichung $(\hat{H} - E)|\psi\rangle = 0$ definieren wir die Operatoren

$$\hat{J}_i^\pm = \frac{1}{2} \left(\hat{L}_i \pm \sqrt{-\frac{Me_0^4}{2E}} \hat{A}_i \right), \quad (4.5.157)$$

welche beide, $\{J_i^+\}$ und $\{J_i^-\}$, jeweils eine Generatorbasis der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ bilden:

$$[J_i^\pm, J_j^\pm] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k^\pm, \quad [J_i^\pm, J_j^\mp] = 0. \quad (4.5.158)$$

Aus $[H, \mathbf{A}] = [H, \mathbf{L}] = 0$ folgt $[H, \mathbf{J}^\pm] = 0$, so dass man Energieeigenfunktionen $|E, j_\pm\rangle$ definieren kann, welche

$$(\mathbf{J}^\pm)^2 |E, j_\pm\rangle = \hbar^2 j_\pm(j_\pm + 1) |E, j_\pm\rangle \quad (4.5.159)$$

erfüllen. Man kann nun zeigen, dass $(\mathbf{J}^+)^2 = (\mathbf{J}^-)^2$ und $2[(\mathbf{J}^+)^2 + (\mathbf{J}^-)^2] + \hbar^2 = -Me_0^4/2E$, so dass

$$\{2[(\mathbf{J}^+)^2 + (\mathbf{J}^-)^2] + \hbar^2\} |E, j_\pm\rangle = \hbar^2 [4j_+(j_+ + 1) + 1] |E, j_\pm\rangle = -\frac{Me_0^4}{2E} |E, j_\pm\rangle \quad (4.5.160)$$

Damit ergibt sich für die Energieeigenwerte:

$$E = -\frac{Me_0^4}{2(2j_+ + 1)^2 \hbar^2}, \quad (4.5.161)$$

wobei die $j_\pm \in \mathbb{N}_0/2$ sind (halb- oder ganzzahlig, entsprechend der $SO(3)$). Dies entspricht der zuvor abgeleiteten Lösung (4.5.147) für $Z = 1$.

Abschließend besprechen wir noch die expliziten Lösungen der Differentialgleichung (4.5.137) für die Radialwellenfunktion des Coulomb-Problems: Mit $\rho_0 = 2n$ entspricht die DGL (4.5.139) für $w(\rho)$ der

⁴Keiner der drei hat ihn jedoch entdeckt, s. [25, 26].

Laguerreschen Differentialgleichung:

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (s+1-x) \frac{d}{dx} + (r-s) \right] L_r^s(x) = 0, \quad (4.5.162)$$

wobei im Coulomb-Problem $x = 2\rho$, $s = 2l + 1$ und $r = n + l$ entsprechen. Die Lösungen dieser DGL sind die assoziierten Laguerre Polynome

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x), \quad (4.5.163)$$

die sich aus den Laguerre Polynomen

$$L_r(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r \quad (4.5.164)$$

ableiten lassen. Explizit lauten die

Assoziierten Laguerre-Polynome:

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k, \quad (4.5.165)$$

mit Normierungsrelation

$$\int_0^\infty dx x^{s+1} e^{-x} [L_r^s(x)]^2 = (2r-s+1) \frac{(r!)^3}{(r-s)!}. \quad (4.5.166)$$

Die Laguerre-Polynome selbst lassen sich durch

$$\frac{1}{1-s} \exp\left(-x \frac{s}{1-s}\right) = \sum_{r=0}^{\infty} L_r(x) \frac{s^r}{r!} \quad (4.5.167)$$

erzeugen. Hieraus konstruieren wir die endgültigen

Energie-Eigenfunktionen des Coulomb-Problems:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (4.5.168)$$

worin Y_l^m die Kugelflächenfunktionen (4.4.105) sind und die

$$R_{nl}(r) = \frac{u(r)}{r} = -N(2kr)^l e^{-kr} L_{n+l}^{(2l+1)}(2kr), \quad (4.5.169)$$

den radialen Anteil beschreiben, worin

4. Bewegung im Zentralpotential

$$N = \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n(n+l)!^3}}, \quad \kappa = \frac{MZe_0^2}{\hbar^2 n} = \frac{Z}{na_B}, \quad (4.5.170)$$

mit

$$a_B = \frac{\hbar^2}{Me_0^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (\text{Bohr-Radius}). \quad (4.5.171)$$

Die **Energieeigenwerte des Coulomb-Problems** lauten

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (4.5.172)$$

worin

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.037} \quad (\text{Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante}). \quad (4.5.173)$$

Für das Wasserstoffatom mit Kernladungszahl $Z = 1$ erhalten wir die Grundzustandsenergie

$$E_1 = -13.6 \text{ eV} = -1 \text{ Ry}. \quad (4.5.174)$$

Die Übergangsfrequenz zwischen zwei Energieniveaus berechnet sich somit zu

$$\hbar\omega_{nm} = E_m - E_n = 1 \text{ Ry} \left(-\frac{1}{m^2} + \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.5.175)$$

Abschließende **Bemerkungen** zur Physik der Lösungen des Coulomb-Problems:

- Die radialen Wellenfunktionen und ihre entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten der untersten Schalen lauten explizit:⁵

Schale	n	Orbital	l	$R_{nl}(r)$
K	1	s	0	$2 \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_B}$
L	2	s	0	$2 \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_B} \right) e^{-Zr/2a_B}$
		p	1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_B} e^{-Zr/2a_B}$
M	3	s	0	$2 \left(\frac{Z}{3a_B} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_B} + \frac{2(Zr)^2}{27a_B^2} \right) e^{-Zr/3a_B}$
		p	1	$\frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_B} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_B} \left(1 - \frac{Zr}{6a_B} \right) e^{-Zr/3a_B}$
		d	2	$\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_B} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_B} \right)^2 e^{-Zr/3a_B}$

⁵Für graphische Darstellungen siehe die handschr. Notizen, Folien, oder F. Schwabl: Quantenmechanik, 7. Auflage, Seite 132 [1].

4.5. Lösung der Schrödingergleichung im Zentralpotential

- Radiale Mittelwerte und Unschärfen ergeben sich zu

$$\langle r \rangle_{n,l} = \int d^3x \psi_{nlm}^* r \psi_{nlm} = \frac{a_B}{2Z} (3n^2 - l(l+1)), \quad (4.5.176)$$

$$\text{Speziell für } l = n - 1: \quad \langle r \rangle_{n,n-1} = \frac{a_B}{Z} n \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.5.177)$$

$$\langle r^2 \rangle_{n,n-1} = \frac{a_B^2}{Z^2} n^2 (n+1) \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.5.178)$$

$$\Rightarrow (\Delta r)_{n,n-1,m}^2 = \frac{a_B^2 n^2}{2Z^2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.5.179)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} \right)_{n,n-1,m} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}. \quad (4.5.180)$$

- Zustände zu $l = 0$:

$$\psi_{n00} \propto e^{-kr} L_n^1(2kr). \quad (4.5.181)$$

Diese haben $n - 1$ Knoten, sind endlich bei $r = 0$ und kugelsymmetrisch. Klassisch verläuft die Bahn durch $r = 0$.

- Zustände zu $l = n - 1$ (l maximal):

$$R_{n,n-1}(r) = \frac{(2\kappa)^{\frac{3}{2}}}{(2n)!} (2\kappa r)^{n-1} e^{-\kappa r}. \quad (4.5.182)$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte dazu beträgt:

$$p(r) = \int d\Omega r^2 |\psi_{n,n-1,m}|^2 = C r^{2n} e^{-2\kappa r}. \quad (4.5.183)$$

Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte ($p'(r) \propto r^{2n} e^{-2\kappa r} (2n/r - 2\kappa)$) ist bei $r_0 = n/\kappa = n^2 a_B/Z$, also nimmt der Radius mit n^2 zu. Die Schwankung nimmt $1/\sqrt{n}$ ab.

Für große n lassen sich klassische Bahnen konstruieren, entsprechend den kohärenten Zuständen des HO, welche das 3. Keplersche Gesetz (Radius $\propto n^2$, Umlaufzeit $\propto n^3$) erfüllen.

Diese nennt man *Rydberg-Zustände*.

- Schwankungen von \mathbf{L} :

Es gilt $\langle L_{x,y} \rangle_{l,m} = 0$. Mit $L_x^2 + L_y^2 = \mathbf{L}^2 - L_z^2$ folgt daraus:

$$\langle L_x^2 \rangle_{l,m} = \langle L_y^2 \rangle_{l,m} = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]. \quad (4.5.184)$$

Für $l = |m|$ werden diese minimal: $\Delta L_{x,y}|_{l,\pm l} = \hbar \sqrt{l/2}$. Für große l gilt: $\Delta L_x / \langle L_x^2 \rangle^{1/2} \propto l^{-1/2}$.

- Die Längenskalen, welche durch den klassischen Elektronenradius r_e , die Compton-Wellenlänge λ_c , den Bohr-Radius a_B und die Lichtwellenlänge λ atomarer Übergänge gegeben sind, unterscheiden sich, der Größenordnung nach, um jeweils einen Faktor der Sommerfeldschen Feinstruktur-

4. Bewegung im Zentralpotential

konstante $\alpha = e_0^2/\hbar c = 1/137$:

$$\begin{aligned} r_e &= \frac{e_0^2}{Mc^2} \\ &= \alpha \lambda_c = \alpha \frac{\hbar}{Mc} \\ &= \alpha^2 a_B = \alpha^2 \frac{\hbar^2}{Me_0^2} \\ &= \alpha^3 \lambda = \alpha^3 \frac{\hbar^3 c}{Me_0^4} \sim \alpha^3 \frac{\hbar c}{E_n}. \end{aligned} \tag{4.5.185}$$

Diese *Trennung der Skalen* der verschiedenen Aspekte der dynamischen Struktur der Elektronenbewegung in der Hülle eines Atoms ist wesentlich für den Erfolg der Quantenmechanik bzw. Quantenelektrodynamik in der Beschreibung der atomaren Spektren und Eigenschaften. Sie erlaubt letztlich die präzise Auswertung analytischer Näherungen im Rahmen der quantenfeldtheoretischen Störungstheorie, welche auf die Kleinheit der Feinstrukturkonstante α im Vergleich zur Eins entscheidend angewiesen sind.

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Die Elektronenbewegung im Wasserstoffatom hatte uns fast unbemerkt die Elektrodynamik mit der Quantenmechanik zusammenführen lassen. Ohne, dass dies eine besondere Rolle für die Mathematik der Schrödinger-Gleichung gespielt hat, haben wir das Coulombpotential als wichtigstes Beispiel für ein zentralsymmetrisches Potential behandelt. Während dabei lediglich die elektrostatische Kraft zwischen Atomkern und Elektron ihre Wirkung entfalten durfte, geben wir im folgenden auch der magnetischen Kraft den ihr gebührenden Raum. Und bevor dann die Lie-Theorie wieder etwas in den Hintergrund treten darf, führen wir eingangs zuerst noch den Spin als eine der Quantenmechanik eigene Darstellung der Drehimpulsalgebra ein. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden wir dann eingehend die Kopplung einer quantenmechanischen Wellenfunktion an ein elektromagnetisches Feld beschreiben.

5.1. Spin

Der Spin stellt eine spezifische Klasse von Darstellungen der Lie-Algebra des Drehimpulses dar, welche kein klassisches Äquivalent besitzt. Der tiefere Grund hierfür ist, dass die Spinzustände zu halbzahliger Quantenzahl s des Gesamtdrehimpulses aufgrund des *Spin-Statistik Theorems* nur bei fermionischen Teilchen, Elementarteilchen oder zusammengesetzten Teilchen wie Atomen realisiert sind, während Teilchen mit ganzzahligem Spin bosonischen Charakter besitzen. Nur innerhalb der Quantentheorie wiederum ist eine Beschreibung von Fermionen wie etwas den Elektronen möglich, und, abgesehen vom Bahndrehimpuls, läßt sich jeder weitere Spin-Freiheitsgrad auf eine Kombination der Spin-1/2 Zustände der Elektronen sowie der zum Kern beitragenden Elementarteilchen wie Protonen und Neutronen zurückführen. Der Spin als "Eigendrehimpuls" solcher Elementarteilchen hat demnach eine fundamentale Bedeutung für das Verständnis der in der Natur beobachteten Eigenschaften, von der Elementarteilchenphysik hin zu Anwendungen im Bereich der Festkörper. Inzwischen konnten verschiedene Anwendungen entwickelt werden, welche von gesellschaftlich großer Bedeutung sind, wofür die Kernspintomographie, magnetische Sensoren und Spintronik herausragende Beispiele sind.

5.1.1. Phänomenologie des Spins

Wir beginnen mit dem Spin des Elektrons als einem auch im Hinblick auf Anwendungen im Vordergrund stehenden Beispiel. Da sich der Spin als eine Art Eigendrehimpuls des elektrisch geladenen Elektrons verstehen läßt, kann man sich ein Teilchen mit Spin als einen punktförmigen Elementarmagneten vorstellen, dessen Dynamik von einem äußeren Magnetfeld beeinflusst wird. Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass ein klassisches Teilchen mit (Bahn-)Drehimpuls \mathbf{L} im Magnetfeld \mathbf{B} die Energie

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (5.1.1)$$

besitzt. Hier bezeichnet $\boldsymbol{\mu}$ das magnetische Moment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2Mc} \mathbf{L}, \quad (5.1.2)$$

worin q die Ladung, M die Masse, und \mathbf{L} der Bahndrehimpuls des punktförmigen Teilchens sind. Im *Stern-Gerlach-Experiment* (1922) [27] wurde dies für Silberatome überprüft, die sich durch ein inhom-

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

genes Magnetfeld $\mathbf{B} = B z \mathbf{e}_z$ bewegen:

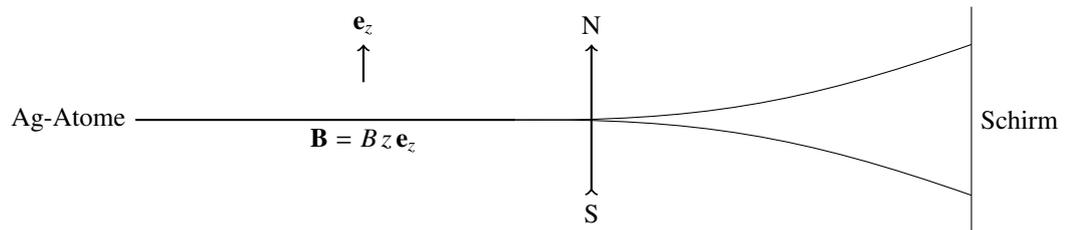


Abbildung 5.1.: Stern-Gerlach-Experiment (1922) [27]: Erhitzte Silberatome senden Elektronen aus, welche in einem inhomogenen Magnetfeld (lineare Zunahme der Feldstärke in z -Richtung) gemäß ihrer Spin-Ausrichtung abgelenkt werden. Anstelle einer ungeradzahligigen Aufspaltung, wie für Bahndrehimpuls-Quantisierung zu erwarten wäre, zeigt sich eine zweifache Aufspaltung.

Die klassische Kraft auf ein Silberatom ist bei dieser Wahl des Magnetfelds konstant im Raum und zeigt in Richtung des Feldes,

$$\mathbf{F} = -\nabla U = \frac{qB}{2Mc} L_z \mathbf{e}_z. \quad (5.1.3)$$

Quantenmechanisch ist das Teilchen, z.B. ein atomares Elektron, welches sich im Coulombpotential des Kerns bewegt, durch die Drehimpulszustände als die Eigenzustände des Hamiltonoperators charakterisiert. Befindet es sich beispielsweise in einem solchen Eigenzustand $|l, m\rangle$, so ergibt sich die Kraft

$$F_z = \frac{qB}{2Mc} m\hbar \quad (5.1.4)$$

als Eigenwert wie auch Erwartungswert des Operators (5.1.3), mit diskreten Werten gemäß Magnet- und Drehimpulsquantenzahlen m und l . Befinden sich die Elektronen in einer Superposition der Zustände $|l, m\rangle$ zu festem l , so kann man auf dem Schirm eine $(2l + 1)$ -fache Aufspaltung des Strahls beobachten.

Die Valenzelektronen von Silber liegen in der $5s$ -Schale, d.h. $l = 0$. Daraus folgt, dass der Strahl unabgelenkt auf dem Schirm auftreffen sollte. Tatsächlich gefunden wurde jedoch eine zweifache Aufspaltung des Strahls [27], wie man für einen halbzahligen Drehimpuls erwarten würde. “Dieses in der ganzen physikalischen Welt berühmt gewordene Stern-Gerlach-Experiment endete mit einem kurzen Telegramm von Walther Gerlach an Stern in Rostock mit dem Text: ‘Bohr hat doch recht’.”¹ Allerdings hatte Bohr lediglich das Auftreten einer Quantelung der Beiträge des Drehimpulses vorausgesagt, welche wie beobachtet eine Aufspaltung in diskrete Strahlen zur Folge hätte. Die beobachtete, geradzahlige Aufspaltung² war jedoch dann nur mit einer halbzahligen Quantenzahl j zu erklären, welche zu dem Zeitpunkt noch nicht bekannt war:

- Das $5s$ -Elektron besitzt, über den Bahndrehimpuls \mathbf{L} hinaus, einen Anteil am Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} .
- Diesen halbzahligen Drehimpuls \mathbf{S} bezeichnet man als Spin. Die beobachtete, zweifache Aufspaltung läßt sich durch Zustände mit Gesamtdrehimpuls $1/2$ beschreiben:

¹Aus den Gedenkworten von Wolfgang Gentner für Walther Gerlach 1980, [28].

²Gerlach und Stern ließen diese Beobachtung im übrigen unkommentiert: “Die Aufspaltung des Atomstrahles im Magnetfeld erfolgt in zwei diskrete Strahlen. Es sind keine unabgelenkten Atome nachweisbar.” [27], S. 351.

Spin-1/2 Zustände:

$$|s, s_z\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle. \quad (5.1.5)$$

Diese halbzahligen Darstellungen der Drehimpulsalgebra können als eine Art „inneren Drehimpuls“ der Teilchen interpretiert werden.

Die Theorie der Drehimpulsquantelung, wie wir sie mit der Einführung der Lie-Algebra-Darstellungen der $\mathfrak{so}(3)$ kennengelernt haben, läßt sich unter der zusätzlichen Annahme der physikalischen Existenz halbzahliger Drehimpulse unmittelbar auf den Spin übertragen. Die Möglichkeit halbzahliger Drehimpulse hatte sich bereits aus den Eigenschaften der $\mathfrak{so}(3)$ ergeben, vgl. (4.3.65). Der Spinoperator \mathbf{S} erfüllt also alle Eigenschaften eines Drehimpulses. Im einfachsten Fall ist die $\mathfrak{so}(3)$ -Algebra in der $j = 1/2$ Darstellung realisiert:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}, \quad (5.1.6)$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k, \quad (5.1.7)$$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad (5.1.8)$$

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm\hbar S_{\pm}, \quad (5.1.9)$$

$$[S_+, S_-] = 2\hbar S_z. \quad (5.1.10)$$

Wir schreiben die Eigenzustände von \mathbf{S}^2 und S_z kurz als

$$|s, s_z = +1/2\rangle = |1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle, \quad (5.1.11)$$

$$|s, s_z = -1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle, \quad (5.1.12)$$

und damit die zugehörigen Wirkungen des Spinoperators und seiner Komponenten als

$$\mathbf{S}^2 |\uparrow\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |\uparrow\rangle, \quad \mathbf{S}^2 |\downarrow\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |\downarrow\rangle, \quad (5.1.13)$$

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad (5.1.14)$$

$$S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle. \quad (5.1.15)$$

Die Operatoren S_+, S_-, S_z können in der $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ -Basis durch 2×2 -Matrizen dargestellt werden:

$$\sigma_i = \frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_i | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_i | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_i | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_i | \downarrow \rangle \end{pmatrix}. \quad (5.1.16)$$

Konkret sind dies die bekannten Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.17)$$

welche, zusammen mit der Einheitsmatrix, eine Basis der komplexwertigen, hermiteschen 2×2 -Matrizen bilden, ohne die $\mathbb{1}$ eine Basis deren spurfreier Unterklasse. In gleicher Weise ist es günstig, die Paulische 2-Komponenten- („Spinor“)-Notation der Eigenzustände von S_z einzuführen:

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.18)$$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

welche die kanonische Basis des Vektorraums allgemeiner solcher Spinoren bilden. Wir definieren die Darstellung der Spinoperatoren durch die Paulimatrizen also als

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i. \quad (5.1.19)$$

und erhalten die Wirkung der Spinmatrizen als

$$S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.20)$$

Definition 5.1. Die $s = 1/2$ Darstellung heißt Spindarstellung. Ein Element des $s = 1/2$ Darstellungsraums heißt Spinor.

5.1.2. Ontologie des Spins & Gesamtdrehimpuls

Die bisherige, phänomenologische Behandlung des Spins erscheint noch ein wenig ad hoc. Um zu verstehen, was der Spin tatsächlich ist, müssen wir mathematisch etwas ausholen. Spin und Bahndrehimpuls stellen zwei unterschiedliche Darstellungen der Drehgruppe $SO(3)$ dar.

Zur Erinnerung: Die Rotationssymmetrie bestimmter Systeme, wie etwa der Bewegung von Elektronen in einem zentralsymmetrischen Potential, hatte uns veranlaßt, Elemente g der Lie-Gruppe der Rotationen, $g \in SO(3)$ mit Drehmatrix-Darstellung $R(g) = R(\hat{n}, \phi)$ auf ihre Transformationseigenschaften hin zu untersuchen. Für infinitesimale Drehwinkel fungiert allgemein der Drehimpuls als Generator, und dessen Eigenzustände erlauben in der Quantenmechanik, irreduzible Darstellungen aller Generatoren auf $(2j + 1)$ -dimensionalen, rotationsinvarianten Unterräumen zu finden. Beispiele sind für den

- 1) *Bahndrehimpuls*, $\hat{L}_i = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,m'=-l}^l |l, m\rangle L_{lmm'}^{(i)} \langle l, m'|$, $(2l + 1)$ -dimensionale Matrixdarstellungen, z.B. für $l = 1$:

$$\begin{aligned} L_{lmm'}^{(z)} &= \hbar m \delta_{mm'}, & L_1^{(z)} &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ L_{lmm'}^{(x)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (|m| - |m'|), & L_1^{(x)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ L_{lmm'}^{(y)} &= \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} (m - m'), & L_1^{(y)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.1.21)$$

- 2) *Spin mit Drehimpulsquantenzahl* $l = s = 1/2$, $\hat{S}_i = \sum_{s_z, s_z'=\pm 1/2} |1/2, s_z\rangle S_{s_z s_z'}^{(i)} \langle 1/2, s_z|$, die Darstellung durch die 2×2 Pauli-Matrizen:

$$S^{(x)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(y)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(z)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.22)$$

Die Lie-Algebra der schiefssymmetrischen Erzeugenden iF_i der $SO(3)$ mit den ϵ_{ijk} als Strukturkonstanten, welche die Nichtvertauschbarkeit von Drehungen um unterschiedliche Achsen charakterisieren, spielt bereits in der klassischen Mechanik die Rolle der Menge von Generatoren infinitesimaler Drehungen.

Die Poissonklammern in der Hamilton-Jacobi-Mechanik entsprechen dabei der Lie-Klammer der Algebra der Generatoren. Erst die Frage nach (gemeinsamen) Eigenzuständen von \hat{L}_i (und \hat{L}^2) führte uns in die Quantenmechanik, in der wir nach Basisdarstellungen von Operatoren suchen, welche durch den vollständigen Satz ihrer Eigenzustände gegeben sind. Ein entscheidender Schritt bei dieser Quantisierung war die Identifikation

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{J}}/\hbar \quad (5.1.23)$$

der aus den schiefssymmetrischen, reellen Generatoren $i\mathbf{F}$ der $SO(3)$, Gl. (4.1.18), gewonnenen hermiteschen Operatoren \mathbf{F} mit dem quantenmechanischen Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{J}}$. Anstelle dieses Schritts hätte man jedoch auch einfach bei der mathematisch-geometrischen Frage des Transformationsverhaltens von Abbildungen, etwa auf dem \mathbb{R}^3 bleiben können.

Wir betrachten eine komplexwertige skalare Funktion als Abbildung auf dem dreidimensionalen Raum, z.B. die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$:

$$\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} : \mathbf{x} \mapsto \psi(\mathbf{x}) \quad (5.1.24)$$

Diese transformiert unter Drehungen wie:

$$g : \psi(\mathbf{x}) \mapsto \psi'(\mathbf{x}) = T_g\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (5.1.25)$$

Tatsächlich ist für eine Drehung $g = g(\mathbf{n}, \phi)$ um eine Achse \mathbf{n} , $|\mathbf{n}| = 1$, um den Winkel ϕ , d.h., $R_g = e^{-i\phi\mathbf{n}\cdot\mathbf{F}} = \mathbb{1} - i\phi \sum_i n_i F_i + \dots$ die Wirkung von R_g^{-1} infinitesimal gegeben als

$$R_g^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x} - \phi \mathbf{n} \times \mathbf{x}. \quad (5.1.26)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} T_g\psi(\mathbf{x}) &= \psi(\mathbf{x}) - \phi (\mathbf{n} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}) + \dots \\ &= \psi(\mathbf{x}) - \phi (\mathbf{x} \times \nabla) \cdot \mathbf{n} \psi(\mathbf{x}) + \dots \\ &= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \right) \psi(\mathbf{x}) + \dots \end{aligned} \quad (5.1.27)$$

Offenbar generiert also der Bahndrehimpuls die Drehung und, hochintegriert, ergibt sich

$$T_g\psi(\mathbf{x}) = e^{-(i/\hbar)\phi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}}\psi(\mathbf{x}). \quad (5.1.28)$$

Eine Abbildung $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, die unter der Drehung g transformiert wie $\psi \mapsto T_g\psi$, heißt skalare Funktion oder (komplexes) *Skalarfeld*. Der Bahndrehimpuls \mathbf{L} konstituiert auf diese Weise eine Darstellung der Drehgruppe auf dem Raum $H(\mathbb{R}^3)$ der Skalarfelder.

In der Physik spielen allgemeinere Transformationsverhalten eine wichtige Rolle. Aus der klassischen Feldtheorie, z.B. der Elektro- oder Hydrodynamik, kennen wir den Begriff des *Vektorfeldes* als Abbildung

$$\mathbf{v} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{x} \mapsto \mathbf{v}(\mathbf{x}), \quad (5.1.29)$$

mit dem Transformationsverhalten unter Drehungen g ,

$$g : \mathbf{v}(\mathbf{x}) \mapsto \mathbf{v}'(\mathbf{x}) := R_g\mathbf{v}(R_g^{-1}\mathbf{x}), \quad R_g = e^{-i\phi \sum_i n_i F_i}. \quad (5.1.30)$$

Der Raum $V = \mathbb{R}^3$ kann somit als ein 3-dimensionaler Darstellungsraum der Drehgruppe $SO(3)$ interpretiert werden, entsprechend der drei kartesischen Koordinaten des Vektors \mathbf{v} . Die entsprechende Dar-

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

stellung (4.1.18) der Generatoren F_i bezeichnet man als die *fundamentale* oder *Vektordarstellung*. Diese fundamentale Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ ist dreidimensional und irreduzibel. In der Quantenmechanik des Drehimpulses spielt auch die fundamentale Darstellung (5.1.21) in der Basis der drei Zustände zu den Quantenzahlen $j = 1$, $m_z = +1, 0, -1$ eine wichtige Rolle, siehe aber auch Quiz 18 zur $\mathfrak{so}(3)$.

Allgemein betrachten wir also Felder im Darstellungsraum $V_{\mathcal{D}}$ einer Darstellung \mathcal{D} der $\mathfrak{so}(3)$, d.h., die Darstellung $\mathcal{D} : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ von Drehungen $\mathbf{x} \mapsto R_g \mathbf{x}$, unter denen das Feld $v \in H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$,

$$v : \mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}, \quad \mathbf{x} \mapsto v(\mathbf{x}) \in V_{\mathcal{D}} \quad (5.1.31)$$

gemäß

$$g : v(\mathbf{x}) \mapsto v'(\mathbf{x}) = \mathcal{D}_g v(R_g^{-1} \mathbf{x}) \quad (5.1.32)$$

transformiert. Auf diese Weise können wir solche Felder gemäß ihres Transformationsverhaltens klassifizieren:

Skalarfeld	\leftrightarrow	triviale Darstellung $\mathcal{D}_g = \mathbb{1} \quad \forall g$.	(5.1.33)
Vektorfeld	\leftrightarrow	fundamentale / 3-dimensionale Darstellung $\mathcal{D}_g = R_g (= R_{\mathbf{n}}(\phi))$.	(5.1.34)

Im Kontext dieses Kapitels wollen wir nun Vektorfelder betrachten, welche ihre Werte im Darstellungsraum der $s = 1/2$ Spinoren annehmen, die sogen. *Spinorfelder* $\Psi(\mathbf{x})$. In Pauli-Notation schreiben wir

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.35)$$

Wenn $g \in \text{SO}(3)$ der Drehung $R_g = R_{\mathbf{n}}(\phi)$ entspricht, dann transformiert der Spinor gemäß

$$\mathcal{D}_g = e^{-(i/\hbar)\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}} = e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}, \quad (5.1.36)$$

und insgesamt transformiert $\Psi(\mathbf{x})$ wie

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} &\mapsto e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \begin{pmatrix} \psi_+(e^{i\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^\dagger} \mathbf{x}) \\ \psi_-(e^{i\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^\dagger} \mathbf{x}) \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \begin{pmatrix} e^{-(i/\hbar)\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \psi_+(\mathbf{x}) \\ e^{-(i/\hbar)\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.1.37)$$

$$= e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} e^{-(i/\hbar)\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.38)$$

Die explizite Form von $e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}$ werden wir gleich näher diskutieren. Wir erkennen jedoch bereits, dass die von den 2×2 Pauli-Matrizen σ_i generierte Drehung wiederum durch eine 2×2 -Matrix dargestellt wird, wie man sich mit Hilfe der Taylor-Reihe der Exponentialfunktion leicht klar macht.

In der letzten Zeile haben wir die Darstellung der Rotation der Skalarfelder ψ_{\pm} aus dem Spinor herausgezogen, da sie für beide identisch ist und daher wie die Multiplikation der Komponenten des Spinors mit einem Skalar aussieht. Wir kennen diesen Rechenschritt sehr gut aus der linearen Algebra: Während der erste Faktor, eine 2×2 -Matrix ist, wirkt der zweite Faktor auf jede der beiden Komponenten gleichartig, und man könnte ihn auch mit einer Diagonalmatrix $\mathbb{1}_2$ multipliziert denken. Die beiden Komponenten sind hier jeweils Skalarfelder, da wir sie als (i. allg. komplexwertige) Wellenfunktion geschrieben haben. Wenn es sich bei diesen Wellenfunktionen beispielsweise um Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses handelt, $\psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \psi_{\pm,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, mit einem beliebigen Radialanteil $\psi_{\pm,l}(r)$, dann handelt es sich dabei

um eine Projektion der Zustände auf die Ortseigenfunktionen, ausgedrückt in sphärischen Koordinaten.

Genausogut könnten wir die Zustände aber auch in der Basis der Eigenzustände von \mathbf{L} ausdrücken, was, für den Fall, dass ψ Eigenzustand von \mathbf{L}^2 zu einem festen l ist, zu einem $2l + 1$ -dimensionalen Vektor für beide Spin-Komponenten ψ_{\pm} führen würde. In diesem Fall wäre die Darstellung des Zustands die eines komplexwertigen Vektors mit $4l + 2$ Einträgen, und die Darstellung des von \mathbf{L} generierten Drehoperators $\exp\{-(i/\hbar)\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}\}$ eine $(2l + 1) \times (2l + 1)$ -Matrix. Damit stellt sich die allgemeine Frage, wie die Multiplikation dieser Matrix mit der 2×2 -Matrix $\exp\{-i\frac{\phi}{2}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\}$ mathematisch genau zu verstehen ist. Anhand des oben eingeführten Beispiels der Darstellung des Zustands mittels einer Spinor-Wellenfunktion läßt sich bereits erahnen, dass wir wiederum die $(2l + 1) \times (2l + 1)$ -Matrix der Bahndrehimpuls-generierten Drehung zweimal in die Diagonaleinträge einer 2×2 -Einheitsmatrix kopieren müssen, um die Wirkung auf den Spinor korrekt zu erfassen. Dieser Schritt stellt, unabhängig von der speziell gewählten Darstellung, mathematisch ein Tensorprodukt dar. Genau genommen handelt es sich bei der Drehung in (5.1.38) um das Tensorprodukt zweier linearen Abbildungen auf dem und in das Tensorprodukt zweier Vektorräume, deren Elemente Spinoren bzw. Skalarfelder (d.h. komplexwertige Wellenfunktionen im Ortsraum) sind.

Wir nehmen dies zum Anlass, an das **Tensorprodukt** zu erinnern: Gegeben seien zwei Vektorräume V, W mit Basen $\{e_i; i = 1, \dots, \dim V\}$ und $\{\tilde{e}_j; j = 1, \dots, \dim W\}$. Dann ist das *Tensorprodukt* $V \otimes W$ der Vektorraum der Dimension $\dim(V \otimes W) = \dim(V) \dim(W)$ mit Basis $e_i \otimes \tilde{e}_j$, so dass für alle $v = \sum_i v_i e_i$ und $w = \sum_j w_j \tilde{e}_j$ das Tensorprodukt der Vektoren im Tensorprodukt der Räume liegt und dargestellt werden kann als

$$V \otimes W \ni v \otimes w = \sum_{i,j} v_i w_j e_i \otimes \tilde{e}_j. \quad (5.1.39)$$

Für eine genauere Definition verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur zur linearen Algebra, z.B., [5]. Auf den Vektorräumen seien darüberhinaus lineare Abbildungen $A : V \rightarrow V$ und $B : W \rightarrow W$ gegeben, welche auf dem Tensorprodukt gemäß

$$A \otimes B : V \otimes W \rightarrow V \otimes W, \quad (A \otimes B)(v \otimes w) = Av \otimes Bw \quad (5.1.40)$$

wirken. Das Skalarprodukt auf V und W induziert ein Skalarprodukt auf $V \otimes W$,

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle_V \langle w_1 | w_2 \rangle_W. \quad (5.1.41)$$

Kehren wir zurück zum allgemeinen Darstellungsraum $V_{\mathcal{D}}$ der Darstellungen der $\mathfrak{so}(3)$: Wie man sich leicht überzeugt, kann der Raum der verallgemeinerten Vektorfelder, $H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$, d.h. der Abbildungen $v : \mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}$, als *Tensorprodukt* geschrieben werden,

$$H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}}) = V_{\mathcal{D}} \otimes H(\mathbb{R}^3). \quad (5.1.42)$$

Beispielsweise kann man ein Spinorfeld

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (5.1.43)$$

schreiben als

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \psi_+(\mathbf{x}) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \psi_-(\mathbf{x}), \quad (5.1.44)$$

worin die Zweier-Spinoren den 2-dimensionalen Darstellungsraum zu $s = 1/2$ aufspannen.

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Ein allgemeines Feld $\nu(\mathbf{x}) \in H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$ transformiert dann unter $g \in \text{SO}(3)$ gemäß

$$g : \nu(\mathbf{x}) \mapsto U_g \nu(\mathbf{x}), \quad (5.1.45)$$

wobei

$$U_g = \mathcal{D}_g \otimes T_g, \quad (5.1.46)$$

mit $\mathcal{D}_g : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ und $T_g : H(\mathbb{R}^3) \rightarrow H(\mathbb{R}^3)$. Dies bedeutet letztlich, wie oben eingeführt, dass

$$U_g \nu(\mathbf{x}) = \mathcal{D}_g \nu(R_g^{-1} \mathbf{x}). \quad (5.1.47)$$

Auf der Grundlage der obigen Überlegungen gelangen wir zu einer neuen Charakterisierung des Spin: Der Spinoperator \mathbf{S} ist definiert als Generator der \mathcal{D}_g . Infinitesimal gilt:

$$\begin{aligned} U_g &\cong \left(\mathbb{1}_{V_{\mathcal{D}}} - \frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} \right) \otimes \left(\mathbb{1}_{H(\mathbb{R}^3)} - \frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} \right) \\ &= \mathbb{1}_{V_{\mathcal{D}} \otimes H} - \frac{i}{\hbar} \phi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H) - \frac{i}{\hbar} \phi (\mathbb{1}_V \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) \\ &\cong \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}, \end{aligned} \quad (5.1.48)$$

mit dem

Gesamtdrehimpuls-Operator

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes \mathbf{L} \equiv \mathbf{S} + \mathbf{L}. \quad (5.1.49)$$

Die Notation $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ist gängig, aber ungenau. Da \mathbf{S} und \mathbf{L} auf unterschiedlichen Räumen wirken, ist

$$“[\mathbf{S}, \mathbf{L}]” = [\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \mathbf{L}] = 0 \quad (5.1.50)$$

und ebenso

$$“[\mathbf{S}, \mathbf{x}]” = [\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \hat{\mathbf{x}}] = 0, \quad [\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \hat{\mathbf{p}}] = 0, \quad (5.1.51)$$

während

$$\begin{aligned} “[J_i, J_j]” &= [S_i \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes L_i, S_j \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes L_j] \\ &= [S_i \otimes \mathbb{1}_H, S_j \otimes \mathbb{1}_H] + [\mathbb{1}_V \otimes L_i, \mathbb{1}_V \otimes L_j] \\ &= [S_i, S_j] \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes [L_i, L_j] \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \{S_k \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes L_k\} \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k. \end{aligned} \quad (5.1.52)$$

Spin und Bahndrehimpuls genügen jeweils separat den Lie-Klammer-Relationen der $\mathfrak{so}(3)$,

$$[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \quad \text{und} \quad [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k. \quad (5.1.53)$$

Die \mathbf{S}^2 -Quantenzahl s wird als *Spin des Feldes* bezeichnet.

Wir fassen kurz die in diesem Abschnitt eingeführten Rechenregeln für die Behandlung von Tensorprodukten von Spin- und Ortseigenzuständen zusammen:

Tensorprodukte in Spin-1/2-Feldern (-Wellenfunktionen)

- Als Basis unseres Zustandsraumes wählen wir

$$|\mathbf{x}, \uparrow\rangle \equiv |\mathbf{x}\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\mathbf{x}, \downarrow\rangle \equiv |\mathbf{x}\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (5.1.54)$$

- Damit können wir die Gesamtwellenfunktion schreiben als

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \equiv (\langle \mathbf{X} | \otimes \mathbb{1}^{(s)}) | \alpha \rangle, \quad (5.1.55)$$

mit $\mathbb{1}^{(s)} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$, und wir erhalten

$$\Psi(\mathbf{x}) = |\uparrow\rangle \underbrace{\langle \mathbf{x}, \uparrow | \alpha \rangle}_{=\psi_+(\mathbf{x})} + |\downarrow\rangle \underbrace{\langle \mathbf{x}, \downarrow | \alpha \rangle}_{=\psi_-(\mathbf{x})} = \psi_+(\mathbf{x}) |\uparrow\rangle + \psi_-(\mathbf{x}) |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.56)$$

- Die Normierung der Wellenfunktion erhalten wir aus

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int d^3x |\psi_+(\mathbf{x})|^2 + \int d^3x |\psi_-(\mathbf{x})|^2, \quad (5.1.57)$$

wobei $\int d^3x |\psi_{\pm}(\mathbf{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen mit $s_z = \pm\hbar/2$ im Volumen V zu finden.

5.1.3. Die Notwendigkeit des Spins in der relativistischen Physik und seine Bedeutung für die Quantenstatistik von Vielteilchensystemen

Der Spin wird in der nichtrelativistischen Quantenmechanik ad hoc eingeführt und wirkt als Vervollständigung der Klasse von Darstellungen der Rotationssymmetrie. Die empirischen Beobachtungen im Stern-Gerlach-Experiment legten seine bis dahin unbekannte Existenz nahe. Darüberhinaus ist Spin jedoch auch aus mathematischer Sicht ein notwendiger Stein im Gebäude der Theoretischen Physik geworden: Die Erweiterung der Quantenmechanik auf Konsistenz mit der Speziellen Relativitätstheorie führt im Rahmen der Dirac-Theorie zum Spin, und die Forderung nach kombinierter Erhaltung unter Umkehr von Ladung, Parität und Zeitrichtung hat zur Folge, dass sich Vielteilchensysteme mit ganz- bzw. halbzahligen Spin statistisch sehr unterschiedlich verhalten.

- **Dirac-Theorie**

Paul Dirac zeigte, dass sich der Gesamtdrehimpuls eines relativistischen Teilchens, etwa eines Elektrons, aus dem Bahndrehimpuls und einem weiteren Anteil mit den Eigenschaften des Spins zusammensetzen muss,

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (5.1.58)$$

damit die an die Stelle der Schrödinger-Gleichung tretende Gleichung für die Eigenenergien eines Systems relativistisch invariant ist [29]. Unter der Annahme, dass Energie und Impuls beide linear in dieser Gleichung vorkommen, konnte Dirac zeigen, dass sie eine lineare Eigenwert-Differentialgleichung für eine 4-komponentige Wellenfunktion sein muß: Diese *Dirac-Gleichung*

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

für ein relativistisches Teilchen der Ruhemasse m hat die Form

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi(x), \quad (5.1.59)$$

mit Lichtgeschwindigkeit c , 4-Vektor $x = (x^0, \mathbf{x}) = (t, \mathbf{x})$ und den Dirac-Matrizen

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.1.60)$$

mit Pauli-Matrizen σ_i . Diese Dirac-Matrizen bilden eine Basisdarstellung einer Algebra, der Dirac-Algebra, welche mathematisch einer Clifford-Algebra [30] entspricht, der $Cl_{1,3}(\mathbb{C})$. Wie z.B. die komplexen Zahlen durch eine Clifford-Algebra aus den reellen generiert werden $\mathbb{C} \simeq Cl_{1,0}(\mathbb{R})$, stellt sie als "geometrische Algebra" [31] eine Komplexifizierung ihrer reellen Variante, $Cl_{1,3}(\mathbb{R})$, dar, welche eine koordinatenfreie, geometrische Darstellung der klassischen relativistischen, also Poincaré-invarianten Physik ermöglicht.

Die Dirac-Gleichung führt in der nichtrelativistischen Näherung gegenüber mc kleiner Impulse p zurück auf die 2-komponentige Schrödinger-Gleichung für Pauli-Spinoren, die Pauli-Gleichung, auf die wir später, im Zusammenhang mit der Ankopplung an das elektromagnetische Feld, noch zurückkommen werden. Dirac hatte sie hergeleitet, um das Problem der Klein-Gordon-Gleichung,

$$(c^{-2}\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2)\psi(x), \quad (5.1.61)$$

welche ebenfalls relativistisch invariant ist, aber zweiter Ordnung in Zeit und Raum, zu umgehen, dass der erhaltene Strom j^μ dieser Gleichung zu einer Ladung $\int d^3x j^0$ führt, welche nicht positiv definit ist und damit nicht die Forderung an eine Wahrscheinlichkeitsdichte erfüllt. Dieses Problem tritt nämlich für die Dirac-Gleichung nicht auf, für die gilt $j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = |\psi|^2$, wie für die Schrödinger-Wellenfunktion, da $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$. Der Grund für diese Diskrepanz ist, dass die erhaltene Ladung der Klein-Gordon-Gleichung die Wahrscheinlichkeitsdichten von Teilchen *und* Antiteilchen einbezieht und voneinander abzieht, $j_{KG}^0 = |\psi|^2 - |\bar{\psi}|^2$, worin der letzte Term die Dichte der Antiteilchen bezeichnet. Die Dirac-Gleichung versieht die "unteren" Komponenten ψ_3 und ψ_4 des vierkomponentigen Spinors mit einem zusätzlichen Minuszeichen und zählt effektiv die Dichte der Teilchen plus die der "Löcher" im sogen. Fermi-See, welcher die Möglichkeit repräsentiert, eine beliebige Zahl von Antiteilchen zu erzeugen. Letztlich repräsentiert somit auch hier j^0 eine lokale Ladung, also die Menge an Teilchen und Antiteilchen, nur, dass sie sie jeweils nicht mit ihrer Ladungsquantenzahl gewichtet.

Der Fermi-See wies einen Weg heraus aus der Problematik, dass das Energiespektrum der Dirac-Gleichung nach unten unbeschränkt ist. Gemäß Dirac's Theorie sind diese Eigenzustände negativer Energie im Grundzustand (Vakuum) vollständig gefüllt, und Fehlstellen in diesem "See", also "Löcher", stellen Antiteilchen dar, welche wiederum positive Energie aufweisen.

• Spin-Statistik-Theorem

Markus Fierz (1939) [32] und Wolfgang Pauli (1940) [33] fanden theoretische Begründungen für die Existenz und Charakterisierung des Spins auf der Grundlage der diskreten Symmetrien

C = Ladungskonjugation,

P = Parität,

T = Zeitumkehrinvarianz,

und der Voraussetzung der Erhaltung der kombinierten Symmetrie CPT, dass Teilchen mit ganzzahligem Spin der Bose-Einstein- und Teilchen mit halbzahligem Spin der Fermi-Dirac-Statistik

genügen.³ Diese Statistiken beruhen insbesondere auf der Symmetrie bzw. Antisymmetrie einer Wellenfunktion $\psi(x_1, x_2)$ zweier Teilchen an den Positionen x_1 und x_2 unter Vertauschung:

$$\text{BE: } \psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1),$$

$$\text{FD: } \psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1).$$

Sind die beiden Teilchen ununterscheidbar, also für sich genommen durch dieselbe Einteilchen-Wellenfunktion $\phi(x)$ beschrieben, so hat die Quantenstatistik zur Konsequenz, dass

$$\text{BE: } \psi(x_1, x_2) = \phi(x_1)\phi(x_2), \quad (\text{Produktzustand identischer Bosonen});$$

$$\text{FD: } \psi(x_2, x_1) = 0, \quad (\text{Paulisches Ausschließungs-Prinzip}).$$

Man unterscheidet also, ihrem Transformationsverhalten nach:

Bosonische Felder	Fermionische Felder
$s \in \mathbb{Z}$	$s \in (2\mathbb{Z} + 1)/2$
$s = 0$: Skalarfeld	$s = 1/2$: Spinorfeld
$s = 1$: Vektorfeld	
\vdots	\vdots

Es sei hier noch angemerkt, dass im Rahmen des *Standardmodells der Teilchenphysik* die bekannten Konstituenten der Materie, d.h., die leptonischen Elementarteilchen (Elektron, Myon, Tauon, Neutrinos) sowie die Quarks (mit Flavour u, d, c, s, t, b), durch $s = 1/2$ -Fermionen beschrieben werden. Die Austauscheteilchen der Wechselwirkungen, also die Photonen, die W^\pm - und Z-Bosonen, sowie die Gluonen, sind sind ($s = 1$)-Bosonen, daher auch Vektorbosonen genannt. Darüberhinaus gelang am LHC im Jahr 2012 der Nachweis des Higgs-Bosons, welches durch ein ($s = 0$)-Skalarfeld beschrieben ist.

³Eine umfangreiche Diskussion dieses sogen. *Spin-Statistik-Theorems* geben Ray F. Streater und Arthur S. Wightman in ihrem Werk: *PCT, Spin & Statistics, and All That* (Addison Wesley, New York, 1980) [34].

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

• Vielteilchensysteme

Wir skizzieren hier noch kurz die Verallgemeinerung der bisher betrachteten Beschreibung eines einzelnen Teilchens durch einen Zustand im Hilbertraum auf eine Beschreibung mittels Zuständen und Operatoren, welche eine beliebige aber fest gewählte Teilchen erfasst. Dies möge den Hintergrund der soeben eingeführten Wellenfunktionen für zwei ununterscheidbare Teilchen etwas weiter beleuchten.

Gegeben sei ein Hilbertraum $\mathcal{H}^{(N)}$, welcher N – unterschiedliche oder ununterscheidbare – Teilchen beschreibe, deren Zustände Elemente der jeweiligen Hilberträume \mathcal{H}_i , $i = 1, \dots, N$ seien. Dann ist

$$\mathcal{H}^{(N)} = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (5.1.62)$$

das direkte oder Tensorprodukt der Einteilchen-Hilberträume, und jeder Zustand $|\psi^{(N)}\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}$ läßt sich als direktes Produkt,

$$|\psi^{(N)}\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\psi_i\rangle, \quad (5.1.63)$$

der Einteilchen-Zustände $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ schreiben.

Auf dieser Grundlage führen wir Basiszustände $|x_i\rangle$ der Ortsoperatoren \hat{x}_i für Teilchen i ein und konstruieren daraus eine Basis $\{|x_1, \dots, x_N\rangle\}$ im N -Teilchenraum $\mathcal{H}^{(N)}$,

$$|x_1, \dots, x_N\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |x_i\rangle. \quad (5.1.64)$$

Mit Hilfe dieser Basiszustände ist die Ortsdarstellung eines Zustands im N -Teilchen Raum eine N -Teilchen-Wellenfunktion

$$\psi^{(N)}(x_1, \dots, x_N) = \langle x_1, \dots, x_N | \psi^{(N)} \rangle. \quad (5.1.65)$$

Wir betrachten eine beliebige Orthonormalbasis $\{|v_i\rangle\}$ im i -ten Einteilchenraum, welche für alle $i = 1, \dots, N$ die gleiche Dimension und die gleichen Zustände enthalte. Der gesamte Zustand von N Teilchen kann damit in der Basis der direkten Produkte geschrieben werden:

$$\left\{ |v_1, \dots, v_N\rangle := |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle \otimes \dots \otimes |v_N\rangle \right\}. \quad (5.1.66)$$

Für ununterscheidbare Bosonen (Fermionen) muss die Basis (5.1.66) für beliebige $i \neq j \in \{1, \dots, N\}$ folgende Bedingung erfüllen:

$$|\dots, \nu_j, \dots, \nu_i, \dots\rangle_{\pm} = P_{ij} |\dots, \nu_i, \dots, \nu_j, \dots\rangle_{\pm} = \pm |\dots, \nu_i, \dots, \nu_j, \dots\rangle_{\pm}. \quad (5.1.67)$$

Hierbei ist P_{ij} der Permutationsoperator, der die Teilchen i und j vertauscht. Damit (5.1.67) erfüllt ist, muss die bosonische (fermionische) Basis als vollständig (anti)symmetrisiertes Produkt definiert werden:

$$|i_1, \dots, i_N\rangle_{\pm} := S_{\pm} |i_1, \dots, i_N\rangle := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\{P\}} (\pm)^P P |i_1, \dots, i_N\rangle. \quad (5.1.68)$$

$\{P\}$ bezeichnet alle Elemente der Permutationsgruppe von N ganzen Zahlen,⁴ die aufgrund ihrer Gruppeneigenschaften als Produkte paarweiser Permutationen P_{ij} ausgedrückt werden können, siehe (5.1.67). Je nachdem, ob die Anzahl dieser paarweisen Permutationen gerade oder ungerade ist, ist

$$(\pm 1)^P := \begin{cases} +1, & \text{wenn die Anzahl der paarweisen Permutationen gerade ist.} \\ \pm 1, & \text{wenn die Anzahl der paarweisen Permutationen ungerade ist.} \end{cases} \quad (5.1.69)$$

Da die Permutationsgruppe $\mathcal{P} = \{P\}$ abgeschlossen ist, gilt für $P, P' \in \mathcal{P}$:

$$P P' = Q \in \mathcal{P}. \quad (5.1.70)$$

Daher folgt aus (5.1.68), dass

$$P S_{\pm} = (\pm 1)^P S_{\pm}. \quad (5.1.71)$$

Dies beweist, dass die Zustände (5.1.68) bosonische (fermionische) Permutationssymmetrie besitzen,

$$P |i_1, \dots, i_N\rangle_{\pm} = (\pm)^P |i_1, \dots, i_N\rangle_{\pm}. \quad (5.1.72)$$

Abschließend noch einmal zurück zur “Frage nach dem Sein”: Was ist also der Spin?

Spin bedeutet, dass ein Feld ein nichttriviales Transformationsverhalten bezüglich der $SO(3)$ in dem in diesem Abschnitt diskutierten Sinne aufweist.

Solche Felder haben kein klassisches Analogon – auf den ersten Blick zumindest. Es kann jedoch gezeigt werden, dass das Spin-Statistik-Theorem zwar lokale Poincaré-Invarianz benötigt, wie durch die spezielle Relativitätstheorie gegeben, jedoch nicht notwendigerweise die Quantenmechanik voraussetzt. Für ein klassisches Spinorfeld benötigt man Grassmann-Variable, d.h. antikommutierende Größen wie sie zur Beschreibung bestimmter Kink-Lösungen nichtlinearer Wellengleichungen dienen können.⁵

Die oben skizzierten Problemfelder, welche eine relativistische Verallgemeinerung der Quantenmechanik mit sich bringen, werden erst durch die (relativistische) Quantenfeldtheorie beseitigt, welche zusätzlich berücksichtigt, dass bei relativistischen Energien, also Gesamtenergien größer als die Ruhemasse der möglichen Teilchenanregungen, die Gesamtteilchenzahl nicht mehr erhalten ist.

In der Quantenfeldtheorie wird durch die sogen. “2. Quantisierung” der Hilbertraum zu einem Fockraum erweitert, welcher eine Summe von Produkten (5.1.62) beliebig vieler 1-Teilchen-Hilberträume darstellt,

$$\mathcal{F} = \{0\} \oplus \mathcal{H} \oplus (\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}) \oplus (\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}) \oplus \dots \quad (5.1.73)$$

Auf diesem Raum operieren Feldoperatoren, welche ähnlich den Leiteroperatoren des Harmonischen Oszillators Teilchen erzeugen und vernichten und somit die verschiedenen Unterräume $\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$ unterschiedlicher Gesamtteilchenzahl miteinander verbinden. In der Quantenfeldtheorie gibt es dann separate

⁴Dies ist die symmetrische Gruppe S_N .

⁵Siehe z.B. D. Finkelstein and J. Rubinstein, ‘Connection between Spin, Statistics & Kinks’ [35]; sowie J. A. Morgan, Spin & Statistics in classical Mechanics [36].

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Operatoren für unterscheidbare Teilchen bzw. Antiteilchen, und deren (Anti-)Kommutator stellt entsprechend der des HO die Quantisierungsvorschrift dar, welche zwischen Bosonen und Fermionen differenziert. Das o.g. Standardmodell ist also durch einen Satz fundamentaler, operatorwertiger Quantenfelder charakterisiert, welche den empirisch beobachteten Elementarteilchen-Freiheitsgraden entsprechen, für die Austauschteilchen in voller Analogie zu den klassischen Feldern etwa der Elektrodynamik.

5.2. Addition von Drehimpulsen

5.2.1. Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Wie im vorangegangenen Abschnitt diskutiert, ist der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens mit Spin \mathbf{S} und Bahndrehimpuls \mathbf{L} definiert als

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{L} \equiv \mathbf{S} + \mathbf{L}, \quad (5.2.74)$$

wobei die eingefügte Schreibweise mittels Tensorprodukten daran erinnern soll, dass \mathbf{S} und \mathbf{L} auf unabhängige Freiheitsgrade wirken. Insbesondere kommutieren sie deshalb als Operatoren,

$$[\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0. \quad (5.2.75)$$

Als Basis für allgemeine Zustände bietet sich die Eigenbasis von $\{\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z\}$ an:

$$\{|l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle\} \equiv \{|l, s, m, s_z\rangle\}. \quad (5.2.76)$$

Alternativ charakterisieren wir einen Zustand durch die entsprechenden Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} besitzt wegen $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ alle Eigenschaften eines Drehimpulses. Insbesondere erfüllen

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{S}\mathbf{L} \quad \text{und} \quad (5.2.77)$$

$$J_z = L_z + S_z \quad (5.2.78)$$

die $\mathfrak{su}(2)$ -Kommutatorrelation

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0. \quad (5.2.79)$$

Wir benötigen zusätzlich zu \mathbf{J}^2 und J_z zwei weitere kommutierende Operatoren zur Charakterisierung eines Zustandes. L_z und S_z sind wegen

$$[\mathbf{J}^2, L_z] \neq 0 \neq [\mathbf{J}^2, S_z] \quad (5.2.80)$$

nicht geeignet, aber

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2] = 0 = [\mathbf{J}^2, \mathbf{S}^2], \quad (5.2.81)$$

was wir leicht durch explizites Nachrechnen prüfen können. Wir können damit jeden Zustand alternativ auch durch dessen Eigenwerte bezüglich der dann vollständigen Menge

$$\{\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2\} \quad (5.2.82)$$

kommutierender, also kompatibler Operatoren charakterisieren. Die entsprechenden Eigenzustände erfüllen die folgenden Relationen:

$$\mathbf{J}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.83)$$

$$J_z |j, j_z, l, s\rangle = \hbar j_z |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.84)$$

$$\mathbf{S}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.85)$$

$$\mathbf{L}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |j, j_z, l, s\rangle. \quad (5.2.86)$$

Auf dieser Grundlage betrachten wir allgemeiner zwei unabhängige Drehimpulsoperatoren $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$, welche auf unabhängige Freiheitsgrade wirken. Ein Beispiel hierfür wären zwei verschiedene Teilchen mit ihrem jeweiligen Spin:

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{S}_1 \quad \text{und} \quad \mathbf{J}_2 = \mathbf{S}_2. \quad (5.2.87)$$

Der Gesamtdrehimpuls dieses Systems ist

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{J}_2, \quad (5.2.88)$$

wobei \mathbf{J}_1 (\mathbf{J}_2) in dem Zustandsraum von Teilchen 1 (2) wirkt. Es gibt zwei verschiedene mögliche Basen in dem gesamten Zustandsraum:

- Die Eigenbasis von $\{\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{z1}, J_{z2}\}$: $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$,
- Die Eigenbasis von $\{\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2\}$: $\{|j, m, j_1, j_2\rangle\}$.

Unser Ziel ist es, einen expliziten Basiswechsel zwischen den beiden Eigenbasen zu finden. Das heißt, wir wollen $|j, m, j_1, j_2\rangle$ durch $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ ausdrücken und umgekehrt. Insbesondere stellen wir die Frage, welche Werte sich bei gegebenen j_1, j_2 für j und m ergeben. Allgemein ausgedrückt ergeben sich diese Transformationen aus

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle, \quad (5.2.89)$$

mit den *Clebsch-Gordan-Koeffizienten*

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle. \quad (5.2.90)$$

Wir werden im folgenden zwei wesentliche Zusammenhänge zwischen den Quantenzahlen finden:

- Die Entwicklung (5.2.89) bedingt die Addition der Magnetquantenzahlen:

$$m = m_1 + m_2 \quad (5.2.91)$$

- Der aus j_1 und j_2 gebildete Gesamtdrehimpuls j kann folgende Werte annehmen:

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2| \quad (5.2.92)$$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Die erste Bedingung läßt sich “in einer Zeile” nachweisen: Wegen $J_z = J_{z,1} + J_{z,2}$ gilt:

$$\langle jm_1j_2 | J_z | j_1j_2m_1m_2 \rangle = (m_1 + m_2) \langle jm_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle = m \langle jm_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle. \quad (5.2.93)$$

Das bedeutet, dass $m = m_1 + m_2$ immer dann gilt, wenn $C_{m_1m_2}^{jm} \neq 0$.

Der Beweis der möglichen Werte für j benötigt etwas mehr Aufwand:

Seien j_1, j_2 fest vorgegeben. Dann gibt es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, da m_1 und m_2 die Werte $j_1 \geq m_1 \geq -j_1$ bzw. $j_2 \geq m_2 \geq -j_2$ annehmen können. Ferner haben wir gerade gesehen, dass die Gesamt- J_z Quantenzahl eines Zustandes $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ gegeben ist durch $m = m_1 + m_2$.

Aber da $[\mathbf{J}^2, J_{z,i}] \neq 0$ ist, kann $|j_1m_1\rangle \otimes |j_2m_2\rangle$ zu verschiedenen Werten von j beitragen, d.h., in der Entwicklung von $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ bezüglich der Basis $|jm_1j_2\rangle$ treten mehrere Werte für j auf. Diese entsprechen den möglichen Werten für den Gesamtdrehimpuls.

Wir bestimmen zunächst die möglichen Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, die der Gesamt- J_z -Quantenzahl $m = m_1 + m_2$ entsprechen (o.B.d.A. sei $j_1 \geq j_2$ vorausgesetzt):

$m = m_1 + m_2$	Zustand	Anzahl
$j_1 + j_2$	$ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$	1
$j_1 + j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$	2
$j_1 + j_2 - 2$	$ j_1, j_1 - 2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 2\rangle$	3
\vdots	\vdots	\vdots
$j_1 - j_2$	$ j_1, j_1 - 2j_2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 2j_2 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 2$	\dots	$2j_2 + 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$j_2 - j_1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_2 - j_1 - 1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2$
\vdots	\vdots	\vdots
$-j_1 - j_2$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	1

Hieraus können wir die möglichen Werte für j bestimmen, indem wir fordern, dass die Menge der Zustände $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ volle Multiplets $|j, m, j_1, j_2\rangle$ ergeben muss, wobei m insbesondere zu jedem auftretenden j die $2j + 1$ Werte $j \geq m \geq -j$ annimmt.

Der maximale Wert für j ist daher $j_1 + j_2$, was dem maximalen Wert von m entspricht. Das bedeutet, dass es insgesamt $2(j_1 + j_2) + 1$ Zustände der Form

$$|j, m, j_1, j_2\rangle \quad (5.2.94)$$

gibt, für die $j = j_1 + j_2$ und $j \geq m \geq -j$ erfüllt sind.

Wir betrachten als nächstes den Wert $m = j_1 + j_2 - 1$. Hierzu gibt es die zwei in der Tabelle aufgeführten Zustands-Tensorprodukte. Eine Linearkombination dieser Zustände gehört zum Multipllett zu $j = j_1 + j_2$. Die andere muss also dem Multipllett $j = j_1 + j_2 - 1$ zugeordnet sein. Andernfalls wäre dies im Widerspruch dazu, dass sich alle $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ in volle Multipletts $|j, m, j_1, j_2\rangle$ umgruppieren lassen.

Der nächste mögliche Wert für j ist demnach $j_1 + j_2 - 1$. Diese Argumentation läßt sich in gleicher Weise fortführen, bis $j = j_1 - j_2$ erreicht ist. Ab diesem Wert nimmt die Anzahl der Zustände in einer Zeile der Tabelle nicht weiter zu. Das bedeutet, dass für $m = j_1 - j_2 - 1$ alle Zustände bereits in Multipletts mit $j \geq j_1 - j_2$ enthalten sind. Daher sind keine niedrigeren Werte für j möglich. Insgesamt gelten daher die Grenzen

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|. \quad (5.2.95)$$

Zum Abschluß überprüfen wir unser Resultat noch auf Konsistenz:

- Die Anzahl der Zustände $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ ist $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.
- Die Anzahl der Zustände $|j, m, j_1, j_2\rangle$ ist

$$\begin{aligned} \# &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \sum_{k=0}^{2j_2} 2(j_1 - j_2 + k) + 1 \\ &= (2j_2 + 1)(2(j_1 - j_2) + 1) + (2j_2 + 1)2j_2 \\ &= (2j_2 + 1)(2j_1 + 1). \quad \checkmark \end{aligned} \quad (5.2.96)$$

Mit den somit bestimmten für j , welche zur Entwicklung (5.2.89) beitragen, lassen sich die Clebsch-Gordan-Koeffizienten C_{m_1, m_2}^{jm} rekursiv bestimmen. Für eine allgemeine Behandlung verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur, beispielsweise Sakurai [37], Kapitel 3.7. Wir beschränken uns im folgenden auf zwei Beispiele, welche dieses Verfahren illustrieren: die Kopplung zweier Spin-1/2 Zustände zum Spin-Triplett bzw. Singulett, sowie die Spin-Bahn-Kopplung.

5.2.2. System aus zwei Spin-1/2 Zuständen

Betrachte zwei Teilchen mit Spin 1/2 und Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{S}_2 \equiv \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2'. \quad (5.2.97)$$

Die Basis des Tensorprodukt-Raumes ist dann

$$\{ |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \}. \quad (5.2.98)$$

Für den Gesamtspin gibt es zwei Möglichkeiten:

- $s = 1/2 + 1/2 = 1$. Dies ist das *Triplet* der Zustände $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle \text{ und } |1, -1\rangle\}$.

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

- $s = 1/2 - 1/2 = 0$. Dies ist das *Singulett*, welches nur $|0, 0\rangle$ enthält.

Wir entwickeln die Zustände $|s, s_z\rangle$ in der $|\uparrow\downarrow\rangle$ -Basis:

- $|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$, wegen $s_z = s_{1z} + s_{2z} = 1$.
- $|1, 0\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$.

Um a und b zu bestimmen, lassen wir $S^- = S_1^- \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_2^-$ auf beide Seiten der Gleichung wirken und erhalten mithilfe von (4.3.71):

$$S^- |1, 1\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, 0\rangle, \quad (5.2.99)$$

$$S^- |\uparrow\uparrow\rangle = (S_1^- \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_2^-) |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (5.2.100)$$

Daraus folgt, dass $|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$.

- $|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$, wie zuvor.
- $|0, 0\rangle = c|\uparrow\downarrow\rangle + d|\downarrow\uparrow\rangle$.

Aus der Orthogonalität der Zustände folgt, dass

$$0 = \langle 0, 0 | 1, 1 \rangle \quad \text{und} \quad 1 = \langle 0, 0 | 0, 0 \rangle. \quad (5.2.101)$$

Daraus erhalten wir den Zusammenhang $|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, bis auf eine unbestimmte globale Phase, die hier per Konvention festgesetzt ist.

5.2.3. Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses aus Bahndrehimpuls und Spin ($s = 1/2$)

Abschließend bestimmen wir die möglichen Werte von j für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ aus Bahndrehimpuls und Spin-1/2 Zustand, und geben die zugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten an:

- $j = l + 1/2$: Für $l \geq 0$ und $l + \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l + \frac{1}{2})$ lauten die Zustände

$$\begin{aligned} |l + 1/2, j_z\rangle &= \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle, \end{aligned} \quad (5.2.102)$$

welche sich für $l = 0$ auf $|1/2, \pm 1/2\rangle = |0, 0; 1/2, \pm 1/2\rangle$ reduzieren.

- $j = l - 1/2$: Für $l > 0$ und $l - \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l - \frac{1}{2})$ lauten die Zustände:

$$\begin{aligned} |l - 1/2, j_z\rangle &= -\sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (5.2.103)$$

Die Koeffizienten für $|l + 1/2, j_z\rangle$ lassen sich, wie im vorigen Beispiel, durch iterative Anwendung von $J_- = L_- + S_-$ auf

$$|l + 1/2, l + 1/2\rangle = |l, l\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \quad (5.2.104)$$

berechnen, wie man durch vollständige Induktion beweisen kann.⁶ Die Koeffizienten für $|l - 1/2, j_z\rangle$ folgen aus der Orthonormalität der Zustände, $\langle l + 1/2, j_z | l - 1/2, j_z \rangle = 0$, $\langle l - 1/2, j_z | l - 1/2, j_z \rangle = 1$.

5.3. Kopplung an das elektromagnetische Feld

Im folgenden, zweiten Teil dieses Kapitels wollen wir die Kopplung von im Rahmen der Quantenmechanik beschriebenen Teilchen an elektromagnetische Felder allgemeiner einführen und besprechen. Über die bereits kennengelernten Effekte der Coulombkraft eines Atomkerns auf ein einzelnes Elektron und eines inhomogenen Magnetfeldes auf das magnetische Moment eines Teilchens mit Bahndrehimpuls und/oder Spin hinaus werden wir allgemeine elektromagnetische Felder zulassen, so wie wir sie aus der klassischen Elektrodynamik kennen. Diese elektrischen und magnetischen Vektorfelder, einschließlich des elektrostatischen und des Vektorpotentials, werden wir dabei, wie zuvor etwa das Potential $V(\mathbf{x})$, als klassische Felder behandeln. Eine darüber hinaus gehende Beschreibung, bei der auch die (dynamischen) Feldfreiheitsgrade quantisiert werden, liefert Ihnen später die Quantenelektrodynamik, eine Quantenfeldtheorie. Im Rahmen unserer, im Bereich der elektromagnetischen Freiheitsgrade klassischen Beschreibung werden wir jedoch bereits als zentrales Element an das Eichprinzip erinnern und dieses auf die Kopplung an die Wellenfunktionen der geladenen Teilchen erweitern.⁷

5.3.1. Schrödinger-Gleichung im elektromagnetischen Feld

Unser Ziel ist die Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung für ein quantenmechanisches Teilchen. Zunächst erinnern wir an die aus der klassischen Elektrodynamik bekannten Felder

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\partial_t\mathbf{A} - \nabla\phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (5.3.105)$$

wobei $\phi(\mathbf{x}, t)$ das skalare Potential und $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ das Vektorpotential ist. Die klassische Hamiltonfunktion für ein Teilchen mit Ladung e und Masse m im elektromagnetischen Feld lautet

$$H = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right]^2 + e\phi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.106)$$

Während wir \mathbf{p} als kanonischen Impuls bezeichnen, nennt man

$$m\dot{\mathbf{x}} = m\partial_{\mathbf{p}}H \equiv \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (5.3.107)$$

den kinetischen Impuls. Mit seiner Hilfe können wir die Hamiltonfunktion in der kanonischen Weise ausdrücken:

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{\Pi}^2 + e\phi. \quad (5.3.108)$$

⁶Zunächst beweist man die Relation jeweils für den Zustand $|l \pm 1/2, j \pm 1/2\rangle$ explizit durch Anwendung von J_- . Dann zeigt man durch Anwenden von J_- auf den Zustand $|l \pm 1/2, j_z\rangle$ für allg. j_z , dass die beiden Relationen (5.2.102), (5.2.102), wenn sie für j_z zutreffen, dann auch für $j_z - 1$ korrekt sind.

⁷Die Darstellung hat im folgenden eine etwas andere Reihenfolge, als die in der Vorlesung, ist aber genauso möglich. Dies gibt einen Eindruck davon, wie man vorgehen kann, wenn man die (lokale) Eichinvarianz-Forderung nicht an den Anfang stellt, wie das auch eher der historischen Entwicklung entspricht.

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Quantenmechanisch werden \mathbf{x} und \mathbf{p} zu Operatoren erhoben. In der Ortsdarstellung ist $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ und es ergibt sich die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{2mc}(\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2(\mathbf{x}, t) + e\phi(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.109)$$

Man könnte sich hier fragen, warum der kanonische und nicht der kinetische Impuls bei der Quantisierung Bestandteil des Kommutators $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ wird. Wir können uns aber dann leicht davon überzeugen, dass das klassische Feld \mathbf{A} mit dem Ortsoperator kommutiert und somit kein Unterschied zwischen den beiden Möglichkeiten verbleibt. Die Addition des Vektorpotentials zu \mathbf{p} läßt sich überdies auch als Translation im Impulsraum um einen (lokal festgelegten) Wert auffassen, welcher also lediglich die Zeit und den Ortsoperator beinhaltet, und der Kommutator muß grundsätzlich invariant unter diesen sein, so wie es die Heisenberg-Algebra auch vorgibt. Die Schrödinger-Gleichung (5.3.109) läßt sich mit Hilfe von

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t)[\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)] + \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.110)$$

durch Fixierung in Coulomb-Eichung, $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0$ (Feld transversal zur räumlichen Änderung), vereinfachen zur

Schrödinger-Gleichung eines geladenen Teilchens im e.m. Feld,

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{mc}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \right] \psi. \quad (5.3.111)$$

Diese Gleichung beschreibt wie zuvor die Dynamik des durch ψ beschriebenen Teilchens im Rahmen der Quantenmechanik, jetzt angekoppelt an ein äußeres elektromagnetisches Feld, welches in Form des skalaren und vektoriellen Eichpotentials, (ϕ, \mathbf{A}) , letzteres in Coulomb-Eichung eingeht, in verschiedenen Termen, welche, in unserer bisherigen Sprechweise, skalare, nur Feld, aber auch impulsabhängige Potentiale darstellen. Diese Ankopplung wird quantitativ durch die Kopplungskonstante e , also die elektrische Ladung des Teilchens, bestimmt.

5.3.2. Magnetische Momente und Pauli-Gleichung

Als konkrete Anwendung der oben eingeführten Schrödinger-Gleichung diskutieren wir zunächst das magnetische Moment des geladenen Teilchens. Wir erinnern uns, dass im Rahmen der Multipolentwicklung in der Elektrodynamik Wechselwirkungen zwischen statischen wie dynamischen Ladungsverteilungen und dem elektromagnetischen Feld durch Ladungen, Dipolmomente und höhere Multipolmomente beschrieben werden. Hier wollen wir unser Augenmerk auf das Dipolmoment des Teilchens setzen, welches linear und in Form eines Skalarprodukts an das Magnetfeld koppelt. Dazu nehmen wir ein konstantes \mathbf{B} -Feld an, d.h. das Vektorpotential ist gegeben durch

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} \times \mathbf{B}), \quad (5.3.112)$$

so dass

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}. \quad (5.3.113)$$

Damit können wir den zweiten Term des obigen Hamilton-Operators schreiben als

$$\begin{aligned}
 \frac{i\hbar e}{mc}(\mathbf{A} \cdot \nabla)\psi &= \frac{1}{2} \frac{i\hbar e}{mc}(\mathbf{B} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi \\
 &= \frac{i\hbar e}{2mc}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla)\psi \\
 &= -\frac{e}{2mc}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}\psi \\
 &\equiv -\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} \cdot \mathbf{B}\psi.
 \end{aligned} \tag{5.3.114}$$

$\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} = (e/2mc)\mathbf{L}$ stellt also das magnetische Moment für den Bahndrehimpuls dar, wie wir es bei der Diskussion des Stern-Gerlach-Experiment bereits vorweggenommen hatten. Man schreibt

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = \text{Bohrsches Magneton}. \tag{5.3.115}$$

Unsere Herleitung basiert jedoch auf der Annahme eines konstanten, homogenen Magnetfelds. Darüberhinaus ist zu beachten:

- Für $\mathbf{B} = \mathbf{B}(z)$ ergeben sich höhere Korrekturen zum Term $-\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} \cdot \mathbf{B}\psi$ entsprechend der Multipolentwicklung der Elektrodynamik.
- Der quadratische Term $(e^2/2mc^2)\mathbf{A}^2$ ist in der Regel, d.h. für hinreichend schwache Feldstärken, relativ zu $-\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} \cdot \mathbf{B}$ vernachlässigbar.
- $-(\mu_B/\hbar)\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ ist der Bahndrehimpuls-Beitrag zum Paramagnetismus⁸ ($\chi_r > 0$), $(e^2/2mc^2)\mathbf{A}^2$ der Beitrag zum (Langevin) Diamagnetismus ($\chi_r < 0$),

$$\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi = \frac{e^2}{8mc^2}(\mathbf{x} \times \mathbf{B})^2\psi = \frac{e^2}{8mc^2}(\mathbf{x}^2\mathbf{B}^2 - [\mathbf{x} \times \mathbf{B}]^2)\psi \stackrel{\mathbf{B}=\mathbf{B}\mathbf{e}_z}{=} \frac{e^2\mathbf{B}^2}{8mc^2}(x^2 + y^2)\psi. \tag{5.3.116}$$

Wir vergleichen die Größenordnungen:

$$\frac{e^2/(8mc^2)\langle x^2 + y^2 \rangle \mathbf{B}^2}{e/(2mc)\langle L_z \rangle \mathbf{B}} \simeq \frac{ea_B^2 \mathbf{B}}{4\hbar c} = \frac{\alpha}{4} \frac{\mathbf{B}}{e/a_B^2} \simeq 3 \cdot 10^{-9} \mathbf{B} \text{ Gauss}^{-1}, \tag{5.3.117}$$

wobei wir $\langle x^2 \rangle \simeq \langle y^2 \rangle \sim a_B^2$ und $\langle L_z \rangle \sim \hbar$ genähert haben. Für typische Felder der Stärke $B \sim 10^5$ Gauss ist dieses Verhältnis noch klein.

Unsere bisherige Betrachtung berücksichtigt nur die Orts- und Impulsfreiheitsgrade eines Teilchens. Wir haben allerdings festgestellt, dass Teilchen mit Spin noch weitere Freiheitsgrade besitzen. Diese Freiheitsgrade verhalten sich mathematisch wie die Freiheitsgrade eines inneren Drehimpulses. Dass diese auch physikalisch einen Drehimpuls darstellen, zeigt sich daran, dass der Spin eine weitere Quelle des magnetischen Moments liefert,

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} + \boldsymbol{\mu}_{\text{Spin}}, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}, \tag{5.3.118}$$

mit dem Bohr-Magneton μ_B , (5.3.115), und dem sogenannten gyromagnetischen oder Landé-Faktor g als zusätzliche multiplikative Konstante. Die Form des Kopplungsterms (5.3.118) ist aus entsprechend der Dipol-Kopplung in der Multipolentwicklung naheliegend und, wie etwa durch das Stern-Gerlach-Experiment, auch empirisch untermauert. In der nicht-relativistischen Quantenmechanik ist diese Form

⁸Für $\chi_r > 0$ ist $\mu_r = 1 + \chi_r > 1$ (Paramagnetismus), während für $\chi_r < 0$ folgt, dass $\mu_r < 1$ (Diamagnetismus).

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

allerdings nicht mehr als ein plausibles Postulat, das nicht a priori herzuleiten ist. Insbesondere g nicht von vorneherein festgelegt und stellt in der nicht-relativistischen Quantenmechanik einen phänomenologischen Parameter dar. Experimentell beobachtet man für Elektronen $g \simeq 2$.

Die relativistisch-quantenmechanische Dirac-Theorie des Spin-1/2-Teilchens gestattet die Herleitung dieses Spin-magnetischen Moments für Elektronen aus der relativistischen Version der Schrödinger-Gleichung, der Dirac-Gleichung. Dies ergibt zunächst $g = 2$, in guter Übereinstimmung mit dem Stern-Gerlach-Experiment. Im nicht-relativistischen Limes resultiert, aus der Dirac-Gleichung, eine zweikomponentige Schrödinger-Gleichung für ein Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld, die

Pauli-Gleichung

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \right] \mathbb{1} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} - \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}, \quad (5.3.119)$$

wofür wir $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ eingesetzt haben und worin ψ_{\pm} die sogen. oberen (unteren) Komponenten des Pauli 4-er Spinors sind, jeweils 2-Spinoren.

Bemerkungen:

- In der Quantenelektrodynamik (QED) ergeben sich höhere Korrekturen zu g , welche sich perturbativ als (asymptotische) Potenzreihe in α schreiben lassen:

$$g \simeq 2 \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0,32 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^2 + 1,18 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^3 + \dots \right], \quad (5.3.120)$$

mit der Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c$. Experimentell ist das anomale magnetische Moment $a_e = (g_e - 2)/2$ aktuell bis zur 12. Stelle hinter dem Komma bekannt [38],

$$a_e = 0,001\,159\,652\,180\,59(13). \quad (5.3.121)$$

QED-Korrekturen wurden bis zur Ordnung α^5 berechnet [39, 40],

$$a_e^{(\alpha^5)} = 0,001\,159\,652\,181\,643(764). \quad (5.3.122)$$

- Für das Proton ist das Magneton

$$\mu_p = \frac{e\hbar}{2m_p c} (= \mu_K) \quad (5.3.123)$$

definiert, worin $m_p \simeq 1.6726 \cdot 10^{-27}$ kg die Protonenmasse ist. Daher ist

$$\mu_p \simeq 10^{-3} \mu_B \quad (5.3.124)$$

nur etwa 1/1000 des e^- -Magnetons. Das gyromagnetische Verhältnis des stark wechselwirkenden Protons ist

$$g_p \simeq 5,6 \quad (5.3.125)$$

- Für Neutronen ist

$$\boldsymbol{\mu}_n \simeq -3,8 \mu_n \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (5.3.126)$$

mit dem Magneton $\mu_n = e\hbar/2m_n C$. Für Deuterium ist $\mu_D = 0,86 \mu_K$, das heißt $\mu_D \simeq \boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_n$. Die Spins im Deuteron sind parallel (Spin 1). Für antiparallele Spins (Singulett) gibt es keinen Bindungszustand.

Beispiel: Eine wichtige Anwendung des magnetischen Moments stellt der normale **Zeeman-Effekt** dar, der die Aufhebung der Energie-Degenerierung im Wasserstoffatom beim Anlegen eines äußeren Feldes beschreibt. Er wird in Abschnitt 6.3.1 behandelt werden.

5.3.3. Lokale Eichinvarianz und kovariante Ableitung

Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass **E**- und **B**-Felder invariant sind unter einer sogenannten Eichtransformation,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.127)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi'(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c} \partial_t \Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.128)$$

Insbesondere sind die Maxwell-Gleichungen sowie die klassische Lorentzkraft,

$$\mathbf{F} = \frac{e}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + e\mathbf{E}, \quad (5.3.129)$$

eichinvariant. Wie oben diskutiert, tragen in der Quantenmechanik **A** und ϕ zu Potential-Termen in der Schrödinger-Gleichung bei:

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.130)$$

Die Schrödinger-Gleichung beschreibt in dieser Form die Dynamik eines geladenen Teilchens in Anknüpfung an das elektromagnetische Feld. Sie macht keine Aussage über die Dynamik der Eichfelder bzw. der elektromagnetischen Felder selbst, wofür die homogenen wie inhomogenen Maxwellgleichungen sorgen. Zu letzteren tragen auf der rechten Seite die Dichte und Stromdichte der geladenen, bewegten Teilchen bei, welche sich aus den Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe von (2.3.69) bzw. (2.3.76) ergeben. Erst das gekoppelte System aus Maxwell- und Schrödinger-Gleichung beschreibt die volle Dynamik der sich im elektromagnetischen Feld bewegenden Ladungen.

Um jetzt sicherzustellen, dass auch die Schrödinger-Gleichung physikalisch eindeutige, d.h., eichinvariante Lösungen besitzt, fordern wir, dass sie eine eichunabhängige Form annimmt. Dies erzwingt eine Transformation der Wellenfunktion unter (5.3.127), (5.3.128),

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.131)$$

welche so zu wählen ist, dass die Schrödinger-Gleichung (5.3.130) nach Eichtransformation ihre Form behält,

$$i\hbar\partial_t\psi'(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) \right)^2 + e\phi'(\mathbf{x}, t) \right] \psi'(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.132)$$

Setzen wir hier die Eichtransformation (5.3.127), (5.3.128) ein, so folgt, dass

$$\left(i\hbar\partial_t - e\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda(\mathbf{x}, t) \right) \psi'(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c}\nabla\Lambda(\mathbf{x}, t) \right)^2 \psi'(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.133)$$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

für jede beliebige Wahl der Eichfelder $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ und $\phi(\mathbf{x}, t)$, der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ und der Funktion $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ erfüllt sein muss. Wir finden, dass die Gleichung genau dann invariant ist, wenn

$$\left(i\hbar\partial_t + \frac{e}{c}(\partial_t\Lambda)\right)\psi' = C i\hbar\partial_t\psi, \quad (5.3.134)$$

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c}\nabla\Lambda(\mathbf{x}, t)\right)^2\psi' = C\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi, \quad \forall\mathbf{A}, \quad (5.3.135)$$

mit einer unbestimmten Konstante C . Die Lösung der ersten Gleichung lautet

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i(e/\hbar c)\Lambda(\mathbf{x}, t)}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.136)$$

denn

$$\left(i\hbar\partial_t + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda\right)\psi' = e^{i(e/\hbar c)\Lambda(\mathbf{x}, t)}i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.137)$$

Damit gilt auch

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\nabla\Lambda\right)\psi' = e^{i(e/\hbar c)\Lambda(\mathbf{x}, t)}(-i\hbar\nabla)\psi, \quad (5.3.138)$$

womit die zweite Bedingung erfüllt ist. Unter der kombinierten

Eichtransformation

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.139)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi'(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.140)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i(e/\hbar c)\Lambda(\mathbf{x}, t)}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.141)$$

ist demnach die Schrödinger-Gleichung invariant,

$$i\hbar\partial_t\psi = H(\mathbf{A}, \phi)\psi \quad \rightarrow \quad i\hbar\partial_t\psi' = H(\mathbf{A}', \phi')\psi'. \quad (5.3.142)$$

Umgekehrt können wir auf diese Weise folgern, dass die Forderung nach lokaler Eichinvarianz der Schrödinger-Gleichung automatisch zur bekannten Kopplung an das elektromagnetische Feld führt: Wir betrachten hierzu zunächst die freie Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.143)$$

Die freie Schrödinger-Gleichung ist invariant unter einer *globalen* Phasentransformation

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i\lambda}\psi(\mathbf{x}, t), \quad \lambda \in \mathbb{R} \text{ konstant}, \quad (5.3.144)$$

also

$$i\hbar\partial_t\psi' = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\psi'. \quad (5.3.145)$$

Dies stellt eine $U(1)$ -Symmetrietransformation dar, wobei $U(1)$ die Lie-Gruppe der unitären 1×1 -Matrizen

ist,

$$\begin{aligned} U(1) &= \{c \in \mathbb{C}^{1,1} \equiv \mathbb{C} \mid c^\dagger c = \mathbb{1}\} \\ &= \{c \in \mathbb{C} \mid |c| = 1\}. \end{aligned} \quad (5.3.146)$$

Da λ konstant ist, spricht man von einer *globalen Symmetrie*. Wir erinnern uns, dass die globale U(1)-Symmetrie der Schrödinger-Gleichung gemäß des *Noether-Theorems* einen erhaltenen Strom zur Folge hat, s. Abschnitt 2.3, d.h., dann die Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte und -strom gilt.

Wir fragen uns, was geschieht, wenn wir fordern, dass die Dynamik, anstatt nur diese globale U(1)-Symmetrie aufzuweisen, invariant unter einer beliebigen, ortsabhängigen Phasentransformation ist,

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}\psi(\mathbf{x}, t), \quad g \in \mathbb{R}. \quad (5.3.147)$$

Im Falle eines solchen ortsabhängigen ‘‘Winkels’’ $\Lambda \equiv \Lambda(\mathbf{x}, t)$ spricht man von einer *lokalen Symmetrie* oder auch einer *Eichsymmetrie*. Sie erlaubt, lokal die Phase festzulegen, d.h. sie zu *eichen*, und die Ableitungen des solchermaßen geeichten Feldes berechnen sich zu

$$\partial_t \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}(\partial_t + ig\partial_t \Lambda)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.148)$$

und

$$\nabla \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}(\nabla + ig\nabla \Lambda(\mathbf{x}, t))\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.149)$$

Die Schrödinger-Gleichung in ihrer ursprünglichen Form (5.3.143) ist also nicht invariant unter einer lokalen U(1)-Transformation. Wir können allerdings eine invariante Schrödinger-Gleichung konstruieren, indem wir – im einfachsten Fall – ∂_t und $\partial_{\mathbf{x}} \equiv \nabla$ durch die sogen. eichkovarianten Differentialoperatoren \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ ersetzen, mit den lokalen U(1)-Transformationseigenschaften

$$\begin{aligned} U : \quad \mathcal{D}_t \psi(\mathbf{x}, t) &\rightarrow (\mathcal{D}_t \psi(\mathbf{x}, t))' = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_t \psi(\mathbf{x}, t), \\ U : \quad \mathcal{D}_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) &\rightarrow (\mathcal{D}_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t))' = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (5.3.150)$$

Beachte, dass aus der zweiten Gleichung insbesondere folgt, dass auch

$$(\mathcal{D}_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, t))' = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.151)$$

Wenn wir ∂_t und $\partial_{\mathbf{x}}$ durch \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ mit obigem Transformationsverhalten ersetzen, können wir auf beiden Seiten den durch die Eichtransformation eingefügten Faktor $e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}$ kürzen und erhalten somit eine invariante Gleichung.

Was sind diese kovarianten Ableitungen? Wir konstruieren zunächst \mathcal{D}_t : Aus (5.3.148) schließen wir, dass wir zu ∂_t eine Größe addieren müssen, die ihrerseits unter einer Eichtransformation transformiert. Das führt uns auf den Ansatz

$$\mathcal{D}_t = \partial_t + ig\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.152)$$

wobei unter der U(1)-Transformation gelten muss, dass

$$U : \quad \alpha(\mathbf{x}, t) \rightarrow \alpha'(\mathbf{x}, t) = \alpha(\mathbf{x}, t) - \partial_t \Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.153)$$

Auf die gleiche Weise erhalten wir

$$\mathcal{D}_{\mathbf{x}} = \partial_{\mathbf{x}} + ig\beta(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.154)$$

mit

$$U : \quad \beta(\mathbf{x}, t) \rightarrow \beta'(\mathbf{x}, t) = \beta(\mathbf{x}, t) - \nabla \Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.155)$$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Die so definierten Differentialoperatoren erfüllen die Bedingung (5.3.150). Die eichinvariante Schrödingergleichung lautet deshalb

$$i\hbar\mathcal{D}_t\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\mathcal{D}_x)^2\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.156)$$

Die Einführung der Felder $\alpha(\mathbf{x}, t)$ und $\beta(\mathbf{x}, t)$, welche lokale Freiheitsgrade darstellen, kann für die Dynamik nicht folgenlos bleiben. Tatsächlich sieht man, dass (5.3.156) genau die Bewegung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld beschreibt, falls wir die folgende Identifikation durchführen,

$$g = \frac{e}{\hbar c}, \quad \alpha(\mathbf{x}, t) = c\phi(\mathbf{x}, t), \quad \beta(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{A}(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.157)$$

womit (5.3.156) die Form (5.3.130) annimmt. Fassen wir also zusammen:

- Die Kopplung an das elektromagnetische Feld *folgt* aus der lokalen Eichung der globalen U(1)-Symmetrie der Schrödinger-Gleichung. Elektromagnetismus ist daher eine U(1)-Eichtheorie.
- Die Größen \mathcal{D}_t und \mathcal{D}_x heißen *kovariante Ableitungen*, weil $\mathcal{D}_\mu\psi$ so transformiert wie ψ .

Die Erkenntnis, dass die Eichung einer globalen Symmetrie zur Beschreibung einer Kraft führt, ist von überragender Bedeutung für die Formulierung der modernen Physik. Tatsächlich können alle vier Grundkräfte in der Natur aus diesem Eichprinzip gewonnen werden. Neben der U(1)-Symmetrie, welche zur Elektrodynamik und damit zu den elektromagnetischen Feldern, welche die Kräfte zwischen geladenen Teilchen beschreiben, sind die Eichgruppen der übrigen drei Kräfte sind hierbei die folgenden Lie-Gruppen:

$$\begin{aligned} \text{schwache Kernkraft} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe SU(2)} \\ \text{starke Kernkraft} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe SU(3)} \\ \text{Gravitation} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe SL(2, } \mathbb{C} \text{)} \end{aligned}$$

Insbesondere ist die Eichgruppe des Standardmodells der Teilchenphysik, welches den Elektromagnetismus sowie die schwache und starke Kraft beschreibt, das direkte oder Tensorprodukt $SU(3)\times SU(2)\times U(1)$.

Wir schließen dieses Kapitel mit drei weiterführenden Bemerkungen zu den Implikationen der U(1)-Symmetrie des Elektromagnetismus:

- Die **globale U(1)-Symmetrie** der freien Schrödinger-Gleichung (5.3.143) impliziert, als Aussage des *Noether-Theorems* (Emmy Noether, 1918 [23, 24]), eine lokale Erhaltungsgröße – den Wahrscheinlichkeits-4er-Strom $j(\mathbf{x}, t) = (\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{j}(\mathbf{x}, t))$, welcher der Kontinuitätsgleichung, $\partial_\mu j^\mu = 0$, also

$$\partial_t\rho = \nabla\mathbf{j} \quad (5.3.158)$$

genügt, bzw. die (global) erhaltene *Ladung* $Q = e \int d^3x \rho(\mathbf{x}, t)$, welche in der hier diskutierten Ein-Teilchen-Quantenmechanik der erhaltenen Norm der Wellenfunktion entspricht. Die aus der kontinuierlichen U(1)-Symmetrie folgende Erhaltungsgröße Q bezeichnet man daher auch als *Noether-Ladung*.

- **Additive vs. multiplikative Erhaltungsgrößen:** Kontinuierliche Symmetrien führen aufgrund des Noether-Theorems also zu lokalen bzw., integriert über den Raum, globalen Erhaltungsgrößen. Diese bezeichnet man i. allg. als *additive* Erhaltungsgrößen, da sie “im Exponenten stehen”: Der

Generator etwa der U(1)-Transformation, (5.3.147), ist proportional zur Ladung e des Teilchens, der Generator der räumlichen Translation, (1.7.161) bzw. (1.7.186), proportional zum Impuls des Teilchens. Die U(1)-Symmetrie impliziert die Erhaltung einer globalen Ladung, die Translationsinvarianz im Raum impliziert die Erhaltung des globalen Impulses, welche in dynamischen Prozessen, welche die jeweilige Symmetrie nicht verletzen, erhalten sein müssen. Da man beliebige solche Generatoren kombinieren können, addieren sich die entsprechenden Erhaltungsgrößen. Weitere Beispiele sind der Drehimpuls, der Spin, in der Teilchenphysik die Baryonzahl oder der Isospin.

Im Gegensatz dazu werden in der Teilchenphysik sogen. *multiplikative Erhaltungsgrößen* diskutiert, welche die Folge diskreter Symmetrien sind. Hierzu gehören insbesondere die Paritätstransformation, welche Vektoren am Ursprung spiegelt, $P : \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$, die Ladungskonjugation, $C : q \rightarrow -q$, oder die Zeitumkehr, $T : t \rightarrow -t$. Ist ein System unter einer oder mehreren dieser Transformationen invariant, folgen daraus Erhaltungsgrößen, welche die Wellenfunktion jeweils multiplizieren. Beispielsweise ist die Eigenparität eines Eigenzustands des Bahndrehimpulsoperators $(-1)^l$, entsprechend $P\psi_{lm}(\mathbf{x}) = \psi_{lm}(-\mathbf{x}) = (-1)^l\psi_{lm}(\mathbf{x})$.

- Auch die **lokale U(1)-Eichsymmetrie** entspricht einem erhaltenen Strom, den man entsprechend der globalen Variante mit Hilfe der kovarianten Ableitungen konstruiert,

$$\mathcal{D}_t \rho = \mathcal{D}_x \cdot \mathbf{j}, \quad (5.3.159)$$

mit

$$\rho = |\psi|^2, \quad (5.3.160)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \mathcal{D}_x \psi - (\mathcal{D}_x \psi)^* \psi] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] + \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi. \end{aligned} \quad (5.3.161)$$

Im klassischen Elektromagnetismus sind nur die Feldstärken \mathbf{E} und \mathbf{B} beobachtbar, das skalare Potential ϕ sowie das Vektorpotential \mathbf{A} erscheinen nur als Hilfsgrößen zur Definition von \mathbf{E} und \mathbf{B} . In ähnlicher Weise ist die globale Phase einer Wellenfunktion von keiner physikalischen Bedeutung, da sie bei der Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichte herausfällt. Dennoch spielen Phasen eine wesentliche Rolle, als relative Phasen zwischen verschiedenen "Bestandteilen" der Wellenfunktion, d.h. in Superpositionen, welche dann in Interferenzphänomenen sichtbar werden. Das *Aharonov-Bohm-Experiment*, welches wir noch etwas genauer im folgenden Abschnitt diskutieren, zeigt, dass zu diesen relativen Phasen aufgrund der lokalen Eichsymmetrie auch das eichvariante Vektorpotential \mathbf{A} beitragen und somit zumindest seine Auswirkung experimentell gemessen werden kann – allerdings letztlich auch nur mittels einer eichinvarianten Observable.

- **Magnetische Monopole:** Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass die elektromagnetischen Gleichungen eine symmetrische Form annehmen, wenn magnetische Monopole existieren würden. Solche Monopole wurden bislang jedoch empirisch nicht beobachtet. Falls sie jedoch existieren sollten, so folgt in der Quantenmechanik aus der Eichtransformation der Wellenfunktion die Quantisierung der elektrischen Elementarladung in Einheiten der magnetischen Monopol-Ladung. Dieser Dirac-Monopol-Effekt wird z.B in Sakurai, Kapitel 2.6 besprochen [37].

5.4. Topologische Effekte in der Quantenmechanik

Zum Schluß dieses Kapitels wollen wir noch zwei interessante Aspekte der Kopplung quantenmechanischer Teilchen an das elektromagnetische Feld besprechen, welche nichttriviale topologische Eigenschaften des Raums widerspiegeln.

5.4.1. Aharonov-Bohm Effekt

Wir betrachten eine unendlich lange stromdurchflossene Spule, innerhalb derer ein zeitlich konstantes Magnetfeld herrscht, welches außerhalb der Spule verschwindet.

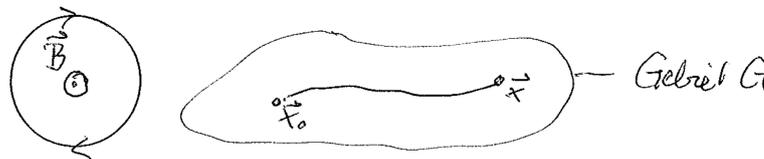


Abbildung 5.2.: Magnetfeld innerhalb unendlich langer Spule und Wegintegral durch ein Gebiet außerhalb der Spule.

Außerhalb kann man das Vektorpotential also als Gradientenfeld wählen, welches wir mit dem Gradienten des Felds $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ identifizieren,

$$\mathbf{A} = \nabla\Lambda, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0. \quad (5.4.162)$$

\mathbf{A} ist in dieser Form eine sogen. "reine Eichung". Das Phasenfeld Λ bestimmt sich daraus mittels des Wegintegrals

$$\Lambda(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{ds} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{s}) \quad (5.4.163)$$

von einem festen Aufpunkt \mathbf{x}_0 zum Argument \mathbf{x} des Felds entlang eines Wegs außerhalb der Spule, damit überall entlang des Wegs das Vektorpotential eine reine Eichung darstellt. Wie aus der Elektrodynamik bekannt ist, hängt das Wegintegral nur von Anfangs- und Endpunkt ab, aber nicht vom genauen Verlauf des Wegs. Die Wellenfunktion eines geladenen Teilchens außerhalb der Spule ist dann durch die Schrödinger-Gleichung (5.3.130) bestimmt, und da \mathbf{A} eine reine Eichung ist, läßt sich das Feld mittels einer Eichtransformation in die Phase der Wellenfunktion verschieben,

$$i\hbar\partial_t\psi'(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi'(\mathbf{x}, t). \quad (5.4.164)$$

mit

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t) \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{ds} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{s})\right], \quad (5.4.165)$$

wobei wir das elektrische Feld gleich Null gesetzt haben, d.h. $\Phi \equiv 0$.

Diese *Aharonov-Bohm-Phase* wurde im Aharonov-Bohm-Interferenzexperiment gemessen.

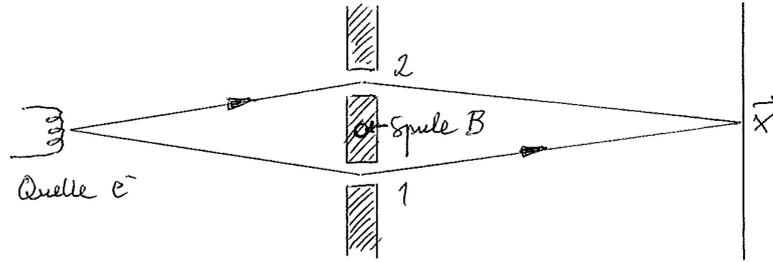


Abbildung 5.3.: Aharonov-Bohm Interferenzexperiment: Die Elektronen bewegen sich von der Quelle durch den Doppelspalt zum Schirm, wo sie ein Interferenz-Streifenmuster erzeugen. Dabei können sie nicht in den Bereich des Magnetfelds eindringen. Aufgrund der vom B -Feld induzierten AB-Phase wird das Interferenzmuster jedoch, abhängig von der Stärke des magnetischen Flusses Φ_B verschoben.

Am Punkt \mathbf{x} auf dem Schirm ist die Wellenfunktion durch

$$\psi_{AB}(\mathbf{x}) = \psi_{1,0}(\mathbf{x}) e^{i(e/\hbar c) \int_1 ds \cdot \mathbf{A}(s)} + \psi_{2,0}(\mathbf{x}) e^{i(e/\hbar c) \int_2 ds \cdot \mathbf{A}(s)} \quad (5.4.166)$$

gegeben, wobei $\psi_{i,0}$ die Wellenfunktion bei \mathbf{x} bezeichnet, die dort ohne Magnetfeld, $B = 0$, und bei geschlossenem Spalt $3 - i$ vorliegen würde. Die Superposition von $\psi_{1,0}$ und $\psi_{2,0}$ erzeugt das Doppelspalt-Interferenzmuster, welches dann aufgrund der relativen AB-Phase zwischen den Wegen 1 und 2,

$$\int_1 ds \cdot \mathbf{A}(s) - \int_2 ds \cdot \mathbf{A}(s) = \oint_{\partial \mathcal{A}} ds \cdot \mathbf{A}(s) = \int_{\mathcal{A}} d\mathbf{f} \cdot \text{rot} \mathbf{A}(s) = \Phi_B, \quad (5.4.167)$$

verschoben wird. \mathcal{A} bezeichnet hier eine Fläche, welche die zentrale Blende mit der Spule einschließt und vom Weg $\partial \mathcal{A}$ umrandet wird, welcher der Differenz der Wege 1 und 2 entspricht, aber so deformiert werden kann, dass er zwar noch durch beide Spalte verläuft aber die Spule eng umfassen kann. Der relative AB-Phasenwinkel entspricht also dem magnetischen Fluß Φ_B durch das Spuleninnere, welcher somit in Abhängigkeit von der eichunabhängigen Magnetfeldstärke B die Verschiebung des AB-Interferenzmusters bestimmt,

$$\psi_{AB}(\mathbf{x}) = \left[\psi_{1,0}(\mathbf{x}) e^{i(e/\hbar c) \Phi_B} + \psi_{2,0}(\mathbf{x}) \right] e^{i(e/\hbar c) \int_2 ds \cdot \mathbf{A}(s)}. \quad (5.4.168)$$

Die Interferenzstreifen lassen sich also durch Variation von B und somit Φ_B verschieben, obwohl die Elektronen nicht in den Raumbereich nichtverschwindenden Magnetfelds eindringen können. Dies nennt man den *Aharonov-Bohm-Effekt* [41]. Die charakteristische Flußeinheit ist durch

$$2\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = 4,135 \cdot 10^{-7} \text{ Gauss m}^2 \quad (5.4.169)$$

bestimmt. Ein erster experimenteller Nachweis gelang Chambers 1960 [42].⁹

Bemerkungen: Gewöhnlich wird aus dem AB-Interferenzeffekt geschlossen, dass in der Quantenmechanik nicht die elektromagnetischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} , sondern die Eichfelder ϕ und \mathbf{A} die fundamentalen seien, und dass es erst der Quantenmechanik bedürfe, um diese konkret meßbar zu machen. Hierzu ist noch folgendes anzumerken:

- Letztlich ist es korrekt, dass ohne Quantenmechanik Elektron-interferenzen hinter dem AB-modifi-

⁹Zu Detailfragen hinsichtlich der Interpretation siehe auch H. Boersch et al. (1961) [43]

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

zierten Doppelspalt nicht auftreten würden, da diese ein Wellenphänomen darstellen. Die Verschiebung des Musters hängt jedoch von Φ_B und damit vom eichinvarianten Magnetfeld \mathbf{B} ab.

- Es läßt sich argumentieren [44], dass sich die oben berechnete AB-Phase auch aus klassischer Sicht messen lassen sollte, insbesondere aufgrund der Tatsache, dass das sich bewegende Elektron ein B -Feld erzeugt, das einen Induktionspuls in dem Solenoid auslöst. Es sollte also einen Energie- und Impulsübertrag auf die Spule geben, welcher durch Nachregulieren des Stroms kompensiert werden (muss) bzw. durch einen unrealistischen unendlich langen Magneten irrelevant gemacht werden muss. In den entsprechenden Ausdrücken für Energiepulse etc. treten ebenfalls die üblichen AB-Wegintegrale über \mathbf{A} auf, wie in der klassischen Lagrange-Formulierung üblich und elegant möglich ist, während nur eichinvariante Felder in die Meßgrößen eingehen. Es scheint daher müßig darüber zu diskutieren, ob (ϕ, \mathbf{A}) oder (\mathbf{E}, \mathbf{B}) fundamentaler sind. Erstere sind insofern fundamentaler, als sie den Zusammenhang des Raums charakterisieren. Das Prinzip der lokalen Eichinvarianz macht aus einer Theorie zunächst freier Teilchen eine wechselwirkender Entitäten. Dabei liegt allerdings die Relevanz des Eichprinzips nicht in der (eichabhängigen) Generierung des Wechselwirkungsterms $\sim e\mathbf{A}\psi$, sondern in der *empirisch* untermauerten Tatsache der Äquivalenz der Ladungen in den Feld- und Bewegungsgleichungen. Unterschiedliche Kopplungen von Elektronen und Muonen an das elektromagnetische Feld sind prinzipiell *nicht ausgeschlossen!*

Fundamental für topologische Phänomene, wie den AB-Effekt sind ebenfalls nicht die Eichpotentiale selbst, sondern nur Äquivalenzklassen von Potentialen, sogen. Holonomien: Im Fall des AB-Effekts sind die Wegintegrale weitgehend unabhängig vom konkreten Weg, solange sie durch denselben Spalt verlaufen. Insofern charakterisieren die entsprechenden Äquivalenzklassen verschiedene Wege mit gleichem Wegintegral den zweifachen Zusammenhang des Raums um den Solenoid.

Die Quantenmechanik wird heute aufgrund ihrer grundlegenden Entität, der Wellenfunktion, als nicht-lokal aufgefaßt.¹⁰ Sie ist dadurch in der Lage, die nichtlokalen Zusammenhangseigenschaften des Raums um den Solenoid in einem Interferenzsignal sichtbar zu machen. Aus dieser geometrischen Sichtweise erscheinen die klassische Elektrodynamik und die Quanten-Wellenmechanik im AB-Versuchsaufbau kaum noch trennbar: Einerseits gibt es im Prinzip klassisch meßbare Signale der Holonomie, andererseits führt das Äquivalenzprinzip in einer Quantentheorie geladener Teilchen unmittelbar auf Welleninterferenz-Effekte als Observable der nichttrivialen Raumstruktur.

SQUIDS (Superconducting Quantum-Interference Devices sind heute aus der Magnetfeldsensorik nicht mehr wegzudenken (z.B. in der MEG, MKG sowie Magnetresonanztomographie in der Medizintechnik): Der Strom durch zwei parallel geschaltete Supraleiter, unterbrochen jeweils durch einen Josephson-tunnelkontakt, ist aufgrund quantenmechanischer Interferenzen proportional zu $|\cos(\pi\Phi_B/\Phi_0)|$, wobei Φ_B den magnetischen Fluß durch den Ring bezeichnet:

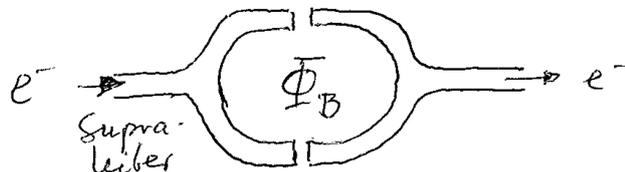


Abbildung 5.4.: SQUID.

¹⁰S. dazu auch Kap. 9.

Flußquantisierung in Supraleitern, der Meissner-Effekt (beschreibbar mit Hilfe einer effektiven Photon-Masse aufgrund des Anderson-Higgs-Mechanismus) sowie *Abrikosov-Vortizes* in Supraleitern und Suprafluiden haben denselben Ursprung wie die Aharonov-Bohm-Phase $\sim \Phi_B$.

Freie Elektronen im Magnetfeld zeigen sogen. *Landau-Niveaus*, d.h. quantisierte zyklische Bewegung (\rightarrow Übungen).

5.4.2. SO(3) versus SU(2) und Berry-Phasen*

In der folgenden mathematischen Ergänzung wollen wir noch auf eine wichtige Subtilität hinweisen, nämlich den Unterschied zwischen der Drehgruppe SO(3) und ihrer sogenannten doppelten Überlagerungsgruppe SU(2). Wir erinnern daran, dass jedes Element $g \in \text{SO}(3)$ ist charakterisiert durch 3 Parameter, z.B. Drehachse entsprechend Einheitsvektor \hat{n} sowie Drehwinkel $0 \leq \alpha \leq \pi$, wobei $(\hat{n}, \alpha = \pi)$ und $(-\hat{n}, \alpha = \pi)$ zu identifizieren sind. Wir betrachten nun eine solche Drehung g in ($s = 1/2$)-Spinordarstellung:

$$\mathcal{D}(g) = U_{\mathbf{n}} = e^{-(i/\hbar)\alpha\hat{n}\cdot\mathbf{S}} = e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \quad (5.4.170)$$

Explizit ergibt sich ($\hat{n} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}| = \mathbf{n}\alpha^{-1}$)

$$U_{\mathbf{n}} = \mathbb{1}_2 \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i(\hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} - i\hat{n}_3 \sin\frac{\alpha}{2} & -i(\hat{n}_1 - i\hat{n}_2) \sin\frac{\alpha}{2} \\ -i(\hat{n}_1 + i\hat{n}_2) \sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} + i\hat{n}_3 \sin\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.4.171)$$

Es überprüft sich leicht, dass die Darstellung unitär ist, $U_{\mathbf{n}}^\dagger \cdot U_{\mathbf{n}} = \mathbb{1}_2$, und dass ihre Determinante $\det U_{\mathbf{n}} = 1$ ist. Gleichzeitig stellen wir etwas Seltsames fest:

$$U_{\hat{n},\pi} \cdot U_{\hat{n},\pi} = U_{\hat{n},2\pi} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.4.172)$$

Eine Rotation im \mathbb{R}_3 um 2π sollte dem Eins-Element der SO(3) entsprechen. $U_{\hat{n},2\pi}$ ist jedoch keine Darstellung der $\mathbb{1}_{\text{SO}(3)}$.

Die oben verwendete Konstruktion der Darstellung einer Drehung beruht auf den Eigenschaften der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ von SO(3). Dies führt auf Darstellungen für *infinitesimale* Drehungen. Die $s = (2\mathbb{Z} + 1)/2$, also halbzahligten Darstellungen, liefern jedoch, „hoch integriert“, keine Darstellungen der *Lie-Gruppe* SO(3). Vielmehr parametrisiert $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ zusammen mit den Paulimatrizen die Lie-Gruppe SU(2):

$$\text{SU}(2) = \left\{ U \in \mathbb{C}^{2,2} \mid U^\dagger U = \mathbb{1}, \det U = 1 \right\} \quad (5.4.173)$$

- \rightarrow Die Pauli-Matrizen sind Generatoren der SU(2), nicht der SO(3)!
- \rightarrow $\mathfrak{so}(3)$ und $\mathfrak{su}(2)$ haben dieselben Strukturkonstanten und sind daher isomorph zueinander.
- \rightarrow Für endliche Drehungen gilt: $\forall g \in \text{SO}(3) \exists 2$ Elemente $U, -U \in \text{SU}(2)$. Man sagt: SU(2) liefert eine zweifache Überdeckung der SO(3).

Topologische Äquivalenzen:

Da sich jede komplexe, unitäre 2×2 -Matrix parametrisieren läßt als

$$\text{SU}(2) = \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbb{C} : |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} \quad (5.4.174)$$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

ist $SU(2) \simeq S^3$, d.h., einer 3-Sphäre im \mathbb{R}^4 topologisch äquivalent, denn

$$S^3 = \{(w, x, y, z) \in \mathbb{R}^4 \mid w^2 + x^2 + y^2 + z^2 = 1\}, \quad (5.4.175)$$

worin man beispielsweise $w = \operatorname{Re} a, x = \operatorname{Im} a, y = \operatorname{Re} b, z = \operatorname{Im} b$ wählt. In dieser Darstellung ist $(1, 0, 0, 0)$ das 1-Element der $SO(3)$ und der $SU(2)$, $(-1, 0, 0, 0)$ entspricht einer 2π -Drehung in der $SU(2)$, äquivalent zu einer Paritätstransformation, welche $P \notin SO(3)$ ist. Dieser „Südpol“ der 3-Sphäre ist daher ausgenommen in der entsprechenden Darstellung der $SO(3)$, welche keine Paritätstransformation enthält. Man schreibt:

$$SO(3) \simeq S^3/Z_2, \quad (5.4.176)$$

mit der diskreten Gruppe $Z_2 = \{1, -1\}$.

Damit gilt auch:

$$SO(3) = SU(2)/Z_2, \quad (5.4.177)$$

d.h., $SO(3)$ ist die *Faktorgruppe* der $SU(2)$ bezüglich der Z_2 .

Allgemeine Drehungen von ($s = 1/2$)-Spinoren beinhalten demnach zusätzlich “Spin-Flips” $|\sigma\rangle \rightarrow -|\sigma\rangle$. Insbesondere muss daher jeder ($s = 1/2$)-Spinor, um jede beliebige Achse, um $\alpha = 4\pi$ gedreht werden um zu sich selbst zurückzukehren. Die bei einer Drehung um $\alpha = 2\pi$ zusätzlich auftretende Phase $-1 = e^{i\pi} = e^{i\alpha/2}$ ist eine sog. *Berry-Phase* (auch *Geometrische Phase* genannt) [45–47].

Wir bemerken noch, dass wir als alternative Darstellung der $SO(3)$ auch die Drehungen $K_3 = \{\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3 \mid |\mathbf{n}| \leq 2\pi\}$ um die Achsen $\mathbf{n} = \hat{n}\alpha$, mit Drehwinkeln $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ wählen können. Eine Halbkugel der in einer Drehung eines gegebenen Vektors um eine beliebige Achse \hat{n} erreichten Vektoren ist in dieser Darstellung der $SO(3)$ identisch zur jeweils gegenüberliegenden Halbkugel, erreicht bei Drehungen um $-\hat{n}$. Dies gilt dagegen nicht für die $SU(2)$, für die die Drehungen in der jeweils anderen Halbkugel zu einem Minuszeichen führen.

6. Näherungsmethoden

Mit dem in den bisherigen Kapiteln erlangten Handwerkszeug können wir die im Prinzip einen großen Teil aller quantenmechanischen Probleme bereits im Prinzip lösen: Wir kennen die Grundprinzipien des Hilbertraums und der darin enthaltenen Zustände, ihre Interpretation im Hinblick auf experimentelle Observable, sowie deren Dynamik, welche durch die Schrödinger-Gleichung festgelegt ist. Wir haben gelernt, für gegebene Potentiale Symmetrien auszunutzen, um die Schrödinger-Gleichung in zielgerichteter Weise lösen zu können, in einer und mehr Dimensionen, und die Prinzipien der Wahl von Basisfunktionen aufgrund der vorliegenden Symmetrie können auch auf andere Spezialfälle ausgedehnt werden. Ein zentraler Schritt war zuletzt die volle Ankopplung geladener Teilchen an klassische elektromagnetische Felder, womit wir in der Lage sind, die stationären und dynamischen Eigenschaften zumindest von einfachen Atomen zu berechnen. Eine Übertragung dieser Vorgehensweisen auf komplexere Systeme erfordert dann in aller Regel schnell, von analytischen auf numerische Verfahren überzugehen, mit denen die Lösung in der Praxis schneller, wenn auch nicht unbedingt in aller Präzision und leicht möglich ist.

Vor diesem Hintergrund kommen wir allerdings nicht um die Tatsache herum, dass zum besseren Verständnis komplexerer Situationen eine zumindest teilweise analytische weitere Vorgehensweise nützlich ist, insbesondere, wenn es darum geht, verschiedene Effekte und ihre Ursachen voneinander abgrenzen zu wollen. Zum Beispiel werden wir im folgenden noch lernen, wie die zunächst einfache Struktur des Wasserstoff-Atoms aufgrund diverser Effekte der Kopplung der verschiedenen Freiheitsgrade in der Realität systematisch komplexer ist, und wie man diese zunehmende Komplexität günstig charakterisiert.

Aus diesen recht allgemeinen Gründen sind wie schon in der klassischen Physik neben einer vollen numerischen Behandlung Näherungsverfahren vonnöten und zumindest hilfreich für das tiefere Verständnis der physikalischen Prozesse. Wie aus der Analysis bekannt ist es für die Anwendung von Näherungsverfahren in der Regel nötig, dass eine "Trennung der Skalen" vorliegt, d.h., dass sich wesentliche Skalen, also Größenordnungen von Längen, Energien, etc., welche die Physik des betrachteten Systems bestimmen, deutlich voneinander unterscheiden. Wenn dies der Fall ist, so ergibt ein Quotient aus diesen einen kleinen, dimensionslosen Parameter, $\lambda \ll 1$, welcher in einer Entwicklung nach Potenzen von λ verwendet werden kann, die man dann in der Praxis bis zu einer bestimmten Ordnung berechnet.

Im folgenden wollen wir einige solche Näherungsverfahren kennenlernen, welche zentral für das Verständnis quantenmechanischer Systeme sind, insbesondere die Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie für die Bestimmung von Korrekturen zu Eigenzuständen eines Operators, die zeitabhängige Störungstheorie als Äquivalent für nicht-stationäre Zeitentwicklungen, sowie, im nächsten Kapitel, die Feynman-Pfadintegral-Darstellung von Matrixelementen von Operatoren, welche auch die Grundlage für die Störungstheorie für Quantenfelder darstellt. Abschließend besprechen wir noch einige spezielle Verfahren, welche Systeme nahe des Übergangs zum klassischen Limes zu beschreiben erlauben.

6.1. Stationäre (Rayleigh-Schrödinger) Störungstheorie

Die Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie geht der zentralen Frage nach, wie sich ein System von Eigenzuständen eines Operators ändert, wenn man den Operator einer kleinen additiven Modifikation unterzieht. Wir werden sie nach einer Einführung verwenden, um die Aufspaltungen der atomaren Wasserstoff-Linien unter der Kopplung von Bahndrehimpuls, Spin und weiteren Kräften zu bestimmen.

6.1.1. Nicht degenerierter Fall

Bislang haben wir, z.B. im harmonischen Oszillator oder im Coulomb-Potential, eine Reihe von exakt lösbaren dynamischen Problemen kennengelernt: Dank der hohen Symmetrie des Problems war es möglich, die exakten Eigenvektoren und Eigenwerte des Hamiltonoperators zu bestimmen. In realistischen Problemen ist der Hamiltonian hierfür in der Regel zu kompliziert. In diesem Fall existieren allerdings Näherungsmethoden, die eine approximative Lösung erlauben. Wir betrachten hierfür einen Hamilton-Operator der Form

$$H = H_0 + \lambda H_1 . \quad (6.1.1)$$

Dabei bezeichnet H_0 einen “ungestörten” Hamilton-Operator mit (bekannt)er Eigenbasis,

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^0\rangle , \quad (6.1.2)$$

und λH_1 einen “kleinen Stör-Term”. Wir behandeln hier λ als einen freien Parameter der Theorie, gegeben z.B. als eine Kopplungskonstante, die uns wie eine freie durchstimmbare Größe eine Kontrolle über den Grad der Abweichung von H_0 erlaubt. Für kleine Werte von λ geht die Dynamik dann in die durch die ungestörte Schrödinger-Gleichung beschriebene über. Ferner behandeln wir zunächst den Fall, dass H_0 ein nicht-degeneriertes Spektrum besitzt.

Wir sind nun daran interessiert, die Energieeigenwerte und die zugehörige Eigenbasis des modifizierten Hamilton-Operators H zu bestimmen, also die stationäre Schrödinger-Gleichung,

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle , \quad (6.1.3)$$

zu lösen. Dafür nutzen wir den folgenden Ansatz: Wir entwickeln $|n\rangle$ und E_n als *Störungsreihe in Potenzen von λ* um $E_n^{(0)}$ und $|n^0\rangle$,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} , \quad (6.1.4)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |n^j\rangle . \quad (6.1.5)$$

Dies ist nur möglich, wenn sich $|n\rangle$ und $|n^0\rangle$ quantitativ, aber auch qualitativ nur wenig unterscheiden, denn wir behandeln λ als freien Parameter mit $\lim_{\lambda \rightarrow 0} H = H_0$. Zum Beispiel ist ein solcher Ansatz nicht zulässig, wenn sich die ungestörten und gestörten Energielevels $E_n^{(0)}$ und $E_n^{(j)}$ kreuzen (Level-crossing).

Abbildung 6.1.: Level-Crossing im Übergang von ungestörten zu den gestörten Energie-Niveaus.

Darüberhinaus können Bindungszustände eines Potentials in der Regel nicht auf diese Weise, “perturbativ” aus ungebundenen Zuständen etwa der freien Schrödinger-Gleichung konstruiert werden. Wir werden später sehen, dass ein Bindungszustand Beiträge in allen Ordnungen in $\lambda H_1 = V$ hat.

Mathematisch betrachtet ist die so bestimmte “Störungsreihe” nicht konvergent sondern allenfalls eine

asymptotische Reihe:

$$f(\lambda) = \sum_{k=0}^m a_k \lambda^k + R_m(\lambda) \quad (6.1.6)$$

$$\text{mit } \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left(\frac{R_m(\lambda)}{\lambda^m} \right) = 0, \quad \lim_{m \rightarrow \infty} R_m(\lambda) = \infty. \quad (6.1.7)$$

Der zentrale Grund hierfür ist, dass die ‘‘Kleinheit’’ von λH_1 nicht nur durch $\lambda \ll 1$, sondern auch durch die Struktur des Operators H_1 gegeben ist.

Einsetzen des oben gewählten Ansatz in die Schrödinger-Gleichung ergibt

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H_1) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots). \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

Da die Gleichung unabhängig von der genauen Wahl von λ erfüllt sein soll, müssen die Terme auf der linken und rechten Seite der Gleichung in jeder Ordnung in λ separat übereinstimmen. Aus dieser Forderung folgt ein System von unendlich vielen Gleichungen,

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^0\rangle, \quad (6.1.9)$$

$$H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^1\rangle + E_n^{(1)} |n^0\rangle, \quad (6.1.10)$$

$$H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^{(0)} |n^2\rangle + E_n^{(1)} |n^1\rangle + E_n^{(2)} |n^0\rangle. \quad (6.1.11)$$

$$\vdots \quad (6.1.12)$$

Die Normierung von $|n\rangle$ wird festgelegt auf

$$\langle n | n^0 \rangle = 1. \quad (6.1.13)$$

Wegen $\langle n^0 | n^0 \rangle = 1$ folgt sofort $\lambda \langle n^0 | n^1 \rangle + \lambda^2 \langle n^0 | n^2 \rangle + \dots = 0$. Da dies gemäß der Logik der Störungsreihe für alle Werte von λ gilt, erhalten wir

$$\langle n^0 | n^k \rangle = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.1.14)$$

Wir bestimmen nun $E_n^{(j)}$ und $|n^{(j)}\rangle$, wozu wir aufgrund der Gleichungen (6.1.9)ff. iterativ vorgehen können:

(1a) Berechnung von $E_n^{(1)}$:

Wir multiplizieren die Gleichung (6.1.10) mit $\langle n^0 |$, woraus folgt, dass

$$\underbrace{\langle n^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{=E_n^{(0)} \langle n^0 | n^1 \rangle = 0} + \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle = \underbrace{E_n^{(0)} \langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} + \underbrace{E_n^{(1)} \langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1}. \quad (6.1.15)$$

Damit erhalten wir

$$E_n^{(1)} = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle. \quad (6.1.16)$$

6. Näherungsmethoden

(1b) Berechnung von $|n^1\rangle$:

Wir entwickeln $|n^1\rangle$ in der ONB $\{|m^0\rangle\}$ von H_0 mit

$$H_0 |m^0\rangle = E_m^{(0)} |m^0\rangle, \quad (6.1.17)$$

also $|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle$ mit $c_m = \langle m^0 | n^1 \rangle$. Im kontinuierlichen Fall geht diese Summe in ein Integral über. Beachte, dass wegen der Normierungsbedingung $\langle n^0 | n^1 \rangle = 0$ nur über $m \neq n$ zu summieren ist. Multiplizieren wir nun die Gleichung (6.1.10) mit $\langle m^0 |$, so erhalten wir

$$E_m^{(0)} \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^{(0)} \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + \underbrace{E_n^{(1)} \langle m^0 | n^0 \rangle}_{= \delta_{mn} \Rightarrow 0}. \quad (6.1.18)$$

Daraus folgt, dass

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) c_m = \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle, \quad (6.1.19)$$

$$\text{d.h.,} \quad c_m = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (6.1.20)$$

da für $n \neq m$ auch $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ gilt. Damit haben wir die Korrektur der Ordnung $\mathcal{O}(\lambda)$ des Eigenzustands bestimmt:

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.1.21)$$

Diese Korrektur stellt eine Superposition aller der Eigenzustände in der Eigenbasis von H_0 dar, welche "durch H_1 von $|n^0\rangle$ aus zu erreichen sind", welche also zu Übergangsmatrixelementen von H_1 in dieser Eigenbasis von H_0 beitragen. Wir sprechen von "Beimischungen" der jeweiligen Zustände aufgrund der Wirkung von H_1 .

2a) Berechnung von $E_n^{(2)}$:

Wir multiplizieren nun Gleichung (6.1.11) mit $\langle n_0 |$ und erhalten somit in entsprechender Weise die Korrektur zweiter Ordnung zur Eigenenergie, $E_n^{(2)} = \langle m^0 | H_1 | n^1 \rangle$, eingesetzt in (6.1.21) also

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.1.22)$$

In ähnlicher Weise kann man diese Korrekturen als "Beimischungen" betrachten, welche aufgrund der Matrixelemente von H_1 von $|n^0\rangle$ aus erreichbar sind. Sie werden wesentlich durch die Energiedifferenzen zwischen den Eigenzuständen von H_0 bestimmt:

- (i) Für den Grundzustand ist die Verschiebung zweiter Ordnung, $E_0^{(2)} < 0$ negativ.
- (ii) Wenn alle Übergangselemente $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle$ von vergleichbarer Größe sind, stammen die wichtigsten Beiträge von benachbarten Levels, für die die Differenzen $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ am kleinsten sind.

- (iii) Falls ein aufgrund eines großen Matrixelements und/oder kleinen Energieabstands relevantes Niveau $E_m^{(0)}$, $m \neq n$, oberhalb von $E_n^{(0)}$ liegt, so wird E_n nach unten und E_m nach oben verschoben; die Niveaus stoßen sich also ab, und Level-crossing wird vermieden.

Im Fall eines kontinuierlichen Eigenwert-Spektrums sind alle Summen durch Integrale zu ersetzen.

6.1.2. Degenerierter Fall

Die soeben kennengelernte Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung läßt sich leicht für den Fall eines Energiespektrums von H_0 mit (teilweise) gleichen Eigenenergien verallgemeinern. Wir suchen dafür eine allgemeine Lösung des Eigenwertproblems

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle, \quad (6.1.23)$$

für

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda H_1, \quad \lambda \in [0, 1]. \quad (6.1.24)$$

Wir nehmen an, dass $E(\lambda)$ und $|\psi(\lambda)\rangle$ durch unendlich oft differenzierbare Funktionen gegeben sind, so dass eine Taylorentwicklung möglich ist. Die Funktion $\langle \psi(0) | \psi(\lambda) \rangle$ ist dann differenzierbar und sei $\neq 0$, so dass wir die Normierung

$$\langle \psi(0) | \psi(\lambda) \rangle = 1 \quad (6.1.25)$$

wählen können. Die Taylorkoeffizienten erfüllen dann

$$H_0 |\psi^0\rangle = E^{(0)} |\psi^0\rangle, \quad (6.1.26)$$

$$H_1 |\psi^0\rangle + H_0 |\psi^1\rangle = E^{(1)} |\psi^0\rangle + E^{(0)} |\psi^1\rangle, \quad (6.1.27)$$

usw., wie zuvor, sowie

$$\langle \psi^0 | \psi^k \rangle = 0. \quad (6.1.28)$$

Aus (6.1.26) folgt, dass $|\psi^0\rangle$ Eigenvektor zu H_0 mit Eigenwert $E^{(0)}$ ist.

Wir betrachten nun die störungstheoretischen Korrekturen $|\psi_n^k\rangle$ der Zustände $|\psi_n^0\rangle$ im degenerierten, $d(n)$ -dimensionalen Unterraum zum Eigenwert $E^{(0)} = E_n^{(0)}$. Es sei

$$\mathbb{P}_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{d(n)} |n_i^0\rangle \langle n_i^0|, \quad \langle n_i^0 | n_j^0 \rangle = \delta_{ij}, \quad (6.1.29)$$

der Projektor auf diesen Unterraum, ausgedrückt in den Eigenzuständen von H_0 zum Eigenwert $E_n^{(0)}$. Multipliziert man die im selben Unterraum geltende Gleichung (6.1.27) von links mit $\mathbb{P}_n^{(0)}$ und berücksichtigt, daß H_0 , von rechts auf den Projektor wirkend, dafür sorgt, daß zwei der Terme sich gegenseitig wegheben, nämlich

$$\mathbb{P}_n^{(0)} (H_0 - E_n^{(0)}) |\psi_n^1\rangle = 0, \quad (6.1.30)$$

so kann man aus (6.1.27) schließen, dass

$$\mathbb{P}_n^{(0)} H_1 \mathbb{P}_n^{(0)} |\psi_n^0\rangle = E^{(1)} |\psi_n^0\rangle \quad (6.1.31)$$

gilt. Hierbei haben wir verwandt, dass der Projektor den ungestörten Zustand invariant läßt, $|\psi_n^0\rangle = \mathbb{P}_n^{(0)} |\psi_n^0\rangle$. $|\psi_n^0\rangle$ ist hier also einer von $d(n)$ Eigenvektoren von $\mathbb{P}_n^{(0)} H_1 \mathbb{P}_n^{(0)}$ zu den (nicht notwendigerweise

6. Näherungsmethoden

gleichen) Eigenwerten $E^{(1)}$. Multiplikation von (6.1.31) mit $\langle n_k^0 |$ ergibt die Eigenwertgleichung

$$\sum_j (\langle n_k^0 | H_1 | n_j^0 \rangle - E^{(1)} \delta_{kj}) \langle n_j^0 | \psi_n^0 \rangle = 0. \quad (6.1.32)$$

Die $E_{n,i}^{(1)}$, $i = 1, \dots, d(n)$ resultieren als Eigenwerte dieses Problem, d.h. als Diagonalelemente nach Diagonalisierung von H_1 auf dem Unterraum n , mit den entsprechenden Eigenzuständen $|\psi_{n,i}^0 \rangle \equiv |n_i^{\prime 0} \rangle = \sum_j c_{ij}^0 |n_j^0 \rangle$.

Nehmen wir nun an, dass diese Diagonalisierung in jedem Unterraum n vollzogen ist, so dass gilt

$$\langle n_i^{\prime 0} | H_1 | n_j^{\prime 0} \rangle = 0, \quad \text{für } i \neq j, \quad (6.1.33)$$

so können wir die Störungsrechnung alternativ in der Basis der Zustände $|n_i^{\prime 0} \rangle$ durchführen und überall die $|n_i^0 \rangle$ durch diese ersetzen. Im folgenden lassen wir den Strich der Übersichtlichkeit weg, $|n_i^{\prime 0} \rangle \rightarrow |n_i^0 \rangle$. Wie zuvor können wir die Normierung

$$\langle n_i^0 | n_i^k \rangle = \delta_{0k}, \quad \forall i \in [1, d(n)], \quad \forall n, \quad (6.1.34)$$

wählen. Eingesetzt in die Schrödingergleichung ergibt sich analog zum nicht-degenerierten Fall

$$H_0 |n_i^0 \rangle = E_n^{(0)} |n_i^0 \rangle, \quad (6.1.35)$$

$$H_0 |n_i^1 \rangle + H_1 |n_i^0 \rangle = E_n^{(0)} |n_i^1 \rangle + E_{n,i}^{(1)} |n_i^0 \rangle, \quad (6.1.36)$$

$$H_0 |n_i^2 \rangle + H_1 |n_i^1 \rangle = E_n^{(0)} |n_i^2 \rangle + E_{n,i}^{(1)} |n_i^1 \rangle + E_{n,i}^{(2)} |n_i^0 \rangle. \quad (6.1.37)$$

$$\vdots \quad (6.1.38)$$

Wir finden wiederum in erster Ordnung die Energiewerte

$$E_{n,j}^{(1)} = \langle n_j^0 | H_1 | n_j^0 \rangle. \quad (6.1.39)$$

Der Ansatz für die $|n_i^1 \rangle$ lautet dann

$$|n_i^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \sum_k^{d(m)} c_{mk} |m_k^0 \rangle + \sum_{j \neq i} c_{nj}^{(1)} |n_j^0 \rangle. \quad (6.1.40)$$

Der erste Term summiert über die Basiselemente in den Unterräumen $m \neq n$, zu den Energieeigenwerten $E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}$. Der zweite Term summiert über die zu $|n_i^0 \rangle$ orthogonalen Basiselemente, welche zum selbem ungestörten Energieeigenwert $E_n^{(0)}$ gehören.

Die c_{mk} ergeben sich wie vorher durch Multiplikation von (6.1.36) mit $\langle m_k^0 |$ von links zu

$$c_{mk} = \frac{\langle m_k^0 | H_1 | n_i^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.1.41)$$

6.2. Relativistische Korrekturen zum Energiespektrum des Wasserstoffatoms – Feinstruktur

Für die Herleitung der $c_{nj}^{(i)}$ verweisen wir auf Sakurai [37], Kapitel 5.1. Ihr Ergebnis lautet

$$c_{nj}^{(i)} = \frac{1}{E_{n,j}^{(1)} - E_{n,i}^{(1)}} \sum_{m \neq n} \sum_{k=1}^{d(m)} \frac{\langle n_j^0 | H_1 | m_k^0 \rangle \langle m_k^0 | H_1 | n_i^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.1.42)$$

Bemerkungen:

- In Ordnung $O(\lambda)$ ist die störungstheoretische Korrektur wie im nichtdegenerierten Fall mit einer zusätzlichen Diagonalisierung im degenerierten Unterraum bestimmbar.
- In höheren Ordnungen der degenerierten Störungstheorie gibt es verschiedene Verfahren der Bestimmung der Terme, insbesondere die von Kato [48] und Bloch [49], die auf eine unterschiedliche Anzahl von Termen kommen, s. dazu [50].

6.1.3. Ritzsches Variationsverfahren

Wir erwähnen noch kurz das Ritzsche Variationsprinzip, welches eine Methode der Störungsrechnung ist, die eine Abschätzung für die Änderung der Grundzustandsenergie durch eine Störung ermöglicht. Dies ist möglich insofern wir über ein hinreichend qualitatives Verständnis für die Auswirkung der Störung auf die Grundzustandswellenfunktion verfügen. In den Übungen besprechen wir, dass die Grundzustandsenergie E_0 immer der Schranke

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (6.1.43)$$

genügt, wobei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand sei. Das Ritzsche Variationsprinzip betrachtet nun einen Zustand $|\psi(\mu)\rangle$, der von einem Parameter μ abhängt, sowie den Quotienten

$$E(\mu) := \frac{\langle \psi(\mu) | H | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle} \quad (6.1.44)$$

Minimierung von $E(\mu)$ liefert dann eine obere Schranke für E_0 . Dies werden wir in der Übung zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des Helium-Atoms verwenden.

6.2. Relativistische Korrekturen zum Energiespektrum des Wasserstoffatoms – Feinstruktur

Als Anwendung der allgemeinen stationären Störungstheorie wollen wir nun die Feinstruktur des Wasserstoffatoms betrachten.

Aus der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom mit Hamiltonian

$$H \equiv H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{r} \quad (6.2.45)$$

hatten wir unter Vernachlässigung des Elektronenspins die Energie-Eigenfunktionen bestimmt:

$$H_0 |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle, \quad (6.2.46)$$

mit Energieeigenwerten

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2} (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} = -1 \text{ Ry} \frac{Z^2}{n^2}, \quad (6.2.47)$$

6. Näherungsmethoden

welche n^2 -fach degeneriert sind. Die Kernladungszahl des Wasserstoffatoms ist $Z = 1$.

Wir erweitern dieses einfachste Modell des Wasserstoffatoms nun um folgende Terme:

- Die Hinzunahme des Spin-Freiheitsgrads des Elektrons erweitert die Energie-Eigenzustände:

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s_z\rangle. \quad (6.2.48)$$

Die Energie-Eigenwerte von H_0 sind damit $2n^2$ -fach degeneriert.

- Aus der relativistischen Diracgleichung des Elektrons folgen 3 zusätzliche Korrekturterme zu H_0 ,

$$H = H_0 + H_{\text{rKE}} + H_{\text{SpB}} + H_{\text{D}}. \quad (6.2.49)$$

- H_{rKE} : beschreibt relativistische Korrekturen zur kinetischen Energie.
- H_{SpB} : trägt der Spin-Bahn-Kopplung Rechnung.
- H_{D} : beschreibt den sogenannten Darwin-Term aufgrund der relativistischen 'Zitterbewegung' des Elektrons.

6.2.1. Relativistische Korrektur zur kinetischen Energie

Im ersten Schritt berechnen wir die Auswirkungen von H_{rKE} in erster Ordnung der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie, also die entsprechende Verschiebung der Energien E_n . Aus

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + M^2 c^4} = M c^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{1}{8} \frac{\mathbf{p}^4}{M^3 c^2} + \dots \quad (6.2.50)$$

erhalten wir, dass

$$H_{\text{rKE}} \simeq -\frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{M^3 c^2} = -\frac{p^2}{2M} \left(\frac{p}{2Mc} \right)^2 \cong \frac{p^2}{2M} \left(\frac{Z\alpha}{2n} \right)^2, \quad (6.2.51)$$

wobei wir den Impuls durch $-ip \simeq \hbar k = MZe^2/(\hbar n) = McZ\alpha/n$, vgl. (4.5.170), abgeschätzt haben. Die relativistische Korrektur ist größenordnungsmäßig also, für hinreichend kleine Z , um einen Faktor $\alpha^2 \sim 10^{-4}$ im Vergleich zur kinetischen Energie und um α relativ zum Coulomb-Potential unterdrückt. Wir können den ungestörten Hamiltonian verwenden, um den Korrekturterm in der Form

$$H_{\text{rKE}} = -\frac{1}{2Mc^2} \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \quad (6.2.52)$$

zu schreiben, mit dessen Hilfe wir die Energieverschiebung in 1. Ordnung der Störungstheorie berechnen:

$$\Delta E_{nlm}^{(1)} = \langle nlm | H_{\text{rKE}} | nlm \rangle \quad (6.2.53)$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 + 2E_n Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + (Ze^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right). \quad (6.2.54)$$

Mit Hilfe des Virialsatzes können wir die Erwartungswerte des Potentials berechnen: Aus

$$[H, \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}] = -i\hbar \left(\frac{\mathbf{p}^2}{m} - \mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) \right) \quad (6.2.55)$$

ergibt sich für Eigenzustände $|\psi\rangle$ des Hamiltonoperators H der

Virialsatz:¹

$$0 = \frac{i}{2\hbar} \langle \psi | [H, \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}] | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \psi \rangle - \frac{1}{2} \langle \psi | \mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) | \psi \rangle. \quad (6.2.56)$$

Einsetzen des Coulomb-Potentials ergibt, mit $\mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) = r \partial_r V(r) = Ze^2/r$, dass

$$2 \langle \psi | H_0 | \psi \rangle + Ze^2 \langle \psi | (1/r) | \psi \rangle = 0, \quad (6.2.57)$$

d.h.

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{2}{Ze^2} \langle H_0 \rangle, \quad (6.2.58)$$

Für die Erwartungswerte der zweiten und auch höherer Potenzen von $1/r$ ist etwas mehr Mühe angesagt, sie lassen sich aber als Momente der Radialwellenfunktionen direkt bestimmen,

$$\left\langle \frac{1}{r^k} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty dr r^{2-k} R_{nl}^2 \left(u_{nl}, \frac{1}{r^k} u_{nl} \right), \quad (6.2.59)$$

was sich mittels Ableitungen des Hamilton-Operators, dessen Eigenzustände die u_{nl} sind, vgl. (4.5.137), nach l berechnen lassen.² Für $k = 2$ ergibt sich:

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{2Z^2}{(2l+1)a_B^2 n^3}, \quad (6.2.60)$$

und damit:

$$(\Delta E_{\text{rKE}})_{nlm} = \frac{Mc^2}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^4 \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{l+1/2} \right\} < 0 \quad (6.2.61)$$

für alle $n, l = 0, \dots, n-1$. Hierbei ist wesentlich, dass wir uns mit diesem Ergebnis der nicht degenerierten Störungstheorie zufrieden geben können, da alle off-diagonalen Matrixelemente verschwinden,

$$\langle n l m | H_{\text{rKE}} | n l' m' \rangle = 0 \quad (6.2.62)$$

für $l \neq l', m \neq m'$.

6.2.2. Spin-Bahn-Kopplung

Der Spin-Bahn-Kopplungsterm läßt sich heuristisch als einen Term interpretieren, der die Energie $H_{\text{SpB}} \sim -(e/Mc) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ berücksichtigt, welche das Elektron aufgrund der Ausrichtung seines spin-magnetischen Moments μ_s im \mathbf{B} -Feld des Protons erfährt, welches im Ruhesystem des Elektrons um dieses rotiert, vgl. (5.3.118). Das entsprechende \mathbf{B} -Feld berechnet sich klassisch zu $\mathbf{B} = -\mathbf{v}/c \times \mathbf{E}$, wobei $\mathbf{E} = -\nabla\Phi = -(\mathbf{x}/r)d\Phi(r)/dr$ das \mathbf{E} -Feld des Protons darstellt. Auf diese Weise erhält man

$$H_{\text{SpB}} = \frac{e}{2M^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad \text{mit} \quad \Phi(r) = -\frac{Ze}{r}. \quad (6.2.63)$$

¹Für Mittelwerte der Dynamik klassischer Teilchen eingeführt von Rudolf Clausius (1870).

²Siehe F. Schwabl, QM 1, Kap. 12.3 [1].

6. Näherungsmethoden

Aus der klassischen Elektrodynamik erinnern wir uns dabei daran, dass wir das Ergebnis noch mit 2 multiplizieren mussten, denn das Ruhesystem des Elektrons stellt kein Inertialsystem dar (Stichwort: Thomas-Präzession)³. Natürlich ist diese Interpretation nur heuristisch, da das Konzept einer festen Trajektorie und somit eines Ruhesystems des Elektrons quantenmechanisch keinen Sinn ergeben. Das Ergebnis (6.2.63) folgt allerdings durch direkte Auswertung der relativistischen Dirac-Gleichung und ist deshalb korrekt.

Wir behandeln nun $H = H_0 + H_{\text{SpB}}$ im Rahmen der degenerierten Störungstheorie. Zunächst fragen wir uns, ob $|n, l, m, s_z\rangle$ geeignet ist. Wegen

$$[H_{\text{SpB}}, L_z] \neq 0, \quad [H_{\text{SpB}}, S_z] \neq 0 \quad (6.2.64)$$

ist H_{SpB} bezüglich der Basis der $|n, l, m, s_z\rangle$ nicht diagonal. Diese Zustände sind deshalb nicht ohne weiteres für die Störungsrechnung zu verwenden. Anstelle dieser Eigenzustände von $\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z$, läßt sich jedoch die Eigenbasis der $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$ mit dem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ zum Einsatz bringen, vgl. Abschnitt 5.2.3. Aus

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (6.2.65)$$

folgern wir, dass H_{SpB} diagonal in der Eigenbasis $|n, j, m, l, s\rangle$ ist. Die j -Quantenzahl nimmt darin die Werte $j = l \pm 1/2$ an. Weiterhin gilt für die Drehimpuls-Eigenzustände $|j, m, l, s\rangle$, dass

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} |l \pm 1/2, m, l, 1/2\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} (l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - 3/4 \\ (l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - 3/4 \end{pmatrix} |l \pm 1/2, m, l, 1/2\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} |l \pm 1/2, m, l, 1/2\rangle. \end{aligned} \quad (6.2.66)$$

Wir berechnen nun die Energiekorrektur aufgrund von H_{SpB} in erster Ordnung Störungstheorie,

$$\Delta E_{\text{SpB}}(n, l \pm 1/2, m, l, 1/2) = \frac{Ze^2}{2M^2c^2} \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle_{(l \pm 1/2, m, l, 1/2)} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{(n, l)} = \frac{Z\alpha\hbar}{2M^2c} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{(n, l)} \quad (6.2.67)$$

Mithilfe von

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{M^3c^3\alpha^3Z^3}{\hbar^3n^3l(l+1/2)(l+1)}, \quad (6.2.68)$$

was wir hier ohne Beweis nutzen (Siehe Fn. 4 auf S. 184) erhalten wir unter Verwendung von (6.2.66):

$$\Delta E_{\text{SpB}} = \frac{Mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3l(l+1/2)(l+1)} \begin{cases} l & \text{für } j = l + 1/2, l \geq 0 \\ -l-1 & \text{für } j = l - 1/2, l > 0 \end{cases}. \quad (6.2.69)$$

Zusammen mit der relativistischen Korrektur lautet die Energieverschiebung:

$$(\Delta E_{\text{rKE}} + \Delta E_{\text{SpB}})_{j=l \pm 1/2} = \frac{Mc^2}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^4 \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right\}. \quad (6.2.70)$$

Dieses Resultat ist in seiner Form identisch zu ΔE_{rKE} , wobei l durch $j = l \pm 1/2$ ersetzt worden ist.

Anmerkung: Wie man (6.2.68) entnimmt, führen die Zustände mit $l = 0$ zu $\langle 1/r^3 \rangle_{nl} \sim 1/l \sim \infty$. Dies hat seine Ursache darin, dass der Integrand von $\langle 1/r^3 \rangle_{nl} \sim \int r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 / r^3 \sim \int dr |R_{nl}(0)|^2 / r$ für $l = 0$ zu einem bei $r \rightarrow 0$ logarithmisch divergenten Integral führt. Für $r \rightarrow \infty$ tritt keine Divergenz auf, da die Ra-

³Siehe z.B. J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik* [7], Kapitel 11.8.

Radialwellenfunktionen dort exponentiell unterdrückt sind. Für $l > 0$ tritt auch keine Divergenz bei kleinen r auf, da sich die Radialwellenfunktionen (4.5.169) für kleine r wie $R_{nl}(r) \sim r^l$ verhalten. Im S -Zustand ist wegen der $r \rightarrow 0$ Divergenz das Integral jedoch für ein striktes Coulombpotential nicht definiert und erfordert eine Regularisierung der Form des Kernpotentials. Diese ist realistisch, da der Kern nichtverschwindende Ausdehnung hat und somit das Potential bei kleinen Abständen von der Coulomb-Form abweichen wird. Aus klassischer Sicht könnte man beispielsweise innerhalb des Kerns der Ausdehnung einiger fm die Ladungsverteilung als gleichförmig nähern, so dass innerhalb dieser Ladungsverteilung die für das Kernpotential verantwortliche Ladung wie r^3 abnimmt.

Zurück zur Energieverschiebung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung. Für $l = 0$ kommt nur $j = 1/2$ in Frage, und für diesen Fall ist $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle \propto l = 0$, so dass für ein regularisiertes Integral über r , welches eine realistische ausgedehnte Kernladungsverteilung berücksichtigt, die gesamte Verschiebung $\Delta E_{\text{SpB}}(l = 0) = 0$ ist. Das hat dann zur Folge, dass für $l = 0$ im zweiten Term in Klammern in (6.2.70) der Nenner $l + 1/2 = 1/2 \neq 1$ lautet. (6.2.70) gilt demnach nur für $l \geq 1$.

6.2.3. Darwin-Term

Wie zuletzt bemerkt ist $\Delta E_{\text{SpB}} = 0$ für $l = 0$. Stattdessen folgt aus der Dirac-Gleichung für $l = 0$ der Darwin-Term

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8(Mc)^2} \nabla^2 V = -\frac{\hbar^2}{8M^2c^2} 4\pi e Q_{\text{Kern}}(\mathbf{x}) = \frac{\pi\hbar^3 (Z\alpha)}{2M^2c} \delta^{(3)}(\mathbf{x}), \quad (6.2.71)$$

mit der Kernladungsdichte $Q_{\text{Kern}}(\mathbf{x})$. Heuristisch läßt sich diese Korrektur als ‘‘Zitterbewegung’’ des Elektrons um eine Comptonwellenlänge,

$$\delta r = \lambda_c = \frac{\hbar}{Mc}, \quad (6.2.72)$$

beschreiben, wodurch es ein ‘‘ausgeschmiertes’’ Kernpotential wahrnimmt:

$$\begin{aligned} \langle V(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \rangle &= V(\mathbf{x}) + \underbrace{\langle \delta\mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle}_{=0} + \frac{1}{2} \langle (\delta\mathbf{x} \cdot \nabla)^2 V \rangle + \dots \\ &= V(\mathbf{x}) + \frac{1}{6} (\delta r)^2 \nabla^2 V(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (6.2.73)$$

wobei die Mittelung $\langle \cdot \rangle$ über die räumliche Ausrichtung von $\delta\mathbf{x}/|\delta\mathbf{x}| = \delta\mathbf{x}/\delta r$ erfolgt und wir im letzten Term für diese Mittelung genutzt haben, dass, für einen festen Vektor \mathbf{a} , diese der Mittelung über den relativen Winkel zwischen $\delta\mathbf{x}$ und \mathbf{a} erfolgt,

$$\langle (\delta\mathbf{x} \cdot \mathbf{a})^2 \rangle = \int \frac{d\Omega}{4\pi} (\delta\mathbf{x} \cdot \mathbf{a})^2 = \int \frac{\sin\theta}{4\pi} d\theta d\varphi (\delta\mathbf{x})^2 \mathbf{a}^2 \cos^2\theta = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\xi \xi^2 (\delta r)^2 \mathbf{a}^2 = \frac{1}{3} (\delta r)^2 \mathbf{a}^2. \quad (6.2.74)$$

Aufgrund der Proportionalität zur näherungsweise delta-Distributionsartigen Kernladungsdichte trägt der Term in erster Ordnung Störungstheorie nur zur Verschiebung der S -Zustände bei, die, wie wir uns erinnern, bei $\mathbf{x} = 0$ einen Cusp aufweisen und somit nicht verschwinden,

$$\langle n, j, l | H_D | n, j, l \rangle = \frac{\pi\hbar^3 (Z\alpha)}{2M^2c} |\psi_{nl}(0)|^2 = \frac{Mc^2 (Z\alpha)^4}{2 n^3} \delta_{l,0}. \quad (6.2.75)$$

Diese Verschiebung ist formal identisch zum ($l = 0$)-Beitrag $(\Delta E_{\text{SpB}})_{j=1/2}$, so dass mit dem Darwin-Term (6.2.70) auch für $l = 0$ gilt. Insgesamt ergibt sich mit $1 \text{ Ry} = Mc^2\alpha^2/2$ die

6. Näherungsmethoden

Feinstruktur

$$\Delta E_{\text{rKE}} + \Delta E_{\text{SpB}} + \Delta E_{\text{D}} = 1 \text{ Ry} \frac{Z^2 (Z\alpha)^2}{n^2} \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{j + 1/2} \right\},$$

für $j = l \pm 1/2, \quad l \geq 0.$ (6.2.76)

Bemerkungen:

- Die Feinstruktur hebt die Degenerierung teilweise auf, während die Entartung zwischen den $^2S_{1/2}$ und $^2P_{1/2}$ Niveaus erhalten bleibt, und zwar, innerhalb der Dirac-Theorie, in allen Ordnungen in α .
- Eine Aufspaltung dieser Energieniveaus ist erst innerhalb der QED zu beschreiben bzw. geschieht unter der Ankopplung an das magnetische Moment des Kerns:⁴
 - **Lambshift** – (QED-Effekt: Vakuum-Fluktuationen: Feynmandiagramme beschreiben die führenden Effekte.)

$$\Delta E_{\text{Lamb}} \approx -\frac{4}{3\pi} Mc^2 \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^4 n\alpha \ln(Z\alpha) \delta_{l,0}. \quad (6.2.77)$$

- **Hyperfeinstruktur** – ($\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}$ -Kopplung des Elektronspins und den Kernspin \mathbf{I} bzw. das kernmagnetische Moment)

Hier führen wir nur noch die spektroskopische Notation

$$^{2s+1}L_j \quad \text{für} \quad |j, l, s\rangle \quad (6.2.78)$$

ein und zeigen die Feinstruktur sowie Lamb- und HFS-Aufspaltungen für Wasserstoff:

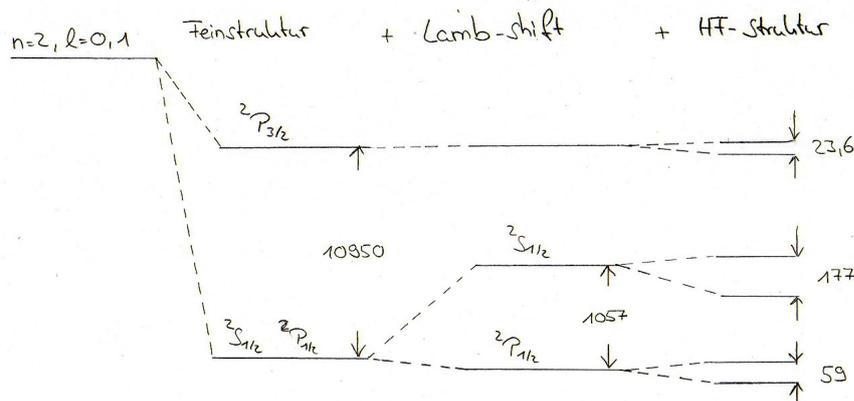


Abbildung 6.2.: Die Aufspaltung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms in MHz

⁴Siehe z.B. F. Schwabl, QM I, Kap. 12.4 [1].

6.3. H-Atom im äußeren Feld: Zeeman- und Stark-Effekt

Die in der Praxis wesentliche Kopplung der Elektronen über ihren Bahndrehimpuls und Spin an ein magnetisches bzw. elektrisches Feld führt zu einer weiteren Verschiebung bzw. Aufspaltung der Linien der elektronischen Zustände. Hiervon wollen wir die Grundzüge des Zeeman- sowie des Stark-Effekts kurz abreißen.

6.3.1. Zeeman-Effekt

Der Hamiltonian des Wasserstoff-Atoms enthält über den besprochenen Coulomb und dessen relativistische Korrekturen $H_{\text{rel}} = H_{\text{rKE}} + H_{\text{D}} + H_{\text{SpB}}$ i.allg. noch einen Zeeman-Anteil:

$$H = H_0 + H_{\text{rel}} + H_{\text{Zeeman}} \quad (6.3.79)$$

Der Zeeman-Term berücksichtigt die Kopplung an ein Magnetfeld und hat je nach dessen Stärke qualitativ unterschiedliche Auswirkungen.

(a) (Spin-)Zeeman-Effekt für schwaches Magnetfeld

Mittels der in Gln. (5.2.102), (5.2.103) bestimmten Clebsch-Gordan-Koeffizienten erhalten wir, für $j_z = m_j$,

$$\langle S_z \rangle_{(n,j=l\pm 1/2,m_j,l,1/2)} = \pm \frac{\hbar m_j}{2l+1} \quad (6.3.80)$$

Den Zeeman-Term, d.h., den Dipol-Beitrag zur Kopplung des Gesamtdrehimpulses an ein Magnetfeld, haben wir in Kapitel 5.3.2 bestimmt, s. Gln. (5.3.114) und (5.3.118):

$$H_{\text{Zeeman}} = -\frac{e}{2Mc} (L_z + 2S_z) B = -\frac{\mu_B}{\hbar} (J_z + S_z) B \quad (6.3.81)$$

Daraus ergibt sich, in erster Ordnung Störungstheorie, die Energieverschiebung

$$\Delta E_{\text{Zeeman}}(l \pm 1/2, m_j, l) = -\mu_B B m_j \left(1 \pm \frac{1}{2l+1} \right) \quad (6.3.82)$$

Im Unterschied zum "normalen" (L-)Zeeman-Effekt werden alle degenerierten Niveaus aufgespalten.

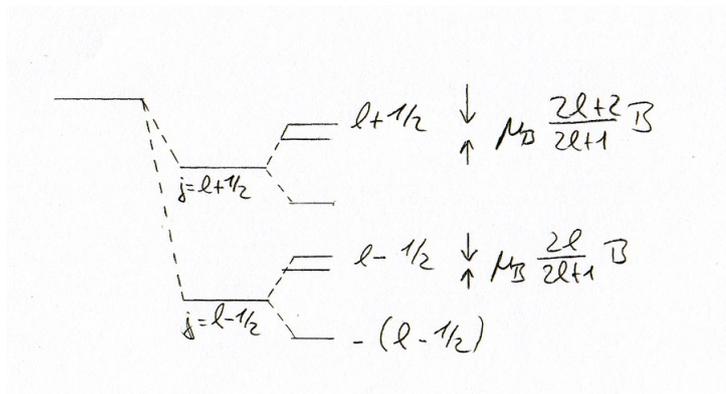


Abbildung 6.3.: "Anomaler" Zeeman-Effekt. Die Niveaus $l \pm 1/2$ werden durch das Feld in $2l + 2$ bzw. $2l$ Niveaus verschiedenen m_j aufgespalten.

6. Näherungsmethoden

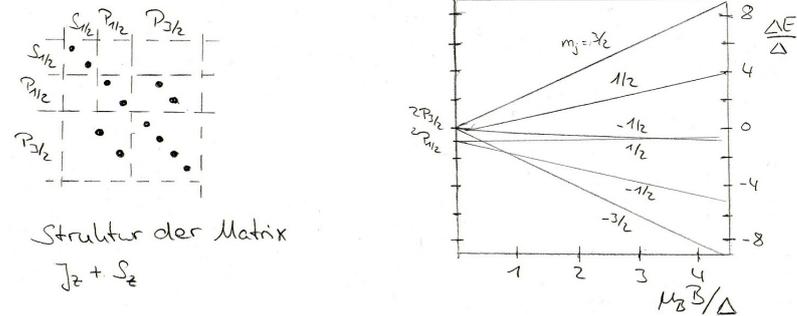


Abbildung 6.4.: Die linke Abbildung zeigt die Struktur der Matrix $J_z + S_z$, in der Punkte die nichtverschwindenden Matrixelemente markieren. Der Graph rechts skizziert die relative Energieverschiebung $\Delta E_{\text{Zeeman}}/\Delta$ als Funktion des reduzierten Magnetfeld des $\mu_B B/\Delta$ für $n = 2$ und $P_{1/2}, P_{3/2}$, mit $\Delta = Mc^2(Z\alpha)^4/32$.

Bemerkung:

- Es gibt keine nichtverschwindenden Matrixelemente zwischen $l = 0$ und $l = 1$, da ein Drehimpuls ein Axialvektor und somit H_{Zeeman} gerade unter Paritäts-Transformationen ist.

(b) Starkes Feld: Paschen–Back-Effekt

Wenn B so stark ist, dass $H_{\text{Zeeman}} \gg H_{\text{rel}}$ ist, wählen wir die gemeinsame Basis der Eigenzustände $|n l m_l; 1/2 m_s\rangle, m_s = \pm 1/2$, von H_0 und H_{Zeeman} . Aus

$$\Rightarrow \Delta E_{\text{Zeeman}}(n l m_l; m_s) = \mu_B B (m_l + 2m_s) = \mu_B B (m_j + m_s), \quad (6.3.83)$$

zu denen dann noch relativistische Korrekturen hinzukommen.⁵

Insgesamt ergibt sich in Abb. 6.4 gezeigte B -Abhängigkeit der Zeemanaufspaltung, welche sich im Rahmen der degenerierten Störungstheorie berechnen lässt.⁶

Bemerkung:

- Für ein starkes B -Feld (Paschen–Back-Effekt) präzedieren \mathbf{L} und \mathbf{S} unabhängig voneinander um \mathbf{B} . Dann sind s, s_z, l, l_z und j_z gute Quantenzahlen, nicht aber j . Dies sieht man in Abb. 6.4 daran, dass der Zustand zu $m_l + 2m_s = 0$ eine Superposition zweier Zustände zu verschiedenen $j = l \pm 1/2$ ist.

6.3.2. Stark-Effekt

Wir betrachten abschließend noch die Bewegung der Elektronen in einem konstanten, homogenen \mathbf{E} -Feld, $\mathbf{E} = \mathcal{E} \mathbf{e}_z$, welche stets als Paradebeispiel für die Nutzung der Störungstheorie in 2. Ordnung dient. Das Elektron koppelt in erster Näherung über den elektrischen Dipolterm,

$$H_{\text{eD}} = -e \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} = -e \mathcal{E} z, \quad (6.3.84)$$

⁵Für die Korrektur in 1. Ordnung Störungstheorie siehe F. Schwabl, *Quantenmechanik I* [1], Kapitel 14.1.2.

⁶Siehe a.a.O. [1], Kapitel 14.1.3.

an das elektrische Feld. Mit Hilfe des Kommutators $[L_z, z] = 0$ erhalten wir:

$$0 = \langle n l m | [L_z, z] | n' l' m' \rangle = (m - m') \langle n l m | z | n' l' m' \rangle \quad (6.3.85)$$

$$\Rightarrow m = m'. \quad (6.3.86)$$

Der Dipoloperator ist als vektorielle Größe, $\propto \mathbf{x}$, ungerade unter der Paritätstransformation,

$$P\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, \quad \text{woraus folgt, dass } l' = l \pm (2n + 1), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (6.3.87)$$

d.h., dass er Übergänge nur zwischen Zuständen unterschiedlicher Parität induzieren kann – andernfalls wäre das gesamte Matrixelement ungerade unter P – dazu sei an (4.4.113) erinnert. Im Zusammenhang mit der elektrischen Dipolstrahlung werden wir in Abschnitt 6.4.4 zeigen, dass nur $n = 0$ zu einem nichtverschwindenden Matrixelement führt, die Auswahlregel in l also

$$l' = l \pm 1 \quad (6.3.88)$$

lautet. Wir erhalten also für die Stark-Verschiebung des Grundzustands:

$$1. \text{ Ordnung : } E_1^{(1)} = 0 \quad \text{wegen eben dieser Paritätsbedingung,} \quad (6.3.89)$$

$$2. \text{ Ordnung : } E_1^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} e^2 \mathcal{E}^2 \frac{|\langle n, 1, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1 - E_n}. \quad (6.3.90)$$

Der Größenordnung nach ergibt dies $E_1^{(2)} \cong -a_B^3 \mathcal{E}^2$, und eine exakte Berechnung ergibt $E_1^{(2)} = -\frac{9}{4} a_B^3 \mathcal{E}^2 = -\frac{1}{2} \alpha_P \mathcal{E}^2$, mit der Polarisierbarkeit des Wasserstoffatoms

$$\alpha_P = \frac{9}{2} a_B^3. \quad (6.3.91)$$

Anmerkungen:

- Im Grundzustand gibt es der P-Symmetrie wegen **nur den Stark-Effekt 2. Ordnung!**
- Für angeregte Zustände sind Aufspaltungen auch in 1. Ordnung möglich und erfordern i. allg. die entartete Störungstheorie.

6.4. Zeitabhängige Störungstheorie

In diesem Abschnitt behandeln wir ein weiteres für die Praxis sehr relevantes Näherungsverfahren auf der Grundlage einer störungstheoretischen Entwicklung in Potenzen einer Korrektur zu einem gegebenen ungestörten Hamiltonoperator H_0 . Im Unterschied zur zuvor besprochenen Behandlung von Eigenzuständen geht es hier um die Modifikation des Zeitentwicklungsoperators durch den Störterm. Dies wird uns insbesondere zur grundlegenden Behandlung von Übergängen zwischen atomaren Zuständen führen und somit helfen, die bereits vor Entwicklung der Quantenmechanik beobachteten Linien und die Eigenschaften des ausgesandten Lichts zu charakterisieren.

6.4.1. Wechselwirkungsbild

Um die Störungsreihe in einer einfachen Form formulieren zu können, führen wir zunächst das sogen. Wechselwirkungsbild ein. Dazu definieren wir zunächst das zu lösende Problem: Ab einem Zeitpunkt

6. Näherungsmethoden

$t = t_0$ werde ein gegebener, zeitunabhängiger Hamiltonoperator H_0 durch einen additiven zeitabhängigen Störterm $V(t)$ modifiziert, d.h., der Beitrag von V zu H "eingeschaltet":

$$H(t) = H_0 + V(t)\theta(t - t_0) \quad (6.4.92)$$

Auf diese Weise erhalten wir vor und nach dem Zeitpunkt t_0 unterschiedliche Ausgangssituationen für die Lösung der Schrödinger-Gleichung:

- (i) $t < t_0$: Eigenzustände von H , $(H_0 - E_m)|m\rangle = 0$, sind stationär :

$$|m, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|m\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|m\rangle . \quad (6.4.93)$$

- (ii) $t \geq t_0$: Die Zustände $|m, t\rangle$ sind nicht mehr stationär,

da $|m\rangle$ im allgemeinen kein Eigenzustand zu H mehr ist.

Für kleine V wird sich jedoch wiederum eine störungstheoretische Behandlung in der Basis $\{|m\rangle\}$ von H_0 anbieten. Dazu isolieren wir zunächst die freie Zeitentwicklung im **Wechselwirkungsbild**, auch **Dirac-Bild** genannt: Mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators des ungestörten, zeitunabhängigen Hamiltonians,

$$\mathcal{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} = \sum_m |m\rangle e^{-iE_m t} \langle m| , \quad (6.4.94)$$

definieren wir für einen zeitabhängigen Zustand $|\psi, t\rangle$ im Schrödingerbild den zugehörigen Zustand im Wechselwirkungsbild als

$$\underbrace{|\psi, t\rangle}_\text{WW-Bild} = \mathcal{U}_0^\dagger(t) \underbrace{|\psi, t\rangle}_\text{Schrödinger-Bild} , \quad (6.4.95)$$

so dass, eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung diese die Form

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle_I = -H_0 \mathcal{U}_0^\dagger(t) |\psi, t\rangle + \mathcal{U}_0^\dagger(t) [H_0 + V(t)] |\psi, t\rangle \quad (6.4.96)$$

erhält. Hierin heben sich die Beiträge proportional zu H_0 gegenseitig weg, da der zeitunabhängige Operator H_0 mit \mathcal{U}_0^\dagger kommutiert. Wir erhalten somit die

Schrödinger-Gleichung im Wechselwirkungsbild,

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle_I = V_I(t) |\psi, t\rangle_I , \quad (6.4.97)$$

$$\text{mit } V_I(t) = \mathcal{U}_0^\dagger(t) V(t) \mathcal{U}_0(t) . \quad (6.4.98)$$

Anmerkung:

- Im Vergleich zu einem Operator \hat{O}_H im Heisenberg-Bild,

$$\hat{O}_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t) \hat{O} \underbrace{\mathcal{U}(t)}_{\text{Voller Zeitentwicklungs-Operator}} , \quad (6.4.99)$$

mit $\mathcal{U}(t) = \exp(-iHt/\hbar)$, trägt in (6.4.98) lediglich der Zeitentwicklungsoperator von H_0 bei.

Wir erhalten die Lösung der Schrödinger-Gleichung im Wechselwirkungsbild wiederum in Form einer **Dyson-Reihe**,

$$|\psi, t\rangle = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) \right] |\psi, t_0\rangle, \quad (6.4.100)$$

vgl. (2.1.11), welche im Wechselwirkungsbild zur **von Neumann-Reihe** wird:

$$|\psi, t\rangle_I = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) \dots V_I(t_n) \right] |\psi, t_0\rangle_I. \quad (6.4.101)$$

In störungstheoretischer Näherung wird die Reihe bis zu einer endlichen Ordnung n ausgewertet, und aufgrund der Zeitintegrale wird die Qualität dieser Näherung i.allg. von der Struktur von V_I bzgl. der Zustände sowie von der Zeitdifferenz zwischen t und t_0 abhängen.

6.4.2. Sudden Approximation

Bevor wir die Störungsreihe für zeitabhängige $V(t)$ konkret auswerten, betrachten wir hier den einfacheren Fall einer *plötzlichen Parameteränderung* zu einem festen Zeitpunkt $t_0 = 0$, bei dem sich dadurch der zuvor unveränderliche Hamiltonoperator von H_0 zu H ändert und danach wiederum konstant bleibt,

$$(i) \quad t \leq 0 : \quad H = H_0, \quad (6.4.102)$$

$$(ii) \quad t \geq 0 : \quad H = H_0 + V, \quad V \equiv \text{const.} \quad (6.4.103)$$

Praktisch bedeutet dies, dass die ‘‘Schaltzeit’’ kürzer als alle charakteristischen Zeiten der nachfolgenden Dynamik seien,

$$\tau_S \ll \tau \cong (\max \Delta E)^{-1}. \quad (6.4.104)$$

Ein Beispiel kann der α -Zerfall eines Atomkerns sein, nach dem die Elektronenwellenfunktion sich innerhalb einer Zeit an die veränderte Kernladungszahl anpasst, welche viel größer ist als die Zeitspanne, während derer das α -Teilchen den Ausdehnungsbereich des Atoms verlassen hat. Unmittelbar nach dem Zerfall befinden sich die Elektronen im selben Zustand wie zuvor, und es stellt sich die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit sie sich nach der Anpassung in einem anderen Zustand befinden. Die Eigenzustände und Eigenwerte vor und nach der Parameteränderung seien:

$$\text{von } H = H_0 : \{ |n^0\rangle; E_n^{(0)} \}, \quad (6.4.105)$$

$$\text{von } H = H_0 + V : \{ |n\rangle; E_n \}. \quad (6.4.106)$$

Gegeben sei ferner der Anfangszustand $|\psi, t = 0\rangle$ vor der Parameteränderung, so dass die Zeitentwicklung für $t \geq 0$ unter Anwendung von (6.4.94) einfach lautet:

$$|\psi, t\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \langle n | \psi, 0\rangle, \quad (6.4.107)$$

Hieraus resultiert eine Übergangswahrscheinlichkeit, d.h., die Wahrscheinlichkeit

$$P_{\psi \rightarrow n} = |\langle n | \psi, 0\rangle|^2, \quad (6.4.108)$$

dass sich das System zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $|n\rangle$ befindet. Wählt man z.B. den Anfangszustand $|\psi, t < 0\rangle = |m^0\rangle$, dann können wir diese Übergangswahrscheinlichkeit $P_{mn} = P_{m \rightarrow n}$ störungstheoretisch

6. Näherungsmethoden

auswerten und finden dass

$$P_{mn} = \delta_{nm} + (1 - \delta_{nm}) \frac{|\langle m^0 | V | n^0 \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + O(\langle V \rangle^3). \quad (6.4.109)$$

Wir stellen fest: Für kontinuierliche Spektren $\{E_n^{(0)}\}$ kommt es zu einer Divergenz bei $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$, welche darauf zurückzuführen ist, dass die Annahme (6.4.104) hier nicht anwendbar ist. Im folgenden Abschnitt werden wir auch für solche Spektren eine brauchbare Näherung bestimmen.

6.4.3. Übergänge 1. Ordnung und Fermis Goldene Regel

Wir kehren nun zur von Neumann-Reihe (6.4.101) zurück und bestimmen damit ebenfalls die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von $|m, t_0\rangle$ nach

$$|n, t\rangle = \mathcal{U}_0(t) |n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle. \quad (6.4.110)$$

(Wie in Abschnitt 6.4.1 bezeichnen wir die ungestörten Eigenzustände und Eigenwerte von H_0 wieder mit $|n\rangle$ und E_n .) Wir stellen also implizit die Frage: Gegeben ein Zustand $|\psi, t_0\rangle$ zum Zeitpunkt des Anschaltens von $V(t)$ und gegeben die weitere Zeitentwicklung unter $H(t)$ bis $t > t_0$, mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet sich das System, beschrieben durch $|\psi, t\rangle$ dann in einem Eigenzustand n des (ungestörten) Hamiltonoperators H_0 , zum Eigenwert E_n ? Diese läßt sich z.B., nach Abschalten von V zum Zeitpunkt t , durch wiederholte projektive Messungen auf die Energieeigenzustände bestimmen.

Es gilt allgemein, dass

$$P_{|\psi, t\rangle \rightarrow |n, t\rangle} = |\langle n, t | \psi, t \rangle|^2, \quad \text{mit} \quad (6.4.111)$$

$$\langle n, t | \psi, t \rangle = \langle n | \mathcal{U}_0^\dagger(t) | \psi, t \rangle = \langle n | \psi, t \rangle_I, \quad (6.4.112)$$

wobei wir (6.4.95) verwandt haben. Den hier auftretenden Zustand $|\psi, t\rangle_I$ im Wechselwirkungsbild berechnen wir gemäß (6.4.101) in

1. Ordnung Störungstheorie:

$$|\psi, t\rangle_I^{(1)} = |\psi, t_0\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi, t_0\rangle_I. \quad (6.4.113)$$

Für den Anfangszustand wählen wir:

$$|\psi, t_0\rangle = |m, t_0\rangle = \mathcal{U}(t_0) |m\rangle \quad \Rightarrow \quad |\psi, t_0\rangle_I = |m\rangle. \quad (6.4.114)$$

Damit erhalten wir:

$$|\psi, t\rangle_I^{(1)} = \left[1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right] |m\rangle, \quad (6.4.115)$$

so dass aus (6.4.112) folgt, dass

$$\langle n, t | \psi, t \rangle^{(1)} = \langle n | \psi, t \rangle_I^{(1)} = \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | V(t') | m \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)t'}, \quad (6.4.116)$$

wobei wir im letzten Schritt noch (6.4.98) genutzt haben, um V_I in V zurück zu transformieren. Insgesamt ergibt sich die

Übergangswahrscheinlichkeit in 1. Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie:

$$P_{mn}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{mn}t'} \langle n | V(t') | m \rangle \right|^2 \quad (6.4.117)$$

$$\text{für } n \neq m, \quad \omega_{nm} = \hbar^{-1} (E_n - E_m), \quad (6.4.118)$$

Für $m = n$ gilt, für hermitesches $V^\dagger = V$, dass

$$P_{mm}(t) = 1 + \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle m | V(t') | m \rangle \right|^2. \quad (6.4.119)$$

Wir merken noch an, dass der Faktor $\mathcal{U}_0(t)$ in (6.4.110) allein der Ästhetik der nachfolgenden Gleichungen dient, da $|n\rangle$ ein Eigenzustand zu H_0 ist und \mathcal{U}_0 daher die Multiplikation des Übergangsmatrix-Elements mit einer reinen Phase bedeutet, welche physikalisch nicht meßbar ist und in P herausfällt. Man könnte die Argumentation genauso ohne diesen freien Zeitentwicklungsoperator führen und hätte von der Umschreibung von $|\psi, t_0\rangle$ in $|\psi, t_0\rangle_I$ dann noch einen Faktor zusätzlichen Faktor $\mathcal{U}_0(t)$, ausgewertet zur Meßzeit t , welcher wiederum eine irrelevante Phase ergibt. Würden wir dagegen auf eine Superposition mehrerer Eigenzustände von H_0 projizieren, so ergibt das $\mathcal{U}_0(t)$ nur dann eine reine Phase, wenn diese Zustände in den entsprechenden Eigenenergie degeneriert sind. Erst wenn die Superposition Zustände verschiedener Energie beinhaltet, spielt es eine Rolle, ob \mathcal{U}_0 eingeschlossen wird oder nicht. In dem Fall wären damit aber auch verschiedene Messungen assoziiert. Insgesamt zeigt sich hier, dass, ähnlich wie beim Heisenberg-Bild, die Zustände und somit die Matrixelemente und Erwartungswerte im Wechselwirkungsbild bezüglich der *freien* Zeitentwicklung alle bei t_0 , der Anschaltzeit (oder einer beliebigen anderen Referenzzeit) ausgewertet werden, während die Zeitabhängigkeit der Zustände und Operatoren nur noch die Wechselwirkungseffekte berücksichtigt.

Wählt man $V(t) \equiv V$ konstant, so läßt sich der Phasenfaktor $\exp\{i\omega_{mn}t\}$, mit den Frequenzdifferenzen ω_{mn} integrieren, wobei, für $n \neq m$, derselbe Energienenner wie in (6.4.109) entsteht. Darüberhinaus erscheint jedoch im Zähler zusätzlich eine Sinusfunktion, welche den Pol bei $\omega_{mn} = 0$ regularisiert. Für $m = n$ ist die Phase gleich 1 und das Integral ergibt den Faktor $t - t_0$. Mit diesem Fall konstanten V beschäftigen wir uns in der folgenden

Anwendung: Übergang in ein System mit i.allg. kontinuierlichem Spektrum $\{E\}$:

Wie oben erwähnt, war die im Rahmen der Sudden Approximation berechnete Übergangswahrscheinlichkeit (6.4.109) für konstantes $V(t) \equiv V$ für Systeme mit kontinuierlichem Energiespektrum nicht anwendbar. Dieser Fall ist im Rahmen der Störungstheorie wie im folgenden gezeigt behandelbar.

Für konstantes Störpotential gilt also, für $n \neq m$:

$$P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{mn}t} - 1}{\omega_{mn}} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\sin(\omega_{mn}t/2)}{\omega_{mn}/2} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.120)$$

Da unser Interesse im folgenden kontinuierlichen Energiespektren gilt, betrachten wir die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit und teilen daher P_{nm} durch die Zeit und erhalten die

6. Näherungsmethoden

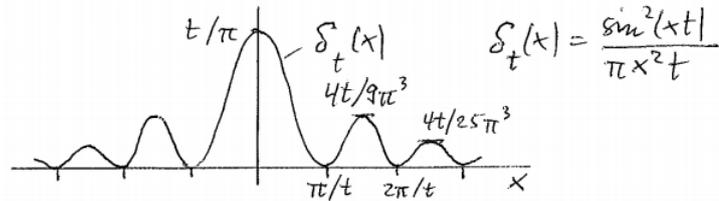


Abbildung 6.5.: Die Funktion $\delta_t(x)$.

Übergangsrate

$$\Gamma_{mn}(t) = \frac{P_{mn}(t)}{t} = \frac{\sin^2(\omega_{mn}t/2)}{\hbar^2(\omega_{mn}/2)^2 t} |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (6.4.121)$$

Für $t \rightarrow 0$ divergiert diese Rate in Form einer Funktion $\delta_t(x) = \sin^2(xt)/(\pi x^2 t)$ ebensowenig wie für $x \sim \omega_{mn} \rightarrow 0$, siehe Abb. 6.5.

$\delta_t(x)$ verhält sich wie t/π für $x \rightarrow 0$, ist für große x nach oben durch $\sim (\pi x^2 t)^{-1}$ beschränkt, und es gilt $\int dy (\sin y/y)^2 = \pi$. Integration nach Multiplikation mit einer Testfunktion F ergibt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dx \delta_t(x) F(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int dy \frac{\sin^2 y}{\pi y^2} F(y/t) = F(0), \quad (6.4.122)$$

und damit ist δ_t eine regularisierte δ -Distribution, d.h., sie konvergiert für $t \rightarrow \infty$ im *distributionellen Sinne* gegen die Dirac-Distribution,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \delta_t(x) = \delta(x), \quad (6.4.123)$$

$$\text{so dass} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \Gamma_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n | V | m \rangle|^2, \quad (6.4.124)$$

wobei wir $\delta(sx) = |s|^{-1} \delta(x)$ verwendet haben.

Anmerkung: Anstelle der Definition (6.4.121) könnte man auch die Zeitableitung

$$\tilde{\Gamma}_{mn}(t) = \frac{dP_{mn}(t)}{dt} = \frac{\sin(\omega_{mn}t)}{\hbar^2(\omega_{mn}/2)} |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (6.4.125)$$

als "Rate" definieren. Die Funktion $\tilde{\delta}_t(x) = \sin(2xt)/(\pi x)$ konvergiert ebenfalls im distributionellen Sinne gegen die Delta-Distribution, so dass auch hier gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{\Gamma}_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n | V | m \rangle|^2. \quad (6.4.126)$$

Allerdings ist $\tilde{\Gamma}_{mn}$ nicht positiv definit und läßt sich daher für endliche t nicht für alle x als Übergangsrate interpretieren. Eine alternative Vorgehensweise ist daher, die Übergangswahrscheinlichkeit P_{mn} mit $1 = t/t$ zu multiplizieren und für große t das Ergebnis $(2\pi t/\hbar) \delta(E_n - E_m) |\langle n | V | m \rangle|^2$ für die Definition der Rate zu verwenden.

Wir betrachten nun ein kontinuierliches Energiespektrum, mit Zustandsdichte ρ ,

$$\rho(E_n) dE_n = \#(\text{Zustände}) \text{ in } (E_n, E_n + dE_n), \quad (6.4.127)$$

und finden mit deren Hilfe die gesamte

Übergangsrate aus dem Zustand $|m\rangle$ in die Menge $\{|n\rangle\}$ von Zuständen mit $E_n = E_m$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{mn} = \rho(E_m) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m | V | n \rangle|^2. \quad (6.4.128)$$

Fermis Goldene Regel

Hierbei haben wir angenommen, dass alle $|n\rangle$ im Zustandsbereich von $E_m = E_n$ die gleichen Übergangsmatrixelemente $|\langle n | V | m \rangle|$ haben.

Bedingungen für die Gültigkeit von Fermis Goldener Regel sind:

- Die Breite der Energieverteilung $\rho(E_n)$ der Endzustände muss sehr viel größer als die Breite der Funktion $\delta_t(\omega_{mn}/2)$ bei endlicher Zeit t , damit diese in guter Näherung durch eine δ -Distribution ersetzt werden kann. (Die Funktion $\delta_t(x)$ konvergiert im distributionellen Sinne gegen die Delta-Distribution, vgl. (6.4.122).) Die erste Bedingung lautet daher, dass $\Delta E \gg 2\pi\hbar/t$.
- Viele Endzustände müssen innerhalb der regularisierten δ -Funktion f_t liegen für $t < \infty$, damit wir die Lage der Zustände mit Hilfe einer Zustandsdichte nähern können.

Damit ist der zeitliche Gültigkeitsbereich von Fermis Goldener Regel das Intervall

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \ll t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta\epsilon}, \quad (6.4.129)$$

mit

$$\begin{aligned} \delta\epsilon &= \text{größter Abstand der Endzustandsniveaus um } E_m, \\ \Delta E &= \text{Breite der Verteilung der Niveaus um } E_m. \end{aligned}$$

Hiermit können wir noch auf die Frage zurückkommen, die sich hinsichtlich der Interpretation von P_{mn} als Übergangswahrscheinlichkeit stellt: Für $\omega_{mn} \rightarrow 0$ ist diese durch

$$P_{mn}(t)|_{\omega_{mn} \approx 0} \simeq \frac{t}{\hbar^2} |\langle n | V | m \rangle|^2 \ll \frac{4\pi}{\delta\epsilon^2} |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.130)$$

nach oben beschränkt und kann daher für ein kontinuierliches Spektrum auch Werte größer als 1 annehmen. Die Bedingung (6.4.130) muß daher als eine Obergrenze an die Matrixelemente von V im Vergleich zur Levelaufspaltung $\delta\epsilon$ hinsichtlich der Anwendbarkeit der störungstheoretischen Berechnung der Rate in 1. Ordnung Störungstheorie betrachtet werden.

Abschließend berechnen wir noch die

6. Näherungsmethoden

Verallgemeinerung für eine periodische Störung

Wir betrachten ein oszillierendes Potential, welches zum Zeitpunkt $t = 0$ angeschaltet wird,

$$V(t) = \theta(t) \left[F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t} \right]. \quad (6.4.131)$$

Wiederum unter der Annahme, dass die Matrixelemente sich für entartete Zustände nicht unterscheiden erhalten wir auf dieselbe Weise wie zuvor die Übergangsrate

$$\begin{aligned} \Gamma_{mn}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) |\langle n | F | m \rangle|^2 \right] \\ & + \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m + \hbar\omega) |\langle n | F^\dagger | m \rangle|^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.4.132)$$

Als eine zentrale Anwendung der zeitabhängigen Störungstheorie untersuchen wir im folgenden durch Licht induzierte Dipolübergänge zwischen atomaren Niveaus, und damit die Emission und Absorption von Photonen durch Atome.

6.4.4. Elektrische Dipolübergänge in Atomen*

Ohne die Wechselwirkung von Atomen mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld und die daran beobachteten scharfen Emissions- und Absorptionslinien in den charakteristischen Spektren hätte Anfang des 20. Jahrhunderts eine wesentliche Grundlage für die Entwicklung des Bohrschen Atommodells und somit auch der Quantenmechanik gefehlt. Wir besprechen im folgenden diese Emissions- und Absorptionsprozesse anhand der zuvor eingeführten zeitabhängigen Störungstheorie und Fermis Goldener Regel.

Zunächst erweitern wir hierfür unsere quantenmechanische Beschreibung der messbaren Eigenschaften eines einzelnen Elektrons im Potential des Kerns auf die einer beliebigen Anzahl von Elektronen.

Operatoren auf Vielteilchensystemen

In Abschnitt 5.1.3 hatten wir, als Hintergrundinformation, kurz Mehrteilchen-Wellenfunktionen, zunächst für das Beispiel von $N = 2$ Teilchen, besprochen, sowie, im Zusammenhang mit dem Spin-Statistik-Theorem und der bosonischen bzw. fermionischen Quantenstatistik, den Fall einer beliebig großen, aber festen Anzahl N , vgl. (5.1.62) ff. Im folgenden betrachten wir N -Teilchen-Zustände unabhängig von der Frage, ob es sich um ununterscheidbare oder unterscheidbare Teilchen handelt und erweitern die Beschreibung von Operatoren auf den N -Teilchen-Hilbertraum. Auf N -Teilchen-Zuständen (5.1.63) definiert man allgemein 1-Teilchen Operatoren auf einem der 1-Teilchenräume durch

$$\hat{O}_i |\psi^{(N)}\rangle \equiv \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{i-1} \otimes \hat{O}_i \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{N-i} |\psi^{(N)}\rangle, \quad (6.4.133)$$

und allgemeine 1-Teilchenoperatoren auf dem N -Teilchenraum entsprechend durch

$$\hat{O}^{(1)} |\psi^{(N)}\rangle \equiv \sum_{i=1}^N \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{i-1} \otimes \hat{O}_i \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{N-i} |\psi^{(N)}\rangle. \quad (6.4.134)$$

Ein Beispiel für solch einen 1-Teilchenoperator ist der Dichteoperator, definiert durch

$$\hat{O}_i = |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|, \quad (6.4.135)$$

das heißt,

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{i-1} \otimes |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{N-i}. \quad (6.4.136)$$

So wie im 1-Teilchenraum der Erwartungswert des Operators \hat{O}_i die entsprechende Wahrscheinlichkeits-Dichte ergibt,

$$\langle \psi_i | \hat{O}_i | \psi_i \rangle = |\psi_i(\mathbf{x})|^2, \quad (6.4.137)$$

so ergibt sich aus der Normierung der Zustände, $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$, die 1-Teilchen-Dichte

$$\langle \psi^{(N)} | \rho(\mathbf{x}) | \psi^{(N)} \rangle = \sum_{i=1}^N \int dx_1 \cdots dx_{i-1} dx_{i+1} \cdots dx_N |\psi^{(N)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{i-1}, \mathbf{x}, \mathbf{x}_{i+1}, \mathbf{x}_N)|^2 = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{x})|^2. \quad (6.4.138)$$

Alternativ können wir den 1-Teilchen-Dichteoperator auch bereits in Ortsdarstellung schreiben,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N | \rho(\mathbf{x}) | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \rangle &= \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_1) \cdots \delta(\mathbf{x}'_{i-1} - \mathbf{x}_{i-1}) \delta(\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \\ &\quad \times \delta(\mathbf{x}'_{i+1} - \mathbf{x}_{i+1}) \cdots \delta(\mathbf{x}'_N - \mathbf{x}_N) \\ &= \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \prod_{j=1}^N \delta(\mathbf{x}'_j - \mathbf{x}_j), \end{aligned} \quad (6.4.139)$$

wobei wir im letzten Schritt verwandt haben, dass wir wegen des weiteren Faktors $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ in der Delta-Distribution $\delta(\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}) \rightarrow \delta(\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}_i)$ das Argument \mathbf{x} ersetzen können. Der Operator ist also Diagonal in allen Koordinaten, so dass man, ohne die Matrixelemente bezüglich der Koordinaten \mathbf{x}_j aller N Teilchen explizit zu erwähnen, ihn kurz wie folgt schreibt:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (6.4.140)$$

In entsprechender Weise können wir den Hamiltonoperator eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld auf einen Hamiltonoperator für Atome mit mehreren Elektronen erweitern. Dieser hängt

6. Näherungsmethoden

dann von den Operatoren für deren Positionen \mathbf{x}_i und Impulse \mathbf{p}_i ab und kann, wie für das Beispiel des Dichteoperators zuvor besprochen, als Summe über die Hamiltonoperatoren der einzelnen Elektronen geschrieben werden,

$$H_0 = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + V(\mathbf{x}_i, t) + V_K(\mathbf{x}_i) \right). \quad (6.4.141)$$

Hier bezeichnet V_K das Potential des Kerns, noch ohne Kernspin, und $V(\mathbf{x}_i, t)$ fasst alle Wechselwirkungsterme der Elektronen mit dem elektromagnetischen Feld zusammen:

$$V(\mathbf{x}_i, t) = -\frac{e}{2Mc} \{ \mathbf{p}_i, \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \} + \frac{e^2}{2Mc^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{x}_i, t) + e \Phi(\mathbf{x}_i, t). \quad (6.4.142)$$

Coulomb-Potential, welches die abstoßende Wechselwirkung der Elektronen untereinander beschreibt, wird hier vernachlässigt. Entsprechend dem Operator (6.4.140) der Teilchendichte läßt sich dann auch ein Operator für die Teilchenstrom-Dichte definieren. Um ihn manifest hermitesch zu formulieren, wird er symmetrisiert definiert,⁷

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{M}, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\}. \quad (6.4.143)$$

Mit Hilfe von Teilchen- und Stromdichte schreiben wir das Potential als

$$V(t) = \sum_i V(\mathbf{x}_i, t) = \frac{e}{c} \int d^3x \left[-\mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}) \left(\frac{e}{2Mc} \mathbf{A}^2 + c\Phi \right)(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (6.4.144)$$

Für die weitere Auswertung beschränken wir uns auf ein

Freies Strahlungsfeld

in transversaler oder Coulomb-Eichung und ohne weitere Quellen, so dass \mathbf{A} das elektrische und magnetische Feld festlegt,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= 0; & \Phi &= 0, \\ \Rightarrow \quad \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A}, & \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (6.4.145)$$

Da wir Lichtwellen beschreiben wollen, genüge \mathbf{A} der Wellengleichung und kann somit (räumlich) Fourierentwickelt werden,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (6.4.146)$$

Wir benötigen weiterhin den Hamiltonian des Strahlungsfeldes, (im Volumen V)

$$H_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{V}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} (c^{-2} |\partial_t \mathbf{A}_{\mathbf{k}}|^2 + |\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}|^2) \quad (6.4.147)$$

⁷Vgl. diese mit der elektrischen Stromdichte

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = -c \frac{\delta H}{\delta \mathbf{A}} = \frac{e}{2M} \sum_i \left\{ \left[\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \right], \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\}$$

Ein Vergleich mit dem harmonischen Oszillator,

$$H_{\text{HO}} = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \quad (6.4.148)$$

ergibt die Äquivalenz von $m \rightsquigarrow \frac{1}{4\pi c^2}$, $\omega \rightsquigarrow ck$. Damit entspricht der Leiteroperator-Darstellung des Oszillators,

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}), \quad \text{mit } [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (6.4.149)$$

$$H_{\text{HO}} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (6.4.150)$$

die Darstellung des Photonfeldes

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{kV}} (a_{\mathbf{k}, \lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{h.c.}), \quad (6.4.151)$$

wobei $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}$ der Polarisationsvektor ist, $\lambda = 1, 2$, und $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \mathbf{k} = 0$ wegen der Coulomb-Eichung.

Die Auf- und Absteigeoperatoren genügen den Kommutatoren

$$[a_{\mathbf{k}, \lambda}, a_{\mathbf{k}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (6.4.152)$$

während alle anderen Kommutatoren, wie für den harmonischen Oszillator der Fall, verschwinden. Diese Kommutator-Relationen **quantisieren das Strahlungsfeld (Fockraum-Quantisierung oder auch 2. Quantisierung genannt)** und bilden die Grundlage der Quantenfeldtheorie des Strahlungsfeldes, der Quantenelektrodynamik (QED). $a_{\mathbf{k}, \lambda}^{(\dagger)}$ bezeichnet hierbei den Vernichter (Erzeuger) eines (Photon-)Quants (also eines Photons) mit der Wellenzahl \mathbf{k} und der Polarisierung λ . Ausgedrückt in diesen Operatoren entspricht der Hamiltonian des freien Strahlungsfeldes dem einer Summe unendlich vieler harmonischer Oszillatoren,

$$\Rightarrow H_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|. \quad (6.4.153)$$

Zustände im **Fockraum** lassen sich in der Basis der direkten (Tensor-)Produkte der Zustände dieser Oszillatoren ausdrücken:

$$|\dots, n_{\mathbf{k}, \lambda}, \dots\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}_i, \lambda_i} |n_{\mathbf{k}_i, \lambda_i}\rangle, \quad (6.4.154)$$

$$\text{mit } a_{\mathbf{k}, \lambda} |\dots, n_{\mathbf{k}, \lambda}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}, \lambda}} |\dots, n_{\mathbf{k}, \lambda} - 1, \dots\rangle, \quad (6.4.155)$$

$$a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger |\dots, n_{\mathbf{k}, \lambda}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}, \lambda} + 1} |\dots, n_{\mathbf{k}, \lambda} + 1, \dots\rangle. \quad (6.4.156)$$

Der jeweilige Grundzustand einer Wellenzahl-Mode ohne ein Photon, $n_{\mathbf{k}, \lambda} = 0$, bezeichnet das *Vakuum* in dieser Mode, der Fockzustand ohne ein einziges Photon das Vakuum $|0\rangle$ des Feldes.

Anmerkungen:

- Der Operator $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ ist im Wechselwirkungsbild bezüglich $H_0 + H_{\text{rad}}$ definiert, mit $H_0 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M}$.

6. Näherungsmethoden

- $(\rho(\mathbf{x}), \mathbf{j}(\mathbf{x}))$ ist in diesem Wechselwirkungs-Bild durch

$$(\rho_I(\mathbf{x}, t), \mathbf{j}_I(\mathbf{x}, t)) = e^{iH_0 t} (\rho(\mathbf{x}), \mathbf{j}(\mathbf{x})) e^{-iH_0 t} \quad (6.4.157)$$

zu ersetzen. Wir betrachten

Spontane Emission

Diese ist eine Folge der Wechselwirkung eines Photons mit einem atomaren Elektron und umfasst daher folgende Übergänge:

$$\begin{cases} \text{Atomares } e^- & : |m\rangle \rightarrow |n\rangle \\ \text{Strahlungsfeld} & : |0\rangle \rightarrow a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |0\rangle = |\dots, \mathbf{1}_{\mathbf{k},\lambda}, \dots\rangle \end{cases} \quad (6.4.158)$$

Da hierbei also ein Photon erzeugt wird, muß der entsprechende Beitrag zum Hamiltonoperator linear im Erzeugungsoperator und damit wegen (6.4.151) linear im Vektorpotential sein, was für den Term $\sim \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ mit \mathbf{A} in (6.4.144) der Fall ist. Wegen $a_{\mathbf{k},\lambda} |0\rangle \equiv 0$ trägt in der Goldenen Regel für die Rate Γ_{mn} , siehe (6.4.132), nur der 2. Term bei:

$$\Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda}(t) = \frac{(2\pi e)^2}{kcV} \delta(E_m - E_n - \hbar ck) \left| \left\langle n \left| \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \right| m \right\rangle \right|^2 \quad (6.4.159)$$

Für die Leistung dP_λ , welche im Raumwinkel $d\Omega$ abgestrahlt wird, gilt dann

$$dP_\lambda = \sum_{\mathbf{k} \in d\Omega} \hbar c k \Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda} \quad (6.4.160)$$

Für die Dichte der Zustände gilt

$$\frac{dN}{d^3k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (6.4.161)$$

Daraus folgt mit

$$d^3k = k^2 dk d\Omega \quad \text{und} \quad \mathbf{j}(\mathbf{k}) = \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (6.4.162)$$

die differentielle Leistung

$$\begin{aligned} dP_\lambda &= d\Omega \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} V \hbar c k \Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda} \\ &= d\Omega \int \frac{k^2 dk}{2\pi} \hbar e^2 \left| \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* | m \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar ck) , \end{aligned} \quad (6.4.163)$$

$$\Rightarrow \frac{dP_\lambda}{d\Omega} = \frac{\omega^2 e^2}{2\pi c^3} \left| \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* | m \rangle \right|^2 \Big|_{|\mathbf{k}|=\omega/c} \quad \text{mit} \quad \omega = (E_m - E_n)/\hbar \quad (6.4.164)$$

Für Atome gilt

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \cong ka_B = \frac{a_B}{\lambda} \cong \alpha \ll 1 \quad (6.4.165)$$

Daher können wir Fouriertransformierte entwickeln,

$$\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) | m \rangle = \langle n | \int d^3x \left(1 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \frac{1}{2} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})^2 + \dots \right) \mathbf{j}(\mathbf{x}) | m \rangle \quad (6.4.166)$$

$$= \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) | m \rangle - i \int d^3x \langle n | (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{j}(\mathbf{x}) | m \rangle + \dots, \quad (6.4.167)$$

und erhalten verschiedene Terme, welche der Reihe nach elektrische Dipolübergänge, magnetische Dipolübergänge, elektrische Quadrupolübergänge, etc. erfassen. Wir beschränken uns im folgenden auf

Elektrische Dipolübergänge (E1)

Diese rühren vom führenden Term her:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) = \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \int d^3x \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{M}, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\} \quad (6.4.168)$$

$$= \frac{\mathbf{P}}{M} := \frac{1}{M} \sum_i \mathbf{p}_i, \quad (6.4.169)$$

d.h. vom Gesamtimpuls der Elektronen. Für $\mathbf{X} = \sum_i \mathbf{x}_i$ (Schwerpunktskoordinaten von Teilchen gleicher Masse) ist

$$\frac{\mathbf{P}}{M} = \frac{i}{\hbar} [H_0, \mathbf{X}], \quad (6.4.170)$$

so dass

$$\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) | m \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle n | [H_0, \mathbf{X}] | m \rangle \quad (6.4.171)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n | \mathbf{X} | m \rangle, \quad (6.4.172)$$

proportional ist zum

Dipolmoment	$\mathbf{d}_{nm} = \langle n \mathbf{X} m \rangle.$ (6.4.173)
--------------------	--

Hieraus folgt die differentiell abgestrahlte Leistung

$$\frac{dP_\lambda}{d\Omega} = \frac{\omega^4 e^2}{2\pi c^3} |\mathbf{d}_{nm} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^*|^2 \quad (6.4.174)$$

Ein wesentliches Ergebnis ist hier, dass diese Leistung proportional zur *vierten Potenz der Frequenz des abgestrahlten Lichts* ist. Die Amplitude der Lichtwelle ist proportional zur Projektion des Dipolmoments auf deren Polarisationsvektor, und die Matrixelemente $e\mathbf{d}_{nm}$ des Dipoloperators $e\mathbf{X}$ bestimmen, welche Übergänge möglich sind. Dies besprechen wir nun weiter im Zusammenhang mit den

6. Näherungsmethoden

Auswahlregeln

Diese bestimmen, welche Matrixelemente von $\mathbf{d}_{nm} \neq 0$ sind. Der Gesamtdrehimpuls der Elektronen,

$$\mathbf{L} = \sum_i (\mathbf{x}_i \times \mathbf{p}_i) \quad (6.4.175)$$

erfüllt die übliche Drehimpulsalgebra sowie die Kommutatoren mit dem Dipoloperator $\mathbf{X} = (X, Y, Z)$:

$$[L_z, Z] = 0, \quad [L_z, X \pm iY] = \pm \hbar (X \pm iY). \quad (6.4.176)$$

“Sandwiched” zwischen Zustände $\langle l' m' |$ und $| l m \rangle$, folgen aus diesen Kommutatorgleichungen die Gleichungen

$$\langle l' m' | Z | l m \rangle (m' - m) = 0, \quad (6.4.177)$$

$$\langle l' m' | X \pm iY | l m \rangle (m' - m \mp 1) = 0. \quad (6.4.178)$$

für die Matrixelemente der drei Komponenten des Dipoloperators \mathbf{X} . Damit eines der obigen Matrixelemente ungleich Null ist, muss somit eine der drei Bedingungen

$$m' = \begin{cases} m \\ m \pm 1 \end{cases} \quad (6.4.179)$$

erfüllt sein. E1-Übergänge sind also nur möglich, wenn $|\Delta m| = |m' - m| \leq 1$ ist. Weiterhin folgt aus der Kommutatorgleichung (Beweis: Übung)

$$[\mathbf{L}^2, [\mathbf{L}^2, \mathbf{X}]] = 2\hbar^2 \{\mathbf{X}, \mathbf{L}^2\}, \quad (6.4.180)$$

die Gleichung

$$\langle l' m' | \mathbf{X} | l m \rangle (l + l') (l + l' + 2) [(l - l')^2 - 1] = 0, \quad (6.4.181)$$

für die Matrixelemente und hieraus die l -Auswahlregel

$$l' = l \pm 1. \quad (6.4.182)$$

Da $l, l' \geq 0$ sind, kann der erste Term in (6.4.181) nur für $l' = l = 0$ verschwinden. Hierfür ist jedoch $\langle 00 | \mathbf{X} | 00 \rangle = 0$ wegen der Paritätsasymmetrie von \mathbf{X} .

Anmerkung: Aufgrund der Kommutatorgleichungen stellen (6.4.177) und (6.4.178) drei Bedingungen dar, welche alle erfüllt sein müssen. Von diesen Bedingungen ist jeweils nur einer aufgrund der Auswahlregel (6.4.179) Genüge getan. In den beiden anderen ist dann der Faktor, welcher Kombinationen von m und m' enthält, ungleich Null, so dass die jeweiligen Matrixelemente gleich Null sein müssen. Von den drei Matrixelementen in diesen Bedingungen kann also immer nur eines ungleich Null sein. Wie wir im folgenden besprechen werden, lassen sich daraus Schlußfolgerungen ziehen für die

Polarisation des ausgesandten Lichts

- Für $m' = m$ sind die beiden Matrixelemente $\langle l' m' | X \pm iY | l m \rangle = 0$. Addiert bzw. subtrahiert man diese Gleichungen voneinander, so folgt, dass die Matrixelemente der X - und Y -Komponenten des Dipoloperators verschwinden, $\langle l' m' | X | l m \rangle = \langle l' m' | Y | l m \rangle = 0$, d.h., der Dipolvektor nimmt die

Form

$$\mathbf{d}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \langle l' m' | Z | l m \rangle \delta_{m' m} \delta_{l', l \pm 1}. \quad (6.4.183)$$

Neben der Auswahlregel $m' = m$ folgen aus den drei Gleichungen (6.4.177) und (6.4.178) daher, wie oben angemerkt, noch zwei weitere Bedingungen, dass die x - und y -Komponenten des Dipolvektors gleich Null sind.

Da aufgrund der Relativitätstheorie die masselosen Photonen keine longitudinale Polarisation besitzen können und daher stets $\boldsymbol{\epsilon}_{k,\lambda} \perp \mathbf{k}$ gilt, ist für $m' = m$ das Licht in der von \mathbf{d}_l und \mathbf{k} aufgespannten Ebene linear polarisiert. Wir bezeichnen diesen ersten möglichen Polarisationsvektor, welcher Photonen charakterisiert, die in Übergängen von m nach $m' = m$ ausgesandt werden, als $\boldsymbol{\epsilon}_{k,1}$, wählen für sie also den Polarisationsindex $\lambda = 1$. In der $(\mathbf{d}_l - \mathbf{k})$ -Ebene ist dann nur für Wellenvektoren in z -Richtung die Übergangswahrscheinlichkeit $\Gamma_{l'm,lm,k\hat{e}_z,1} = 0$, da

$$\Gamma_{l'm,lm,k,1} \propto |\mathbf{d}_l \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k,1}|^2 \propto \sin^2(\alpha), \quad (6.4.184)$$

mit Winkel α zwischen \mathbf{k} und \mathbf{d}_l .

Eine zweite mögliche lineare Polarisation $\boldsymbol{\epsilon}_{k,2}$, welche linear unabhängig von $\boldsymbol{\epsilon}_{k,1}$ ist, muß dann senkrecht auf dieser Ebene liegen, spielt aber wegen des Skalarprodukts mit \mathbf{d}_l , welches $\mathbf{d}_l \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k,2} = 0$ ist keine Rolle für die zugehörige Wahrscheinlichkeit, d.h. $\Gamma_{l'm,lm,k,2} = 0$.

- Für $m' = m \pm 1$ sind entsprechend $\langle l' m' | X \mp iY | l m \rangle = 0$, $\langle l' m' | Z | l m \rangle = 0$, d.h.

$$\langle l' m' | X | l m \rangle = \pm i \langle l' m' | Y | l m \rangle \quad (6.4.185)$$

und somit haben die jeweiligen Dipolmatrixelemente die Form

$$\mathbf{d}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \langle l' m' | X | l m \rangle \delta_{m' m+1} \delta_{l', l \pm 1}, \quad (6.4.186)$$

$$\mathbf{d}_- = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \langle l' m' | X | l m \rangle \delta_{m' m-1} \delta_{l', l \pm 1}. \quad (6.4.187)$$

Entsprechend gilt für $m' = m \pm 1$ -Übergänge, dass $\mathbf{d}_\pm \propto \hat{\mathbf{e}}_x \mp i\hat{\mathbf{e}}_y$, so dass $\mathbf{d}_\pm \cdot (\hat{\mathbf{e}}_x \mp i\hat{\mathbf{e}}_y)^* = \mathbf{d}_\pm \cdot (\hat{\mathbf{e}}_x \pm i\hat{\mathbf{e}}_y) = 0$ ist, also nur links (rechts)-zirkular polarisiertes Licht, $\boldsymbol{\epsilon}_{k,\mp} \sim \hat{\mathbf{e}}_x \mp i\hat{\mathbf{e}}_y$, in z -Richtung ausgesandt wird, entsprechend dem Spin $\mp \hbar$ in z -Richtung. Diese zirkulare Polarisation des ausgesandten Lichts sorgt dafür, dass der Emissionsprozeß den Gesamtdrehimpuls erhält: Während die z -Komponente des Elektron-Drehimpulses um $\pm \hbar$ zu- bzw. abnimmt, wird dies durch eine entsprechend entgegengesetzte Polarisation des Photons kompensiert.

Anmerkungen:

- Liegt \mathbf{k} also in der xy -Ebene, so gibt es nur lineare Polarisation in dieser Ebene, senkrecht zu \mathbf{k} . Für alle anderen \mathbf{k} -Orientierungen ist das Licht elliptisch polarisiert.
- Die Einschränkungen durch Auswahlregeln bestimmen z.B. den möglichen Zerfall eines Rydberg-Zustands,

$$|n, l = n - 1\rangle, \quad n \gg 1. \quad (6.4.188)$$

6. Näherungsmethoden

Möglich ist daher nur ein kaskadierender Zerfall über E1-Übergänge

$$|n, n-1\rangle \rightarrow |n-1, n-2\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |n-m, n-m-1\rangle. \quad (6.4.189)$$

- Höhere Terme der Entwicklung von \mathbf{j} erfassen, wie bereits erwähnt, magnetische Dipol-(M1)- und elektrische Quadrupol-(E2)-Übergänge.

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

In diesem Kapitel führen wir grundlegende Konzepte des Pfadintegrals in der Quantenmechanik ein. Wir beginnen mit den Grundlagen des Feynman-Pfadintegrals und dessen Auswertung innerhalb der Störungstheorie.

In der klassischen Mechanik erlaubt das Hamiltonsche Prinzip der stationären Wirkung für ein System von generalisierten Koordinaten q ,

$$\delta S[q] = 0, \quad (7.0.1)$$

die Dynamik eines Systems in Form von Phasenraumtrajektorien $(q(t), p(t))$ zu berechnen, die mit den gewählten Randbedingungen konsistent sind.

Gemäß der Theorie der klassischen *statistischen* Mechanik resultieren solche Trajektorien typischerweise als Mittelwert $(\bar{q}(t), \bar{p}(t))$ innerhalb eines Mittelungsprozesses. Einzelne Trajektorien fluktuieren dabei um den Mittelwert, und diese Fluktuationen werden durch die Momente der Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(q, p, t)$ berücksichtigt. Diese Momente repräsentieren Korrelationsfunktionen, die aus der Zustandssumme Z des Modells abgeleitet werden können, z.B. aus der kanonischen Gleichgewichtszustandssumme $Z_{\text{kan}} = \sum_i \exp\{-\beta E_i\}$ über die Mikrozustände mit Energie E_i , wobei $\beta = (k_B T)^{-1}$ ist. Wenn das betrachtete Modell jedoch in Form des Wirkungsfunktional $S[q]$ gegeben ist, wird die Auswertung dieser Momente erst dann unkompliziert, wenn die Zustandssumme als Funktionalintegral über ein Wahrscheinlichkeitsmaß, ausgedrückt in $S[q]$, umgeschrieben wird.

Das quantenmechanische Pfadintegral (wie dann insbesondere auch das quantenfeldtheoretische Funktionalintegral) stellen die Verallgemeinerung dieser Art von Zustandssumme zur Quantentheorie dar, und dessen Herleitung ist das Ziel des vorliegenden Kapitels. Abschließend besprechen wir noch einige spezielle Verfahren, welche Systeme nahe des Übergangs zum klassischen Limes zu beschreiben erlauben.

7.1. Die Feynmansche Pfadintegral-Darstellung

Das Quanten-Superpositionsprinzip stellt den entscheidenden Schritt beim Übergang von der klassischen zur Quantenmechanik dar. In der Hilbertraumformulierung der Quantentheorie manifestiert sich dieser Schritt in der Möglichkeit, jeden physikalischen Zustand in einer Basis zu entwickeln. Jeder dieser Basiszustände ergibt eine mögliche Realisierung, in die das System unter bestimmten Bedingungen im Messprozess kollabieren kann. Alternativ kann das System, während es mit der Umgebung wechselwirkt, mit dieser verschränkt werden, wenn Superpositionen verschiedener Kombinationen von System- und Umgebungszuständen entstehen.

7.1.1. Die Greensfunktion des Schrödingeroperators

Beim Übergang von der klassischen statistischen zur Quantentheorie führt das Superpositionsprinzip zu einer Modifikation des Wahrscheinlichkeitsmaßes in der Zustandssumme. Um zu verstehen, wie dies

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

geschieht, beginnen wir mit der Schrödinger-Gleichung und leiten daraus einen Operator für die quantenmechanische Zeitentwicklung von einem gegebenen Anfangszustand ab. Dieser Zeitentwicklungsoperator \mathcal{U} wird definiert durch

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle . \quad (7.1.2)$$

$$\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle . \quad (7.1.3)$$

Für einen hermiteschen Hamiltonoperator H ist \mathcal{U} ein unitärer Operator,

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \mathcal{U}^\dagger(t_a, t_b) . \quad (7.1.4)$$

Im allgemeinen Fall, dass $H(t)$ selbst zeitabhängig ist, kann er formal als zeitgeordnetes Exponentialintegral über den Hamiltonoperator geschrieben werden,

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \mathcal{T} \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t) \right\} , \quad (7.1.5)$$

wobei angenommen wird, dass $t_b \geq t_a$. Wenn das Exponential erweitert wird, manifestiert sich die Zeitordnung als

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_b, t_a) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t) - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' \mathcal{T} H(t) H(t') \pm \dots \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t) - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' H(t) H(t') \pm \dots , \end{aligned} \quad (7.1.6)$$

Alternativ kann das zeitgeordnete Exponentialintegral als zeitgeordnetes Produkt geschrieben werden,

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \mathcal{T} \prod_{t=t_a}^{t_b} \left(1 - \frac{i}{\hbar} dt H(t) \right) \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathcal{T} \prod_{n=0}^N \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H(t_a + n\Delta t) \right) , \quad (7.1.7)$$

mit $N = (t_b - t_a)/\Delta t \in \mathbb{N}$. Der Zeitordnungsoperator \mathcal{T} bedeutet hier, dass das Produkt so geordnet ist, dass die früheste Zeit $t = t_a$ ganz rechts steht, wobei spätere Zeiten $t = t_a + n\Delta t > t_b$ sie schrittweise von links multiplizieren.

Beachten Sie, dass für $t_b \leq t_a$ die Zeitordnung durch Antizeitordnung $\overline{\mathcal{T}}$ ersetzt werden muss. Dies wird deutlich, wenn man $\mathcal{U}^\dagger(t_a, t_b)$ in der Form (7.1.5)–(7.1.7) schreibt, wobei das Vorzeichen des Zeitintegrals umgekehrt wird, d.h.,

$$\mathcal{U}^\dagger(t_a, t_b) = \mathcal{T} \exp\left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_b}^{t_a} dt H(t) \right) \right\} = \overline{\mathcal{T}} \exp\left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t) \right) \right\} = \mathcal{U}(t_b, t_a) , \quad (7.1.8)$$

und somit im unendlichen Produkt (7.1.7) wieder das *untere* Integralgrenze t_a , d.h., die *neueste* Zeit, ganz rechts steht, wobei frühere Zeiten $t = t_b + n(t_a - t_b)/N$ sie von links multiplizieren.¹

Die obige Definition kann verwendet werden, um die Transitivität von \mathcal{U} zu beweisen, d.h., für alle t_c die Verkettung

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \mathcal{U}(t_b, t_c) \mathcal{U}(t_c, t_a) . \quad (7.1.9)$$

¹Im Allgemeinen könnte man den Operator \mathcal{T} in (7.1.5) als Zeitordnung für $t_b > t_a$ definieren, während er für $t_b < t_a$ *Anti*-Zeitordnung impliziert. Daher hat er eher die Bedeutung eines *Pfad*-Ordnungsoperators, der entlang des (gerichteten) Pfades von der unteren zur oberen Grenze des Integrals ordnet, d.h., von rechts, t' , zum linken Argument t von $\mathcal{U}(t, t')$.

Der Zeitentwicklungsoperator $\mathcal{U}(t, t_0)$ erzeugt sich in der Zeit entwickelnde Zustände im Hilbertraum, (7.1.3), die die (homogene) Schrödinger-Gleichung (7.1.2) lösen und daher formal eine Matrix solcher Lösungsvektoren für verschiedene Anfangszeiten t_0 darstellen. Er ist auch über die homogene Schrödinger-Gleichung hinaus von großer Relevanz, da er leicht zur Greenschen Funktion des Schrödingeroperators erweitert werden kann, d.h., zu seiner Inversen $G(t, t_0)$, definiert durch

$$[i\hbar \partial_t - H(t)] G(t, t_0) = \delta(t - t_0) . \quad (7.1.10)$$

Wenn man \mathcal{U} als Lösung von Gl. (7.1.2) für einen gegebenen, im Allgemeinen zeitabhängigen Hamiltonoperator H kennt und, vorausgesetzt, dass $t \geq t_0$, so läßt sich diese inhomogene Differentialgleichung leicht durch den retardierten Zeitentwicklungsoperator ausdrücken, d.h., durch \mathcal{U} , multipliziert mit einer Theta-Funktion, sodass er nur für $t \geq t_0$ von null verschieden ist,

$$G^R(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t_0) \mathcal{U}(t, t_0) . \quad (7.1.11)$$

Diese Zwei-Zeit-Greensche Funktion wird allgemein als (retardierter) Schrödinger-Propagator bezeichnet, da sie verwendet wird, um einen gegebenen Zustand vorwärts in der Zeit zu propagieren (d.h. entwickeln). Sie ist weder hermitesch noch unitär. Sie ist definitionsgemäß Operatorwertig, kann aber bezüglich einer Basis im Hilbertraum dargestellt werden. Alternativ löst auch die sogenannte avancierte Greensche Funktion

$$G^A(t, t_0) = \frac{i}{\hbar} \theta(t_0 - t) \mathcal{U}^\dagger(t_0, t) \quad (7.1.12)$$

die Gl. (7.1.10) und ist nur für $t < t_0$ von null verschieden. Sie dient dazu, zeitlich entwickelte Zustände von einem gegebenen Zustand in der Zukunft aus zu bestimmen. Addiert man die avancierte und die retardierte Greens-Funktion, so erhält man die ‘zeitgeordnete’ Greensche Funktion

$$G(t, t_0) = \frac{1}{2} [G^R(t, t_0) + G^A(t, t_0)] = -\frac{i}{2\hbar} \text{sgn}(t - t_0) \mathcal{U}(t, t_0) , \quad (7.1.13)$$

wobei die Symmetrie (7.1.8) von \mathcal{U} unter hermitescher Konjugation und Zeitumkehr berücksichtigt wurde und die Signum-Funktion als $\text{sgn}(t) = \pm 1$ für $t \gtrless 0$ definiert ist. Die Greensfunktion $G(t, t_0)$ löst (7.1.10) für jedes beliebige Paar von Zeiten t, t' . Der Zeitentwicklungsoperator läßt sich daraus als die Differenz der beiden Greenschen Funktionen zurückgewonnen,

$$\mathcal{U}(t, t_0) = i\hbar [G^R(t, t_0) - G^A(t, t_0)] . \quad (7.1.14)$$

Wie \mathcal{U} ist auch die Green'sche Funktion (7.1.13) invariant unter hermitescher Konjugation und Zeitumkehr, $G^\dagger(t_a, t_b) = G(t_b, t_a)$, während dies für $G^R(t_b, t_a) = [G^A(t_a, t_b)]^\dagger$ nicht gilt.

Abschließend sei angemerkt, dass die Schrödinger-Gleichung im Allgemeinen, für einen gegebenen Hamiltonoperator $H(t)$, keine inhomogene Gleichung ist. Dennoch ist, wie wir im Folgenden im Detail sehen werden, die Lösung quantenmechanischer Probleme, d.h. im Wesentlichen die genaue Lösung der Schrödinger-Gleichung für einen gegebenen, praktisch relevanten Hamiltonoperator, nicht trivial, wenn nicht sogar unmöglich. Daher dienen in der Praxis perturbative Ansätze als generischer Weg, um Vorhersagen innerhalb der jeweiligen Einschränkungen der gewählten Approximation zu erhalten. Für solche Berechnungen kennt man typischerweise die Lösung der Schrödinger-Gleichung für einen einfachen, meist als ‘freien’ Hamiltonoperator H_0 bezeichneten Operator, während das Einbeziehen einer zusätzlichen ‘Störung’ H_I in approximativer Weise erfolgen muss. Wie Sie aus Abschnitt 6.4 wissen, spielt dort genau diese Greensche Funktion, jetzt für die Entwicklung mit H_0 , eine wichtige Rolle, während die Inhomogenität den Beitrag von H_I einschließt. Wir werden nun damit beginnen, den Pfadintegralansatz für die Durchführung solcher approximativer Berechnungen auf systematische Weise vorzustellen.

7.1.2. Feynmans Pfadintegralformel

Mit dem Pfadintegral werden wir eine alternative Darstellung der Schrödinger-Green-Funktion oder des Propagators (7.1.14) entwickeln. Die Grundidee des Pfadintegralansatzes ist es, das Zeitintervall $[t_a, t_b]$ in (eine unendliche) Anzahl von (infinitesimalen) Schritten zu unterteilen,

$$t_b = t_{n+1} \geq t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_1 \geq t_0 = t_a, \quad (7.1.15)$$

wobei man schließlich den Grenzwert $\epsilon = t_i - t_{i-1} \rightarrow 0$, $n + 1 = (t_b - t_a)/\epsilon \rightarrow \infty$ nimmt. Auf dem so diskretisierten Zeitgitter zerlegt man die Zeitentwicklungs-Matrix

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_b t_b, \mathbf{x}_a t_a) = \langle \mathbf{x}_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | \mathbf{x}_a \rangle \quad (7.1.16)$$

in $n + 1$ Faktoren, deren Multiplikation Summationen über die entsprechenden Positionen $\{\mathbf{x}_i = \mathbf{x}(t_i), i = 1, \dots, n\}$ impliziert:

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_b t_b, \mathbf{x}_a t_a) = \prod_{i=1}^n \int d\mathbf{x}_i \prod_{i=1}^{n+1} \mathcal{U}(\mathbf{x}_{i+1} t_{i+1}, \mathbf{x}_i t_i), \quad (7.1.17)$$

wobei $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_b$, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_a$.

Beschränkt man die Diskussion auf x - p -separable Hamiltonians ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$),

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) = T(\mathbf{p}, t) + V(\mathbf{x}, t), \quad (7.1.18)$$

so können wir die *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel* anwenden,

$$\begin{aligned} e^{-i\epsilon(T+V)} &= e^{-i\epsilon V} e^{-i\epsilon T} e^{-i\epsilon^2 X}, \\ X &= \frac{i}{2} [V, T] - \epsilon \left(\frac{1}{6} [V, [V, T]] - \frac{1}{3} [[V, T], T] \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (7.1.19)$$

Unter Vernachlässigung der Terme zweiter Ordnung in ϵ ergibt dies

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\mathbf{x}_i t_i, \mathbf{x}_{i-1} t_{i-1}) &\cong \int d\mathbf{x} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \langle \mathbf{x}_i | e^{-i\epsilon V} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | e^{-i\epsilon T} | \mathbf{x}_{i-1} \rangle \\ &= \int d\mathbf{x} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) e^{-i\epsilon V(\mathbf{x}_i, t_i)} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i-1})} e^{-i\epsilon T(\mathbf{k}, t_i)} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\{\mathbf{k}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}) - \epsilon [T(\mathbf{k}, t_i) + V(\mathbf{x}_i, t_i)]\}}, \end{aligned} \quad (7.1.20)$$

wobei $\epsilon = t_i - t_{i-1} \equiv (t_b - t_a)/(n + 1)$ gewählt wurde. Wieder in (7.1.17) eingesetzt ergibt dies die

Feynmansche Pfadintegral-Formel

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_b t_b, \mathbf{x}_a t_a) \cong \prod_{i=1}^n \left[\int d\mathbf{x}_i \right] \prod_{i=1}^{n+1} \left[\int \frac{d\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^d} \right] e^{\frac{i}{\hbar} S^{(n)}[\mathbf{p}, \mathbf{x}]}, \quad (7.1.21)$$

$$S^{(n)} = \sum_{i=1}^{n+1} [\mathbf{p}_i (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}) - \epsilon H(\mathbf{p}_i, \mathbf{x}_i, t)], \quad (7.1.22)$$

welche eine gute Näherung für große n ist, wenn die rechte Seite für $n \rightarrow \infty$ konvergiert.

Wir bemerken:

- Für $T = p^2/2m$ und den Spezialfall, dass $V(t) \equiv V$ zeitunabhängig ist, kann man auch

Trotters Formel [51–53] verwenden:

$$e^{-i(T+V)(t_b-t_a)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-i\epsilon V} e^{-i\epsilon T} \right)^{n+1}, \quad \text{mit } \epsilon = \frac{t_b - t_a}{n+1}. \quad (7.1.23)$$

- Für ein unendlich oft differenzierbares Potential V und die kinetische Energie $T = p^2/2m$ sind alle Terme in X , Gl. (7.1.19), Produkte von Ableitungen von V , da $\mathbf{p} \propto \partial_{\mathbf{x}}$, und somit nicht divergent. Daher verschwinden die Beiträge der X -Terme in (7.1.19) mindestens um einen Faktor ϵ schneller als ϵT , und der Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$ ist in diesem Fall gut definiert.
- Für das Coulomb-Potential sind die obigen Annahmen nicht mehr gültig. Historisch gesehen bedeutete dies, dass Richard Feynman anfangs nicht in der Lage war, seine Pfadintegralmethode für die Lösung des Wasserstoffproblems anzuwenden. Schließlich fand sein Doktorand Hagen Kleinert eine Lösung. Dies führte zur sogenannten Duru-Kleinert-Methode, die auf einer Transformation des Pfadintegrals mit dem Coulomb-Potential $V(r) \sim 1/r$ zu einer Hilfszeit $s(t) = \int^t d\tau/r(\tau)$ basiert, siehe [54, 55] und [52], Kap. 12.

7.1.3. Kontinuumsimes: Pfadintegral der Schrödinger-Mechanik

Bevor wir zum Kontinuumsimes übergehen, wollen wir noch die Lagrange-Form der Pfadintegralformel herleiten. Angenommen wieder, dass der Hamiltonian gemäß (7.1.18) in die kinetische Energie $T = p^2/2m$ und ein Potential zerfällt, erhalten wir durch quadratische Ergänzung,

$$S^{(n)} = \sum_{i=1}^{n+1} \left[-\frac{\epsilon}{2m} \left(\mathbf{p}_i - \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}}{\epsilon} m \right)^2 + \frac{m\epsilon}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}}{\epsilon} \right)^2 - \epsilon V_i \right]. \quad (7.1.24)$$

Das resultierende Integral über die Impulse \mathbf{p}_i ist ein allgemeines, verschobenes Gaußsches Integral, das mit Hilfe der

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

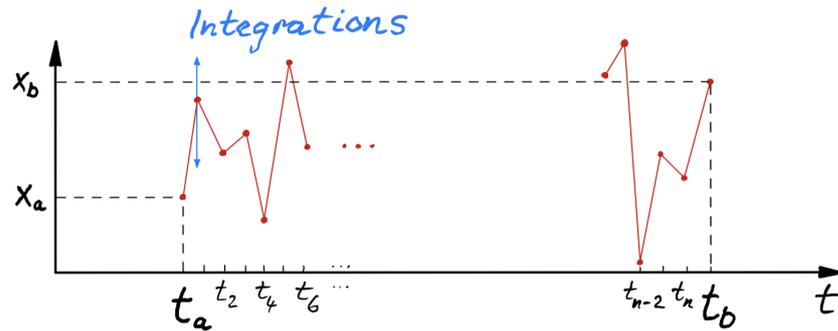


Abbildung 7.1.: Schematische Darstellung von Feynman-Pfaden, die zum Pfadintegral (7.1.28) beitragen. Aufgrund der beliebigen möglichen Werte für $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ zu jedem Zeitpunkt i sind die Pfade nicht differenzierbar, und ein rigoroser mathematischer Beweis der Konvergenz des komplexen Quanten-Pfadintegrals existiert nicht. Für positiv definite Maße, wie Sie sie in der Beschreibung von Quanten-Vielteilchensystemen im thermischen Gleichgewicht kennenlernen werden, existieren solche Beweise im Zusammenhang mit der Beschreibung der Brownschen Bewegung und der dafür wesentlichen Wiener Prozesse, siehe z.B. [56].

Fresnelschen Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left\{i\frac{ap^2}{2}\right\} = \sqrt{\frac{2\pi}{|a|}} \exp\left\{i\frac{\pi}{4} \operatorname{sgn} a\right\} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left\{i\frac{\pi}{4}\right\}, \quad a \in \mathbb{R}, \quad (7.1.25)$$

oder, allgemeiner,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left\{-\frac{zp^2}{2}\right\} = \sqrt{\frac{2\pi}{z}}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad (7.1.26)$$

welche das analytisch in die komplexe Ebene fortgesetzte Gauß-Integral darstellt,

behandelt werden kann.

Mit Hilfe von (7.1.25) können wir die Impulse \mathbf{p}_i ausintegrieren,

$$\int \frac{d\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^d} \exp\left\{-i\frac{\epsilon}{2m} \left(\mathbf{p}_i - \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}}{\epsilon} m\right)^2\right\} = \left[\frac{2\pi\hbar i \epsilon}{m}\right]^{-\frac{d}{2}}, \quad (7.1.27)$$

und erhalten so Feynmans ursprüngliche Darstellung des Pfadintegrals,

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_b t_b, \mathbf{x}_a t_a) \cong \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon}\right)^{d/2} \prod_{i=1}^n \left(\int \frac{d\mathbf{x}_i}{\sqrt{2\pi i \epsilon/m}}\right) e^{i\tilde{S}^{(n)}}, \quad (7.1.28)$$

mit

$$\tilde{S}^{(n)} = \epsilon \sum_{i=1}^{n+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}}{\epsilon}\right)^2 - V(\mathbf{x}_i, t_i) \right]. \quad (7.1.29)$$

Hier wird die Wirkung in der diskreten Form des Lagrange-Funktional ausgedrückt, in der als Argumen-

te nur die räumlichen Koordinaten und ihre Zeitableitungen, also Geschwindigkeiten vorkommen. Das *Pfadintegral* (7.1.28) summiert explizit alle Pfade im Konfigurationsraum.

Wir sind nun für den letzten Schritt vorbereitet, nämlich den Kontinuumslimites $n \rightarrow \infty$ zu betrachten, in dem die Phasenraumform (7.1.22) der

Klassischen Wirkung ein Funktional im Phasenraum wird, in Form einer Legendre-Transformation der Hamiltonfunktion,

$$S[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt [\mathbf{p}(t) \dot{\mathbf{x}}(t) - H(\mathbf{p}(t), \mathbf{x}(t), t)] . \quad (7.1.30)$$

Das jetzt unendliche Produkt von $n \rightarrow \infty$ Integralen wird **Pfadintegral** genannt, mit dem Maß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \int d\mathbf{x}_i \prod_{j=1}^{n+1} \int d\mathbf{p}_j \equiv \int_{(\mathbf{x}_a t_a)}^{(\mathbf{x}_b t_b)} \mathcal{D}' \mathbf{x} \mathcal{D} \mathbf{p} . \quad (7.1.31)$$

Der Apostroph an \mathcal{D}' markiert, dass die Endpunkte $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}(t_b)$ und $\mathbf{x}_a = \mathbf{x}(t_a)$ nicht integriert werden.

Analog dazu wird die Lagrange-Form (7.1.28) im Kontinuumslimites zur Pfadintegraldarstellung des *Schrödinger-Propagators*,

$$\mathcal{U}(\mathbf{x}_b t_b, \mathbf{x}_a t_a) = \int_{\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}_b} \mathcal{D} \mathbf{x} e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}]} , \quad (7.1.32)$$

mit dem Maß, das von der Wirkung abhängt und durch diese von der Lagrangefunktion,

$$S[\mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) , \quad (7.1.33)$$

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) - V(\mathbf{x}, t) . \quad (7.1.34)$$

Beachte die unterschiedliche Normierung des Differentials $\mathcal{D} \mathbf{x}$.

Bezug zur klassischen Mechanik

Im Exponential des Pfadintegral-Maßes in (7.1.32) zeigt der Faktor \hbar^{-1} die Beziehung zwischen Quanten- und klassischer Mechanik. Das Hamiltonsche Variationsprinzip (7.0.1) liefert, als den klassischen Pfad, der die klassischen (Euler-Lagrange-)Bewegungsgleichungen löst, den Pfad oder die Pfade, um die die Wirkung S in erster Ordnung in einer Variation der Pfade invariant bleibt.

Beispiel: Wirkungsfunktional und linke Seite der Bewegungsgleichung des 1D harmonischen Oszillators:

$$S[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt' \frac{1}{2} [\dot{x}(t')^2 - \omega^2 x(t')^2] , \quad (7.1.35)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta S}{\delta x(t)} = \int_{t_a}^{t_b} dt' \left[\dot{x}(t') \underbrace{\frac{\delta \dot{x}(t')}{\delta x(t)}}_{= \partial_{t'} \delta(t-t') = -\partial_t \delta(t-t')} - \omega^2 x(t') \delta(t-t') \right] = -\ddot{x}(t) - \omega^2 x(t) , \quad (7.1.36)$$

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

wobei wir (A.1.4) nutzten. Das Pfadintegral (7.1.32) summiert kohärent über alle möglichen Pfade (siehe Fig. 7.1), in dem Sinne, dass für jeden Pfad $\{\mathbf{x}(t); t \in [t_a, t_b]\}$ das entsprechende komplexe Maß $\mathcal{D}\mathbf{x} \exp\{iS[\mathbf{x}]/\hbar\}$ zum Integral hinzugefügt wird. Es superponiert (addiert) also Phasen $\exp\{iS/\hbar\}$ für alle möglichen Pfade, deren Endpunkte bei t_a und t_b festgehalten sind und die nur vorwärts in der Zeit laufen (o.B.d.A. – denn ohne diese Einschränkung würden sich die in entgegengesetzter Zeitrichtung laufenden unitären Zeitentwicklungsoperatoren gegenseitig wegheben).

Dabei tragen nur diejenigen Pfade konstruktiv interferierend zum Integral bei, die hinreichend wenig vom klassischen Pfad abweichen, sodass S von dessen klassischen Wert nicht wesentlich weiter als um \hbar abweicht für die also gilt

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = \frac{S - S_c}{\hbar} \leq 2\pi. \quad (7.1.37)$$

Stärker abweichende Pfade interferieren im Mittel destruktiv miteinander aufgrund der oszillierenden Phase im Maß. Daher unterdrückt im Limes $\hbar \rightarrow 0$ die destruktive Interferenz alle Pfade außer den klassischen Pfad.

Merke: In der QM können jetzt nichtstetige Pfade, welche zwischen verschiedenen klassischen Pfaden springen, erlaubt sein, da sie konstruktiv interferieren. Dies entspricht dem quantenmechanischen Tunneleffekt. Wir halten fest, dass \hbar als fundamentale Konstante auftritt, welche die Stärke der Phasenraum-Unschärfe quantifiziert.

Wir wollen obige Überlegungen noch mathematisch etwas genauer fassen in der

7.2. Sattelpunkts-Entwicklung des Pfadintegrals*

Wir sind jetzt mit ausreichend Werkzeugen ausgestattet, die wir benötigen, um das Pfadintegral für verschiedene, praktisch relevante physikalische Modelle auszuwerten. Mit der Berechnung des Pfadintegrals meinen wir zunächst, konkrete Ausdrücke für die Matrixelemente (7.1.32) des Zeitentwicklungsoperators zu erhalten, welcher Lösungen der Schrödinger-Gleichung erzeugt, wie in Abschnitt 7.1.1 besprochen.

Wie dort erwähnt, können wir uns darauf konzentrieren, \mathcal{U} für den gesamten betrachteten Hamiltonoperator abzuleiten – sofern dies technisch machbar ist – oder wir müssen weiterdenken und approximative Methoden für Fälle entwickeln, in denen die Dynamik komplexer ist. Letzteres ist normalerweise bei jeder Art von nichtlinearem Modell der Fall, bei dem der Hamiltonoperator und somit die Wirkung Terme enthalten, die höher als quadratisch in den generalisierten Koordinaten, z.B. Feld-Freiheitsgraden sind.

Im Gegensatz dazu ist bei sogenannten freien Modellen, mit einer höchstens quadratischen polynomischen Wirkung, die vollständige Berechnung des Pfadintegrals nicht komplizierter als die Durchführung eines multivariaten Gaußschen Integrals. Das Ergebnis dieser Auswertung sind die Matrixelemente des Entwicklungsoperators (7.1.32) und somit der Greenschen Funktion (7.1.13) der freien Schrödinger-Gleichung. Diese können dann verwendet werden, um z.B. eine Reihenentwicklung in Potenzen einer gegebenen nichtlinearen Störung des freien Modells zu erhalten. Wie dies zu tun ist, wird im Rahmen der Quantenfeldtheorie behandelt.

7.2.1. Freier Schrödinger-Propagator

Wir beginnen mit einem im Allgemeinen höher als quadratischen Modell² und approximieren es, um die Greensche Funktion des freien Teils oder den freien Schrödinger-Propagator zu erhalten. Zu diesem Zweck betrachten wir eine allgemeine klassische Wirkung (7.1.33) und entwickeln sie um die klassische

²Beispiel: Anharmonischer Oszillator: $L = m(\dot{\mathbf{x}}^2 - \omega^2 \mathbf{x}^2)/2 - \lambda |\mathbf{x}^2|^2/4!$.

Trajektorie, die aus dem Hamiltonschen Prinzip folgt,

$$\delta S [x]|_{x=\bar{x}} = 0, \quad (7.2.38)$$

unter Verwendung von (A.2.5):

$$\begin{aligned} S [x] = S [\bar{x}] + \int \frac{\delta S}{\delta x(t)} \Big|_{x=\bar{x}(t')} (x(t') - \bar{x}(t')) dt' \\ + \frac{1}{2} \int_{t''} (x_{t'} - \bar{x}_{t'}) \frac{\delta^2 S}{\delta x_{t'} \delta x_{t''}} \Big|_{\bar{x}} (x_{t''} - \bar{x}_{t''}) + \dots \end{aligned} \quad (7.2.39)$$

Zur Vereinfachung der Notation wird x im Folgenden im Allgemeinen einen d -dimensionalen Ortsvektor bezeichnen, $x_t \equiv x(t)$ eine zeitabhängige Position.

Betrachten wir als Beispiel die Wirkung des harmonischen Oszillators (7.1.35). Für dieses Modell verschwinden die dritten und höheren funktionalen Ableitungen identisch, und (7.2.39) ist bis zur zweiten Ordnung exakt. Da der Term erster Ordnung aufgrund der Definition (7.2.38) von \bar{x} als Ergebnis des Hamiltonschen Variationsprinzips verschwindet, erhalten wir mit $\tilde{x}_t = x_t - \bar{x}_t$, dass

$$S [x] = S [\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{t''} \tilde{x}_{t'} S_{t''}^{(2)} \tilde{x}_{t''}, \quad (7.2.40)$$

wobei die zweite funktionale Ableitung der klassischen Wirkung auf der klassischen Lösung \bar{x}_t ausgewertet wird,

$$S_{t''}^{(2)} = \frac{\delta^2 S}{\delta x_t \delta x_{t''}} \Big|_{x=\bar{x}}. \quad (7.2.41)$$

Aus (7.1.36) erhalten wir diese zweite Ableitung als

$$S_{t''}^{(2)} = -(\partial_t^2 + \omega^2) \delta(t - t'). \quad (7.2.42)$$

$S_{t''}^{(2)}|_{x=\bar{x}}$, das die quadratische Ableitung und die 'Massen'-Terme der klassischen Wirkung enthält, wird gemeinhin als der freie inverse Propagator bezeichnet, da er das Inverse des freien Propagators ist, d.h. der Greenschen Funktion $ig_0(t, t')$ des klassischen harmonischen Oszillators,

$$(\partial_t^2 + \omega^2) ig_0(t, t') = \delta(t - t'). \quad (7.2.43)$$

Verwechseln Sie diese Greensche Funktion oder den Propagator des (klassischen) Oszillators nicht mit der allgemeineren (feldtheoretischen) Greenschen Funktion (Operator) $G(t, t')$ oder dem freien Propagator (7.1.13) des linearen Schrödinger-Operators $i\partial_t - H_0$, der in Abschnitt 7.1.1 eingeführt wurde und den wir im weiteren Verlauf dieses und des nächsten Abschnitts für die Fälle eines freien Teilchens und des harmonischen Oszillators berechnen werden.

Wenn wir die Entwicklung (7.2.40) in das Pfadintegral (7.1.32) einsetzen und berücksichtigen, dass der klassische Pfad \bar{x}_t eine feste Lösung der klassischen Bewegungsgleichungen ist, die nicht unter dem Pfadintegralmaß integriert werden soll, können wir das Exponential der entsprechenden klassischen Wirkung

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

herausteilen und erhalten

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \int_{x_a, t_a}^{x_b, t_b} \mathcal{D}x e^{iS[x]} = e^{iS[\bar{x}]_a^b} \tilde{\mathcal{U}}(0t_b, 0t_a), \quad (7.2.44)$$

$$\tilde{\mathcal{U}}(0t_b, 0t_a) = \int_{\bar{x}_a=0, t_a}^{\bar{x}_b=0, t_b} \mathcal{D}\tilde{x} \exp\left\{\left(\frac{i}{2} \int \tilde{x}_t S_{tt'}^{(2)} \tilde{x}_{t'}\right)\right\}. \quad (7.2.45)$$

Beachten Sie, dass wir im Folgenden der Einfachheit halber in der Regel die Randbedingungen des Pfadintegrals weglassen, die angeben, dass man ein Matrixelement zwischen den Zuständen $\langle x_b = \bar{x}_b, t_b |$ und $| \bar{x}_a, t_a \rangle$ berechnet. Es ist dennoch wichtig, im Hinterkopf zu behalten, welche Art von Größe das Pfadintegral darstellen soll. In der QFT werden Sie z.B. im Rahmen der Beschreibung der Dynamik das Schwinger-Keldysh-Pfadintegral kennenlernen, welches eine andere Bedeutung hat.

Bevor wir ein allgemeines Verfahren zur Auswertung des Gaußschen Pfadintegrals (7.2.45) einführen, lassen Sie uns kurz zur gewöhnlichen Hilbert-Raum-Formulierung der Quantenmechanik zurückgehen, um eine Vorstellung davon zu gewinnen, was uns das Pfadintegral liefern sollte. Wir betrachten dabei den noch einfacheren Fall eines freien Teilchens, bei dem der Potentialterm V im Hamiltonian $H(t) = H_0 + V(t)$, mit $H_0 = p^2/2m$ verschwindet.

Die Matrixelemente des entsprechenden Zeitentwicklungsoperators \mathcal{U}_0 (7.1.5) in der Ortszustandsbasis können wie folgt mit Hilfe Wellenzahl-Darstellung dieser Zustände berechnet werden,

$$\begin{aligned} \langle x_b | \mathcal{U}_0(t_b, t_a) | x_a \rangle &= \int dk \langle x_b | k \rangle \exp\left\{\left[-i \frac{\hbar k^2}{2m} (t_b - t_a)\right]\right\} \langle k | x_a \rangle \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \exp\{[ik(x_b - x_a)]\} \exp\left\{\left[-i \frac{\hbar k^2}{2m} (t_b - t_a)\right]\right\} \\ &= \exp\left\{\left[i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}\right]\right\} \int \frac{dk'}{(2\pi)^d} \exp\left\{\left[i \frac{\hbar k'^2}{2m} (t_b - t_a)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (7.2.46)$$

Hier haben wir wieder quadratische Ergänzung durchgeführt, indem wir $\hbar k' = \hbar k - m(x_b - x_a)/(t_b - t_a)$ substituiert haben, bevor wir die komplexe Gaußsche Integration im letzten Schritt durchgeführt haben. Das verbleibende Impulsintegral wird unter Verwendung der Fresnelschen Formel (7.1.26) ausgewertet. In d räumlichen Dimensionen ergibt dies

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i(t_b - t_a)}\right)^{d/2} \exp\left\{\left[i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}\right]\right\}. \quad (7.2.47)$$

Beachten Sie, dass die Darstellung

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left[\left(-\frac{i\alpha}{\pi t}\right)^{d/2} \exp\left\{i \frac{\alpha}{t} x^2\right\}\right] = \delta^{(d)}(x) \quad (7.2.48)$$

der d -dimensionalen Delta-Distribution im Grenzfall $t_b = t_a$ es ermöglicht, die Einheitsmatrix

$$\mathcal{U}(x t, y t) = \delta^{(d)}(x - y), \quad (7.2.49)$$

zu gleichen Zeiten wiederzugewinnen, wie erwartet.

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

d.h. die Determinante der $j \times j$ -Untermatrix $\tilde{\mathcal{S}}_j^{(2)}$ der ersten j Zeilen und Spalten von $\tilde{\mathcal{S}}^{(2)}$. Man erhält

$$d_1 = 2 - \epsilon^2 \omega_1^2, \quad (7.2.55a)$$

$$d_2 = d_1 (2 - \epsilon^2 \omega_2^2) - \underbrace{1}_{\equiv d_0}, \quad (7.2.55b)$$

$$\begin{aligned} d_3 &= d_2 (2 - \epsilon^2 \omega_3^2) - (-1) \det \left\{ \begin{pmatrix} 2 - \epsilon^2 \omega_1^2 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \right\} \\ &= d_2 (2 - \epsilon^2 \omega_3^2) - d_1, \end{aligned} \quad (7.2.55c)$$

⋮

$$\begin{aligned} d_{j+1} &= d_j (2 - \epsilon^2 \omega_{j+1}^2) + \det \left\{ \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{S}}_{j-1}^{(2)} & 0 \\ 0 & -1 & -1 \end{pmatrix} \right\} \\ &= d_j (2 - \epsilon^2 \omega_{j+1}^2) - d_{j-1}, \end{aligned} \quad (7.2.55d)$$

$$\Rightarrow \frac{d_{j+1} - 2d_j + d_{j-1}}{\epsilon^2} = -\omega_{j+1}^2 d_j. \quad (7.2.56)$$

Im Kontinuumslimit resultiert dies in der Differentialgleichung eines Oszillators, welche d bestimmt,

$$\ddot{d}(t) = -\omega^2(t) d(t). \quad (7.2.57)$$

Man definiert dann die funktionale Determinante als

$$D^{(2)}(t, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\epsilon d(t)]. \quad (7.2.58)$$

Diese genügt der Differentialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2(t) \right) D^{(2)}(t, t_a) = 0, \quad (7.2.59)$$

mit

$$D^{(2)}(t_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon d_0 = 0, \quad (7.2.60)$$

und

$$\left. \frac{d}{dt} D^{(2)}(t, t_a) \right|_{t=t_a} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\epsilon \frac{d_1 - d_0}{\epsilon} \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \epsilon^2 \omega_1^2) = 1. \quad (7.2.61)$$

Die resultierende Differentialgleichung für $D^{(2)}$, zusammen mit den Anfangsbedingungen für $D^{(2)}$ und $\dot{D}^{(2)}$, bilden die Gel'fand-Yaglom-Gleichungen für die funktionale Determinante des Fresnel-Pfadintegrals, womit wir folgendes Endergebnis erhalten:

$$\mathcal{U}_{ba} \equiv \mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \left[2\pi i D^{(2)}(t_b, t_a) \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \{ i \mathcal{S}[\bar{x}]_a^b \}. \quad (7.2.62)$$

Der Phasenwinkel ist proportional zur klassischen Wirkung, während Schwankungen um den klassischen Pfad nur über den Realteil $D^{(2)}$ der (homogenen) klassischen Wellengleichung in den Vorfaktor eingehen. Dies gilt für alle quadratischen Wirkungen, die wir daher als (semi-)klassische Modelle bezeichnen. Während man in der Feldtheorie Modelle mit räumlichen Ableitungen betrachtet, sind in der Quantenmechanik die relevantesten Beispiele das freie Teilchen und der harmonische Oszillator:

7.2.3. Beispiele: kräftefreies Teilchen und harmonischer Oszillator – Bedeutung der Quantenfluktuationen*

- (a) **Freies Teilchen.** Der Propagator des freien Teilchens (7.2.47) ist genau von dieser Form und beschreibt die lineare Bewegung zwischen zwei Punkten im Raum: $\omega(t) = 0$, $m = 1$:

$$\Rightarrow D^{(2)}(t, t_a) = t - t_a. \quad (7.2.63)$$

$$\Rightarrow \mathcal{U}_{ba} = [2\pi i (t_b - t_a)]^{-1/2} \exp\left\{\left(\frac{i}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}\right)\right\}. \quad (7.2.64)$$

- (b) **Harmonischer Oszillator.** $\omega(t) = \text{konstant}$, so dass jede Lösung eine Überlagerung der Form ist

$$D^{(2)}(t, t_a) = A \cos[\omega(t - t_a)] + B \sin[\omega(t - t_a)]. \quad (7.2.65)$$

Die Gel'fand-Yaglom-Anfangsbedingungen implizieren, dass

$$A = 0, \quad B = \frac{1}{\omega}. \quad (7.2.66)$$

$$\Rightarrow D^{(2)}(t, t_a) = \frac{\sin[\omega(t - t_a)]}{\omega}. \quad (7.2.67)$$

Daher

$$\mathcal{U}_{ba} = \left(\frac{\omega}{2\pi i \sin[\omega(t - t_a)]}\right)^{1/2} \exp\left\{i S_{\text{HO}}[\bar{x}]_a^b\right\}, \quad (7.2.68)$$

mit

$$S_{\text{HO}}[\bar{x}]_a^b = \frac{\omega}{2 \sin[\omega(t_b - t_a)]} \left\{(\bar{x}_a^2 + \bar{x}_b^2) \cos[\omega(t_b - t_a)] - 2\bar{x}_a \bar{x}_b\right\}. \quad (7.2.69)$$

(Beweis: Übung!) (7.2.68) wird *Mehlers Formel* oder *Mehler-Kern* genannt.³

Die hier gegebenen Beispiele für die aus dem Pfadintegral berechneten Zeitentwicklungsmatrizen (Propagatoren) (7.2.64) und (7.2.68) des freien Teilchens bzw. harmonischen Oszillators erlauben es, einen Eindruck davon zu vermitteln, welche Bedeutung die Quantenfluktuationen um den klassischen Pfad haben, welcher hier, aus dem Gaußschen Pfadintegral bestimmt, in der Normierung $[2\pi i D^{(2)}(t_b, t_a)]^{-1/2}$, vgl. (7.2.62) beitragen.

Wir betrachten dafür die Wirkung des Zeitentwicklungsoperators auf eine Wellenfunktion zum Zeitpunkt t_a , welche die Ortsraum-Wellenfunktion $\psi(x_b, t_b)$ zum späteren Zeitpunkt t_b ergibt,

$$\psi(x_b, t_b) \int dx_a \mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) \psi(x_a, t_a) \dots \quad (7.2.70)$$

Beispielsweise können wir $\psi(x_a, t_a) = \delta(x_a)$ wählen, die Eigenfunktion des Ortsoperators mit Eigenwert $x_a = 0$, d.h. das Teilchen ist anfangs exakt bei $x = 0$ lokalisiert. Die sich in diesem Fall für verschiedene Endzeiten t_b ergebende Wellenfunktion ist als Animation auf der Webseite der Vorlesung zu sehen⁴

³Mehler definierte eine Funktion dieser Form, die in moderner Notation in Form von Hermite-Polynomen entwickelt werden kann. Siehe F. G. Mehler (1866), "Ueber die Entwicklung einer Function von beliebig vielen Variabeln nach *Laplaceschen* Functionen höherer Ordnung", Journal für die reine und angewandte Mathematik (auf Deutsch) 66, 161 (vgl. S. 174, Gl. (18) & S. 173, Gl. (13)) [58], sowie A. Erd'elyi et al. (1955), Higher transcendental functions. Vol. II, McGraw-Hill (S. 194 10.13 (22)) [59].

⁴Siehe https://www.kip.uni-heidelberg.de/gasenzer/teaching/ss24_qm_material.

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

Die dort abgebildete Wellenfunktion (oberes Panel: (blau) $\text{Re } \psi(x_b, t_b)$, (rot) $\text{Im } \psi(x_b, t_b)$) zeigt, wie die (auf $x \in [-\infty, \infty]$ nicht normierbare) Wellenfunktion frei expandiert. Weiter entfernt von der anfänglichen Position ist die Wellenzahl, d.h. die Teilchengeschwindigkeit größer. Die gezeigte Wellenfunktion stellt also wie üblich zu jeder Zeit t_b eine Superposition von Aufenthaltamplituden des Teilchens an verschiedenen Orten x_b dar. Die lokale Phase $\exp\{iS[\bar{x}]_a^b\}$, welche sich aus dem klassischen Anteil der Wirkung ergibt, vgl. (7.2.44), spiegelt zunächst die Geschwindigkeit wider, mit der sich ein Teilchen innerhalb der Zeit $t_a - t_b$ gleichmäßig bewegen muss, um von $x_a = 0$ nach x_b gelangen zu können. Diese Geschwindigkeit muß somit in $|x_b|$ linear zunehmen.

Im zweiten Panel sind in blau die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x_b, t_b)|^2$, in rot der Phasenwinkel $\theta = \arg \psi \bmod \pi$ gezeigt. Der quadratisch in $|x_b|$ zunehmende Winkel entspricht dabei einer linear zunehmenden Geschwindigkeit $v = \partial_x \theta / m$.

Während also die Phase, in führender Ordnung der Sattelpunktsentwicklung, aus dem klassischen Pfad folgt, liefert das Gaußsche Pfadintegral über die Fluktuationen um den klassischen Pfad lediglich eine zeitabhängige Normierung der Funktion. Diese sorgt dafür, dass $\lim_{t_b \rightarrow t_a} \mathcal{U}(x_b, t_b, x_a, t_a) = \delta(x_a - x_b)$ und wie erforderlich \mathcal{U}_{aa} einem Einheitsoperator entspricht. Die Superposition und komplexe Phase der Wellenfunktion $\psi(x_b, t_b)$ ergibt sich demnach aber bereits ohne Berücksichtigung der Quantenfluktuationen, rein aus dem klassischen Pfad: Für das Auftreten von Interferenzphänomenen sind diese Fluktuationen also zunächst irrelevant.

Dennoch spielt der Fluktuationsbeitrag eine wichtige Rolle für die Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude, was sich zeigt, sobald man durch Einschränkung des Volumens auf ein endliches Intervall oder Wahl einer normierbaren Anfangsbedingung eine normierbare Wellenfunktion $\psi(x_b, t_b)$ für alle Zeiten erhält. Eine solche sieht man in der dritten und vierten Animation, welche dieselbe Wellenfunktion zeigen, jetzt aber für einen Gaußsch verbreiterten Anfangszustand der Breite x_0 .

Für diesen Fall der Berechnung normierbarer Wellenfunktionen liefert der Fluktuationsbeitrag aus dem Gaußschen Pfadintegral die korrekte Normierung der Wahrscheinlichkeitsamplitude für alle Zeiten. Es wird aber auch klar, dass man alternativ einfach mit dem klassischen Phasenfaktor $\exp\{iS[\bar{x}]_a^b\}$ arbeiten könnte, diesen etwa nutzen, um zur Zeit t_b Momente $\langle x_b^n \rangle$ von x_b zu bestimmen und das Problem der fehlenden Normierung durch Herausteilen des Betragsquadrats der Wellenfunktion zu umgehen:

$$\langle x_b^n \rangle = \frac{\langle \psi, t_b | x_b^n | \psi, t_b \rangle}{\langle \psi, t_b | \psi, t_b \rangle}. \quad (7.2.71)$$

Hier wird nochmals klar, dass in bestimmten Fällen die relevante Information der Quantenmechanik bereits in der komplexen Phase aus dem klassischen Pfad steckt. Der Grund hierfür ist in der Tatsache zu suchen, dass der Pfadintegralbeitrag für das einfache Beispiel einer in den generalisierten Koordinaten $\{x, p\}$ quadratischen Wirkung ein Gaußsches (Fresnel-)Integral darstellt, welches unabhängig vom klassischen Pfad ist. Sobald Wechselwirkungsterme hinzukommen, welche von der quadratischen Form abweichen, werden i.allg. die Beiträge vom Pfadintegral auch die Phase der Wellenfunktion beeinflussen. Die Bedeutung des klassischen Pfads für die Welleneigenschaften der QM und die dadurch möglichen Interferenzphänomene wird am Pfadintegral somit sehr deutlich. Wir werden diese Bedeutung im folgenden Abschnitt noch einmal aus der Warte der klassischen Mechanik betrachten und zeigen, dass man bereits von dieser ausgehend die Existenz der Schrödingergleichung hätte postulieren können.

7.3. Wirkungswellen*

Dass die Wirkung S die Rolle eines Phasenwinkels mal \hbar erhält, ist eine wesentliche Tatsache der QM. Letztlich spiegelt sich darin wieder, dass Teilchen im Rahmen der QM auch als Wellen beschrieben wer-

den können. Dieser Wellencharakter und damit der Teilchen-Wellen-Dualismus deuten sich jedoch bereits in der klassischen Mechanik an, was wir im Folgenden noch kurz beleuchten wollen.

Gemäß der Hamilton-Jacobi-Theorie erfüllt das Wirkungsfunktional $S = \int^t dt' L(t')$ die

Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{\partial S}{\partial t}(q_i, t) = -H\left(\frac{\delta S}{\delta q_i}(q_i, t), q_i, t\right). \quad (7.3.72)$$

Wir betrachten ein Teilchen, beschrieben durch die kanonischen Koordinaten (q_i, p_i) , welches sich in einem konservativen Kraftfeld bewegt, für welches gilt:

$$H = T + V = E = \text{const.} \quad (7.3.73)$$

Die Wirkung lässt sich dann schreiben als

$$S[q_i, t] = S_0[q_i] - Et. \quad (7.3.74)$$

7.3.1. Exkurs: Kleine Erinnerung an Hamilton-Jacobi

Man betrachtet kanonische Transformationen der generalisierten Koordinaten \mathbf{q} und Impulse \mathbf{p} auf

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (7.3.75)$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen bleiben invariant,

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_k}, \quad \dot{P}_k = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_k} \quad (7.3.76)$$

für eine geeignete transformierte Hamilton-Funktion \tilde{H} . In der Hamilton-Jacobi-Theorie versucht man, $\tilde{H} = 0$ zu erreichen, um die Bewegungsgleichungen leicht zu $\mathbf{Q} = \text{const.}$, $\mathbf{P} = \text{const.}$ integrieren zu können.

Wir betrachten eine beliebige Funktion $F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$, die von \mathbf{q} , \mathbf{Q} und t abhängt und

$$\det\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial Q_j}\right) \neq 0 \quad (7.3.77)$$

erfüllt, d.h., die Determinante der Krümmungsmatrix möge nicht verschwinden. Wir benutzen sie als Generator einer Transformation

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad (7.3.78)$$

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

welche sich als kanonisch erweist, da

$$\begin{aligned} dF_1 &= \partial_t F_1 dt + \partial_{q_i} F_1 dq_i + \partial_{Q_i} F_1 dQ_i \\ &= \partial_t F_1 dt + p_i dq_i - P_i dQ_i \\ &= \partial_t F_1 dt + dS + H dt - P_i dQ_i, \end{aligned} \quad (7.3.79)$$

$$\Rightarrow dS = P_i dQ_i - (H + \partial_t F_1) dt + dF_1. \quad (7.3.80)$$

Da sich dS und $d\tilde{S} = P_i dQ_i - \tilde{H} dt$ (wie gewohnt wird überall die Einstein-Summenkonvention verwendet) nur um ein totales Differential dF und in $\tilde{H} = H + \partial_t F_1$ unterscheiden, sind die Bewegungsgleichungen unverändert. Darüberhinaus ist $\tilde{H} = 0$, wenn F_1 die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(\mathbf{q}, \partial_{\mathbf{q}} F_1, t) + \partial_t F_1 = 0 \quad (7.3.81)$$

erfüllt. Alternativ können wir eine erzeugende Funktion $F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)$ wählen, mit

$$p_i = \partial_{q_i} F_2, \quad Q_i = \partial_{P_i} F_2, \quad \left| \frac{\partial^2 F_2}{\partial q_i \partial P_j} \right| = 0, \quad (7.3.82)$$

so dass

$$dS - dF_2 - d(Q_i P_i) = P_i dQ_i - (H + \partial_t F_2) dt \quad (7.3.83)$$

und

$$\tilde{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t) = H(\mathbf{q}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}), \mathbf{p}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}), t) + \partial_t F_2 \quad (7.3.84)$$

verschwindet, wenn F_2

$$H(\mathbf{q}, \partial_{\mathbf{q}} F_2, t) + \partial_t F_2 = 0 \quad (7.3.85)$$

erfüllt. Man findet, mit $\dot{\mathbf{P}} = 0$ wegen $\tilde{H} = 0$, dass

$$\frac{dF_2}{dt} = \partial_{\mathbf{q}} F_2 \dot{\mathbf{q}} + \partial_{\mathbf{P}} F_2 \dot{\mathbf{P}} + \partial_t F_2 \quad (7.3.86)$$

$$= p_i \dot{q}_i - H = L \quad \Rightarrow \quad F_2 = \int dt L = S. \quad (7.3.87)$$

Für $\dot{E} = 0$ steckt also die t -Abhängigkeit von $\tilde{H} = H + \partial_t F_2$ in $\partial_t F_2$, was weiterhin wegen $\tilde{H} = 0$ den Ansatz (7.3.74) rechtfertigt, genauer:

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = W(\mathbf{q}, \mathbf{P}) - Et, \quad (7.3.88)$$

d.h. $H(\mathbf{q}, \delta W / \delta \mathbf{q}) = E$, mit der Hamiltonschen charakteristischen Funktion $W(\mathbf{q}, \mathbf{P})$. Wegen $\mathbf{P} = \text{const.}$ definiert $W = \text{const.}$ eine Fläche im Raum der \mathbf{q} . Wir nennen $F_2 = S$, $W = S_0$. Die Flächen $S = \text{const.}$ bewegen sich und schieben sich über die Flächen $W = \text{const.}$ hinweg, sie bilden im $\{\mathbf{q}\}$ -Raum Wellenfronten, so genannte **Wirkungswellen**. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist $\mathbf{u} \parallel \nabla_{\mathbf{q}} S_0$ mit

$$u = |\mathbf{u}| = \frac{|E|}{|\nabla_{\mathbf{q}} S_0|}, \quad (7.3.89)$$

da aus $dS = \nabla_{\mathbf{q}} S_0 \cdot d\mathbf{q} - Edt = 0$ folgt, dass $Edt = (\nabla S_0 \cdot \mathbf{u}) dt$ und somit $\hat{\mathbf{u}}$ senkrecht zur Wellenfront ist. Weiterhin, da $\mathbf{p} = \partial F_2 / \partial \mathbf{q} = \partial S / \partial \mathbf{q} = \nabla_{\mathbf{q}} S_0$, folgt

$$u = \frac{|E|}{|\mathbf{p}|} = \frac{|E|}{mv}, \quad (7.3.90)$$

wobei wir ein einzelnes Teilchen mit Impuls \mathbf{p} und Geschwindigkeit \mathbf{v} , $v = |\mathbf{v}|$ betrachten. Neben dieser Teilchenbeschreibung kann also auch die Wirkungswellenbeschreibung herangezogen werden! Es gilt, dass \mathbf{u} und \mathbf{v} (anti-)parallel sind. Setzt man für die kinetische Energie des Teilchens $p^2/2m = E - V$, so folgt aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m} |\nabla_q S_0|^2 = E - V = -\partial_t S - V, \quad (7.3.91)$$

und daraus

$$|\nabla_q S_0|^2 = |\nabla_q S|^2 = p^2 = \frac{|E|^2}{u^2} = \frac{1}{u^2} (\partial_t S)^2. \quad (7.3.92)$$

Diese Gleichung beschreibt eine Wellenausbreitung im Rahmen der klassischen Mechanik, der so genannten Wirkungswellen.

7.3.2. Eikonaltheorie der Optik

Lichtausbreitung beschreibt man durch

$$\nabla^2 \Phi = \frac{n^2}{c^2} \partial_t^2 \Phi. \quad (7.3.93)$$

Mit Φ = skalares Potential, n = Brechungsindex, $u = c/n$ = Lichtgeschwindigkeit im Medium. Lösungen sind z.B. die ebenen Wellen

$$\Phi = \Phi_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (7.3.94)$$

mit $k = \omega n/c = 2\pi\nu/u = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi\nu$, $u = \nu\lambda$. Mit $\mathbf{k}_0 = k_0 \mathbf{e}_z$ = Wellenvektor im Vakuum erhält man

$$\Phi = \Phi_0 e^{ik_0(nz - ct)}. \quad (7.3.95)$$

Jetzt sei $n = n(\mathbf{r})$ ortsabhängig, wodurch Beugung möglich ist. Wir nehmen eine schwache Änderung an, $n \approx \text{const.}$ über $dr \cong \lambda$, und setzen

$$\Phi(\mathbf{r}) = e^{A(\mathbf{r}) + ik_0[L(\mathbf{r}) - ct]} \quad (7.3.96)$$

an, mit $A = \ln(\Phi_0) = \text{const.}$ für $n = \text{const.}$

$L(\mathbf{r})$ heißt **Eikonal** (griech. $\epsilon\iota\kappa\acute{\omega}\nu$ = Bild, Abbild), welches in der geometrischen Optik die Strecke eines Lichtstrahls bezeichnet.⁵ Es gilt

$$\nabla^2 \Phi = \nabla \cdot ([\nabla A + ik_0 \nabla L] \Phi) \quad (7.3.97)$$

$$= \Phi \left([\nabla(A + ik_0 L)]^2 + \nabla^2(A + ik_0 L) \right) \quad (7.3.98)$$

$$= \Phi \left[(\nabla A)^2 - k_0^2 (\nabla L)^2 + 2ik_0 (\nabla A) (\nabla L) + \nabla^2(A + ik_0 L) \right]. \quad (7.3.99)$$

Aus der Wellengleichung (7.3.93) folgt dann, dass $(\nabla^2 + k^2)\Phi = 0$, d.h.,

$$(i) \quad \nabla^2 L + 2(\nabla A) (\nabla L) = 0, \quad (7.3.100)$$

$$(ii) \quad \nabla^2 A + (\nabla A)^2 + k_0^2 [n^2 - (\nabla L)^2] = 0. \quad (7.3.101)$$

Für die geometrische Optik gelten die folgenden Näherungsannahmen:

- Aus der schwachen \mathbf{r} -Abhängigkeit von A folgt n. Taylor: $\lambda_0 \ll A/|\nabla A|$.

⁵Auch Bruns-Eikonal, welches gemäß dem Fermatschen Prinzip den kürzesten Weg zwischen zwei durch optische Medien getrennten Punkten beschreibt.

7. Einführung in die Theorie der Pfadintegrale

- Wegen $k_0^2 = (2\pi/\lambda_0)^2 \gg (\nabla A)^2 / A^2$ dominiert dann der 3. Term in (7.3.101), was zur Eikonalgleichung der geometrischen Optik führt:

$$(\nabla L)^2 = n^2 = \frac{c^2}{u^2}. \quad (7.3.102)$$

Die Lösungen definieren Flächen konstanter Phase, d.h. Wellenfronten ($L = \text{const.}$).

- Die Eikonalgleichung ist formal identisch mit der Wellengleichung (7.3.89) in der klassischen Mechanik:

$$(\nabla L)^2 = \frac{c^2}{u^2} \leftrightarrow (\nabla S_0)^2 = \frac{E^2}{u^2}. \quad (7.3.103)$$

Daraus folgt, dass die klassische Mechanik die selben Aussagen über S macht, wie die geometrische Optik über L .

7.3.3. Heuristische Ableitung der Schrödinger Gleichung:

Man kann nun versuchen, die klassische Mechanik als geometrisch-optischen Grenzfall einer Wellenmechanik aufzufassen. Falls also ein Teilchen auch Wellencharakter haben soll, müssen wir ihm eine Wellenlänge λ und eine Frequenz ν zuordnen können. Es sollte

$$k_0(L - ct) \sim S = W - Et \quad (7.3.104)$$

entsprechen. Daraus folgt:

$$E \sim ck_0 \sim \nu. \quad (7.3.105)$$

Der Proportionalitätsfaktor muss die Einheit einer Wirkung haben. Er wird durch das Experiment festgelegt, das Ergebnis kennt man:

$$E = h\nu, \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Nms}. \quad (7.3.106)$$

Weiter gilt: $u = \lambda\nu$.

$$\Rightarrow \quad \lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{E/p}{E/h} = \frac{h}{p}, \quad (7.3.107)$$

was wir als de Broglie-Wellenlänge kennen. Aus der Wellengleichung folgt mit dem Ansatz $\psi \sim e^{-i\omega t}$ die t -unabhängige Wellengleichung

$$\nabla^2 \psi + \frac{\omega^2}{u^2} \psi = \nabla^2 \psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi = \left[\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\right] \psi = 0, \quad (7.3.108)$$

und daraus

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = E\psi, \quad (7.3.109)$$

mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ aus der klassischen Hamiltonfunktion und der Zuordnung

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{r}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla. \quad (7.3.110)$$

Weiterhin ergibt $\psi \sim e^{-i\omega t}$ die Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \hbar\omega\psi = h\nu\psi = E\psi, \quad (7.3.111)$$

was die Identifikation $E \rightsquigarrow i\hbar\partial_t$ erlaubt und uns motiviert, die Schrödinger-Gleichung für die Wellenmechanik aufzustellen:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi. \quad (7.3.112)$$

Umgekehrt geht man nun von der Schrödinger-Gleichung aus und betrachtet die Eikonalnäherung im Rahmen der sogenannten WKB-Näherung.

7.4. Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Näherung

7.4.1. WKB-Phase

Wir setzen an:

$$\psi(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})| e^{iS(\mathbf{x})/\hbar} \quad (7.4.113)$$

Und finden aus der SGL entsprechend (7.3.100) und (7.3.101) die Gleichungen:

$$(i) \quad \nabla^2 S + 2(\nabla S)(\nabla \ln(|\psi|)) = 0, \quad (7.4.114)$$

$$(ii) \quad (\nabla S)^2 = 2m(E - V) + \frac{\hbar^2}{|\psi|} \nabla^2 |\psi|, \quad (7.4.115)$$

da $\nabla^2 \ln |\psi| + (\nabla \ln |\psi|)^2 = |\psi|^{-1} \nabla^2 |\psi|$, nach Identifikation von $n^2 k_0^2 \rightsquigarrow (2m/\hbar^2)(E - V)$ und $k_0 L \rightsquigarrow S/\hbar$.

Im Grenzfall von

$$\frac{\nabla^2 |\psi|}{|\psi|} \ll \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \quad (7.4.116)$$

erhalten wir den geometrisch optimalen Limes, in dem der \hbar^2 -Term in (7.4.115) vernachlässigt werden kann. Dies wird auch als **WKB-Näherung** bezeichnet.

Wir betrachten den einfachen 1D Fall. Aus (7.4.114) folgt dann:

$$\partial_x \left(\frac{1}{2} \ln(\partial_x S) + \ln |\psi| \right) = \partial_x \ln(|\psi| \sqrt{\partial_x S}) = 0, \quad (7.4.117)$$

d.h.

$$|\psi| = \frac{C}{\sqrt{\partial_x S}}. \quad (7.4.118)$$

In der WKB-Näherung folgt aus (7.4.115)

$$(\partial_x S)^2 = 2m(E - V(x)), \quad (7.4.119)$$

d.h.

$$S(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (7.4.120)$$

und

$$\psi(x) = \sum_{\pm} \frac{c_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm(i/\hbar) \int^x dx' p(x')}, \quad (7.4.121)$$

mit

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (7.4.122)$$

dem lokalen Impuls des Teilchens.

7.4.2. Bohr-Sommerfeld-Quantisierung*

Zum Abschluss nutzen wir die WKB-Näherung um Bindungszustände in einem Potential $V(x)$ zu bestimmen, welches in der Umgebung der klassischen Umkehrpunkte einer Oszillation linear im Raum variiert.

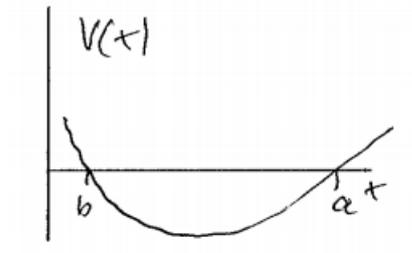


Abbildung 7.2.: Potential $V(x)$

a und b seien klassische Umkehrpunkte für gegebene Energien. Setzt man nun $V - E \rightarrow V$, $x - b \rightarrow x$, so kann man V in der Nähe von b linear nähern,

$$V = V'x, \quad V' < 0, \quad (7.4.123)$$

und erhält für die Schrödingergleichung bei b :

$$\psi'' = -c^2 x \psi, \quad c = \frac{\sqrt{-2mV}}{\hbar}. \quad (7.4.124)$$

Lösungen dieser Gleichung sind die so genannten Airy-Funktionen,

$$\psi_{\pm}(x) = \sqrt{x} J_{\pm 1/3} \left(\frac{2c}{3} x^{3/2} \right), \quad (7.4.125)$$

worin die Bessel-Funktionen $J_n(z)$ die Lösungen der Besselschen Differentialgleichung,

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{n^2}{z^2} \right) \right] J_n(z) = 0, \quad (7.4.126)$$

sind. Am Umkehrpunkt erhalten wir die charakteristische Länge

$$l_0 = \left(\frac{3}{2c} \right)^{2/3} \cong \left(\frac{\hbar^2}{m|V'|} \right)^{1/3}. \quad (7.4.127)$$

Weit entfernt vom Umkehrpunkt gilt

$$\psi_1(x) \cong x^{-1/4} \cos \left(\frac{2c}{3} x^{3/2} \mp \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (7.4.128)$$

Für $x \rightarrow \infty$ ist

$$J_{\pm 1/3} \left(i|x|^{3/2} \dots \right) = Ae^{+f(x)} + Be^{-f(x)}, \quad f \geq 0. \quad (7.4.129)$$

Beide Lösungen ψ_{\pm} müssen also so kombiniert werden, dass ψ regulär bleibt. Da

$$\int^x \frac{dx' p(x')}{\hbar} = \frac{2}{3} c x^{3/2} \quad (7.4.130)$$

ist, kann man dann die Koeffizienten c_{\pm} bestimmen und erhält

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right) \quad (7.4.131)$$

und bei a

$$\psi(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' - \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right]\right). \quad (7.4.132)$$

Es muss nun gelten: (7.4.131) = (7.4.132), sowie $C' = \pm C$. Daraus folgt dann, dass

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx' p(x') = \frac{\pi}{2} + n\pi, \quad (7.4.133)$$

d.h. die

Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx' p(x') = n + \frac{1}{2}. \quad (7.4.134)$$

Diese stellt für große n eine gute Näherung dar. Die Bedingung für deren Gültigkeit lautet

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| \ll \frac{p^2}{\hbar} = 2\pi \frac{p}{\lambda}. \quad (7.4.135)$$

8. Streutheorie

In diesem vorletzten Kapitel behandeln wir nochmals eine spezielle Klasse von Potentialproblemen: Wir befassen uns mit den Streulösungen der Schrödingergleichung in $d = 3$ beziehungsweise $d = 1$ Dimensionen, d.h. mit im Unendlichen oszillierenden und dementsprechend ungebundenen Wellenfunktionen. Die quantenmechanische Streutheorie hat heute große Bedeutung von der Atom- und Molekülphysik (z.B. Niederenergiestreuung in ultrakalten Gasen und Resonanzspektroskopie der Molekülstruktur) bis zur Hochenergiephysik (insbesondere Elementarteilchenstreuung, Neutronenphysik, tief-inelastische Streuung an Kernen und Baryonen, sowie Astroteilchenphysik).

Wir betrachten typische Streuprobleme, bei denen der Streuer (das Streupotential) endlich ausgedehnt ist, aber klein gegenüber den Abmessungen des Systems. Im folgenden beschreiben wir den Streuer durch ein Potential $V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$ um den Ursprung.

Einfallende und auslaufende Wellenpakete seien nicht überlappend, mit Ausnahme von exponentiell abfallende Flanken. Die Breite im Impulsraum sei so scharf, dass die Verbreiterung während des Experiments vernachlässigbar ist. Nach (2.2.51) ist dies der Fall, wenn

$$(\Delta p)_{t=0}^2 \ll \frac{m\hbar}{2t}, \quad (8.0.1)$$

so dass $(\Delta p)_{t=0}^2 t^2 / m^2 \ll \hbar^2 / (\Delta x)_0^2 \sim (\Delta p)_{t=0}^2$.

8.1. Streuung eines Wellenpaketes und stationäre Zustände

8.1.1. Wellenpaket

Wir betrachten ein Wellenpaket $\psi_0(\mathbf{x}, t_0)$, welches sich mit dem mittleren Impuls $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$ bewege, d.h., ausgedrückt in dessen Fourierzerlegung,

$$\psi_0(\mathbf{x}, t_0) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) \quad (8.1.2)$$

sei das Maximum der Funktion $\psi_0(\mathbf{k}, t_0)$ bei \mathbf{k}_0 , entsprechend eines mit Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \hbar \mathbf{k}_0 / m$ in Richtung des Streuers bewegten Teilchens.

Das Streuproblem besteht dann darin, die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t \rightarrow \infty)$ nach Streuung an V zu bestimmen. Um eine Lösung hierfür zu erhalten, gehen wir wie folgt vor:

(i) Zunächst entwickeln wir $\psi_0(\mathbf{x}, t_0)$ in Eigenfunktionen $\psi_{\mathbf{k}}$ der stationären Schrödingergleichung,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) - E_{\mathbf{k}} \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = 0, \quad (8.1.3)$$

8.1. Streuung eines Wellenpaketes und stationäre Zustände

zu den Energieeigenwerten $E_k = k^2 / (2m)$ der freien Bewegung. Dies definiert die Amplituden A_k ,

$$\psi_0(\mathbf{x}, t_0) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) A_{\mathbf{k}}(t_0), \quad (8.1.4)$$

oder, mit $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$, als allgemeine Zustandsvektoren geschrieben,

$$|\psi_0\rangle = \int d\mathbf{k} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle. \quad (8.1.5)$$

Die Zeitentwicklung in dieser Basis können wir direkt angeben:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) A_{\mathbf{k}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k(t-t_0)}, \quad (8.1.6)$$

alternativ wieder als

$$|\psi, t\rangle = \int d\mathbf{k} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi, t_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k(t-t_0)}. \quad (8.1.7)$$

8.1.2. Formale Lösung der stationären Schrödingergleichung

Als nächstes bestimmen wir die allgemeine Struktur der Streuzustände $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$. Wir schreiben die stationäre Schrödingergleichung wie folgt um:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (8.1.8)$$

$$v(\mathbf{x}) = 2m \frac{V(\mathbf{x})}{\hbar^2}. \quad (8.1.9)$$

Dies ist eine inhomogene Helmholtz- bzw. Wellengleichung, zu deren Lösung wir zunächst die Greensche Funktion bestimmen.

Zur Erinnerung: Greensche Funktion der Wellengleichung

$$(\nabla^2 + k^2) G_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (8.1.10)$$

Für die Fourier-Transformierte,

$$G_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{y} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} G_{\mathbf{k}}(\mathbf{y}). \quad (8.1.11)$$

folgt die algebraische Variante der inhomogenen Differentialgleichung (8.1.10),

$$(-q^2 + k^2) G_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = 1. \quad (8.1.12)$$

Formal erhalten wir somit

$$G_{\mathbf{k}}(\mathbf{y}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}}{-q^2 + k^2}. \quad (8.1.13)$$

Die Fouriertransformierte der Greenschen Funktion, $[(k-q)(k+q)]^{-1}$, weist also Pole bei $q = \pm k$ auf. Um Konvergenz des Integrals zu gewährleisten, muß eine Regularisierung eingeführt werden, z.B. der Art

$$G_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon}, \quad (8.1.14)$$

8. Streutheorie

sodass die Pole gemäß

$$G_{\mathbf{k}}^{(+)} : q = \pm \left(k + i \frac{\varepsilon}{2k} \right) \Rightarrow q^2 = k^2 + i\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (8.1.15)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(-)} : q = \pm \left(k - i \frac{\varepsilon}{2k} \right) \Rightarrow q^2 = k^2 - i\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (8.1.16)$$

in die komplexe Ebene verschoben werden. Da der Energienenner nicht von der Orientierung der Impulse abhängt, liefert die Winkelintegration:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}) &= \int_{-1}^1 dz \int_0^{\infty} \frac{q^2 dq}{(2\pi)^2} \frac{e^{iqrz}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} \quad (\text{mit } r = |\mathbf{x}| > 0) \\ &= \int_0^1 dz \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q^2 dq}{(2\pi)^2} \frac{e^{iqrz}}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int \frac{q e^{iqr} dq}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (8.1.17)$$

Wegen $r > 0$ kann die Integration in der oberen Halbebene geschlossen und mit Hilfe des Residuensatzes ausgeführt werden, sodass wir den folgenden Ausdruck für die Greenschen Funktionen der Helmholtz-Gleichung erhalten,

$$G_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}) = -\frac{i\pi}{4\pi^2 i r} \frac{2q e^{iqr}}{q \pm k} \Big|_{q=\pm k} = -\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}. \quad (8.1.18)$$

$G_{\mathbf{k}}^{(+)}$ heißt retardierte, $G_{\mathbf{k}}^{(-)}$ avancierte Greensche Funktion.

Mittels $G_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$ können wir die inhomogene Schrödingergleichung lösen,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \int d\mathbf{x}' G_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') v(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}'), \quad (8.1.19)$$

wobei $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ die allgemeine Lösung der homogenen Gleichung $(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ ist. Einsetzen ergibt die

Streuwellenfunktion zur Wellenzahl \mathbf{k} der einfallenden ebenen Welle:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \underbrace{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}_{\text{einfallende ebene Welle}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{x}' \underbrace{\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}_{\text{auslaufende Kugelwelle}} V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') \quad (8.1.20)$$

Wir haben die stationäre Schrödingergleichung somit in eine **Integralgleichung** umgeschrieben. Weit weg vom Streuzentrum gilt $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$, und damit

$$\begin{aligned} k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= k \left[\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}' + \mathbf{x}'^2 \right]^{1/2} \\ &\cong kr - k \frac{\mathbf{x}}{r} \cdot \mathbf{x}' = kr - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}', \end{aligned} \quad (8.1.21)$$

mit $\mathbf{k}' := k(\mathbf{x}/r) = k\hat{\mathbf{x}}$. Damit läßt sich die Lösung als Superposition aus einer

Einfallenden ebenen und einer auslaufenden Kugelwelle,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi), \quad (8.1.22)$$

$$\text{mit Streuamplitude } f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}'), \quad (8.1.23)$$

schreiben. Dass der 2. Term eine auslaufende Kugelwelle darstellt, folgt aus der radialen Stromdichte,

$$\hat{\mathbf{e}}_r \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \partial_r \psi) = \frac{\hbar k}{m} \frac{\hat{\mathbf{e}}_r}{r^2}. \quad (8.1.24)$$

Obige Ausdrücke geben die allgemeine Struktur von Streulösungen wieder. Um das Streuproblem zu lösen müssen wir die Streuamplitude berechnen.

8.1.3. Streuung eines Wellenpaketes

Mit Hilfe der soeben bestimmten allgemeinen Streulösung berechnen wir die Streuung des Wellenpaketes $\psi_0(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \psi_0(\mathbf{x}, t_0) &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) \left[\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{x}' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V_{\mathbf{x}'} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right]. \end{aligned} \quad (8.1.25)$$

Für $k_0 \gg |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$, d.h., kleine Streuwinkel, gilt:

$$k = \sqrt{(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2} \cong \sqrt{k_0^2 + 2\mathbf{k}_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)} \cong k_0 \left[1 + \frac{\hat{\mathbf{k}}_0}{k_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \right] = \hat{\mathbf{k}}_0 \cdot \mathbf{k}, \quad \hat{\mathbf{k}}_0 = \frac{\mathbf{k}_0}{k_0}. \quad (8.1.26)$$

Damit ist

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) e^{ikr} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \cong \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}}_0 r} \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}') \quad (8.1.27)$$

$$= \psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t_0) \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}') = 0, \quad (8.1.28)$$

da das Wellenpaket zur Startzeit t_0 weit weg vom Streuer zentriert ist, in negativer $\hat{\mathbf{k}}_0$ -Richtung während es hier im ersten Faktor in positiver Richtung ausgewertet ist. Daraus folgt, dass

$$\psi_0(\mathbf{k}, t_0) \equiv A_{\mathbf{k}}(t_0) \quad (8.1.29)$$

gilt, vgl. (8.1.4). Durch einsetzen in (8.1.6) erhalten wir die t-Abhängigkeit:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar} \\ &\xrightarrow{|\mathbf{x}|\rightarrow\infty} \psi_0(\mathbf{x}, t) + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_0(\mathbf{k}, t_0) \frac{e^{i[kr-E_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar]}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (8.1.30)$$

8. Streutheorie

Der erste Term stellt das ungestörte, durchgehende Wellenpaket dar. Mit $k \cong \hat{\mathbf{k}}_0 \cdot \mathbf{k}$ folgt für den 2. Term, mit $f_{\mathbf{k}} \cong f_{\mathbf{k}_0}$,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t) + \frac{f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi)}{r} \psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t). \quad (8.1.31)$$

$\psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t)$ hat in radialer Richtung die gleiche Form wie das einfallende Wellenpaket. Die Wellenfunktion ist nach der Streuung also eine **Superposition** aus dem durchgehenden und dem mit $f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi)/r$ gewichteten, in (ϑ, φ) -Richtung „abgelenkten“ Streuwellenfunktion.

Anmerkungen:

- Obiger Ausdruck gilt nicht, wenn starke Streuresonanzen die Form des Wellenpakets verändern.
- Er gilt auch nicht für langreichweitige Potentiale wie das Coulomb-Potential. Solche Potentiale haben keine reinen Kugelwellen als Streuwellen.

8.2. Streuquerschnitt

Wir definieren den differentiellen Streuquerschnitt wie folgt:

Definition 8.1. *Differentieller Wirkungsquerschnitt*

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\text{\#Teilchen gestreut nach } d\Omega \text{ um } \Omega}{d\Omega} \\ &= \frac{dN(\Omega)}{N_{\text{ein}} d\Omega} \end{aligned} \quad (8.2.32)$$

$$\text{mit } N_{\text{ein}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt j_{\text{ein}}; \quad dN(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt j_r r^2 d\Omega.$$

Hierin verwenden wir den Wahrscheinlichkeitsstrom \mathbf{j}_{ein} , welcher dem einfallenden Wellenpaket entspricht, und die daraus mittels der Kontinuitätsgleichung abgeleitete Norm N_{ein} ,

$$\mathbf{j}_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi_0^* \nabla \psi_0) \cong \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} |\psi_0(\mathbf{x}, t)|^2, \quad (8.2.33)$$

$$\Rightarrow N_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt' |\psi_0(\mathbf{x}_{\text{Quelle}}, t')|^2. \quad (8.2.34)$$

Aus der radialen Ableitung des in $\hat{\mathbf{k}}_0$ -Richtung auslaufenden Wellenpakets,

$$\begin{aligned} \partial_r \psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t) &= \partial_r \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 r} \psi_0(\mathbf{k}) e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 r} \psi_0(\mathbf{k}) e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} \\ &= ik_0 \psi(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t) \quad (\text{Maximum von } \psi_0(\mathbf{k}, t) \text{ bei } \mathbf{k}_0), \end{aligned} \quad (8.2.35)$$

folgt:

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\frac{|f_{\mathbf{k}_0}(\Omega)|^2}{r} \psi_0^*(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t) \partial_r \frac{1}{r} \psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t) \right) \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} \frac{|f_{\mathbf{k}_0}(\Omega)|^2}{r^2} |\psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t)|^2, \end{aligned} \quad (8.2.36)$$

und somit gilt

$$dN(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt j_r d\Omega r^2 = |f_{\mathbf{k}_0}(\Omega)|^2 d\Omega \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi_0(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t)|^2. \quad (8.2.37)$$

Vernachlässigt man die Dispersion des Wellenpakets, so sind die Zeitintegrale in (8.2.34) und (8.2.37) gleich – andernfalls würde eine transversale Verbreitung die lokale Wahrscheinlichkeit erniedrigen. Damit ergibt sich der

Differentielle Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}_0}(\Omega)|^2, \quad (8.2.38)$$

sowie, durch Integration über alle Winkel, der

Totale Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \int d\Omega |f_{\mathbf{k}_0}(\Omega)|^2. \quad (8.2.39)$$

Anmerkung: Weniger Arbeit macht die Berechnung für die stationäre Lösung: Die Stromdichte der einfallenden ebenen Welle ergibt sich zu

$$j_{\text{ein}}(\mathbf{k}) = \left| \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \nabla e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \right) \right| = \frac{\hbar |\mathbf{k}|}{m}, \quad (8.2.40)$$

die der auslaufenden Kugelwelle, vgl. (8.1.24),

$$j_r(k) = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2}, \quad (8.2.41)$$

aus deren Verhältnis man sofort

$$\frac{r^2 j_r}{j_{\text{ein}}} = |f(\Omega)|^2 = \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (8.2.42)$$

erhält.

8.3. Partialwellen-Analyse*

Im folgenden besprechen wir in größerem Detail, wie die Streuwellenlösungen konstruiert werden können. Da das Streuproblem für ein rotationssymmetrisches Potential, $V(\mathbf{r}) \equiv V(|\mathbf{r}|)$, zylindersymmetrisch

8. Streutheorie

ist und darüberhinaus die gestreute Welle die Rotationssymmetrie des Potentials widerspiegelt, können wir, unter der Voraussetzung eines solcher Art symmetrischen V die Lösungen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ in Kugelflächenfunktionen entwickeln. Wir erhalten stationäre Lösungen, die auch Eigenfunktionen des Drehimpulses sind und die man im Kontext der Streuung als **Partialwellen** bezeichnet. Das asymptotische Verhalten dieser Partialwellen werden wir durch **Phasenverschiebungen** charakterisieren, die sogenannten „Streu-phasen“.

8.3.1. Kontinuumslösungen im sphärischen, stückweise konstanten Potential

Für die Entwicklung allgemeiner Streuwellenfunktionen ist es zunächst notwendig eine geeignete Basis solcher Partialwellen zu bestimmen. Zu diesem Zweck lösen wir die Schrödingergleichung für ein einfaches sphärisches Potential, das rotationssymmetrische Kastenpotential, welches durch

$$V(r) = -V_0\theta(r)\theta(a-r) \quad (8.3.43)$$

definiert ist. Dieses Potential ist, über das hier gesteckte Ziel hinaus, von allgemeiner Bedeutung für die qualitative Analyse kurzreichweitiger Potentiale in der Molekül- und Kernphysik, da insbesondere Niederenergie-Streuung in guter Näherung durch wenige Parameter beschrieben werden kann, hier Ausdehnung a und Tiefe V_0 des Potentialtopfs.

Die stationäre Schrödingergleichung $\hat{H}\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$ hat gemäß Abschnitt 4.5, nach einem Separationsansatz der Eigenfunktionen $\psi(r, \theta, \phi) = R_l(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ in Kugelflächen- und eine radiale Funktion, in radialer Richtung die Form:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E \right] R_l(r) = 0. \quad (8.3.44)$$

Mit $k = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E-V)}$, $V = \text{konstant}$, und $\rho = kr$ vereinfacht sich die Gleichung in ihrer Form, hier in die

Besselsche Differentialgleichung:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{2}{\rho} \partial_\rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] R_l(\rho) = 0. \quad (8.3.45)$$

Für $l = 0$ hat sie einfache Lösungen,

$$(\partial_\rho^2 + 1)(\rho R_0) = 0, \quad \text{also} \quad R_0 \in \left\{ \frac{\sin \rho}{\rho}, -\frac{\cos \rho}{\rho} \right\}. \quad (8.3.46)$$

Man findet folgende

Allgemeine Lösungen der Besselschen DGL:

- sphärische Besselfunktionen:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \partial_\rho \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (8.3.47)$$

- sphärische von Neumann-Funktionen:

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \partial_\rho \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (8.3.48)$$

Daraus erhalten wir die sphärischen Hankelfunktionen:

$$h_l^{(1)} = j_l + in_l, \quad (8.3.49)$$

$$h_l^{(2)} = j_l - in_l, \quad (8.3.50)$$

mit $h_0^{(1,2)} = \mp \exp(\pm i\rho) / \rho$.

Daraus bestimmen wir die Streuzustände für den sphärischen Potentialtopf, welche Kontinuumslösungen mit Energien $E > 0$ darstellen:

$$R_l(r) = \begin{cases} A j_l(qr), & r < a, \quad q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar \\ B j_l(kr) + C n_l(kr), & r > a, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \end{cases}. \quad (8.3.51)$$

Aus der Anschlussbedingung

$$q \frac{\partial_\rho j_l}{j_l} \Big|_{\rho=qa} = k \frac{B \partial_\rho j_l + C \partial_\rho n_l}{B j_l + C n_l} \Big|_{\rho=ka} \quad (8.3.52)$$

bei $r = a$ ergibt sich der Quotient B/C . Für $r \rightarrow \infty$ erhalten wir, mit

$$j_l(\rho \rightarrow \infty) \sim \frac{\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)}{\rho}, \quad n_l(\rho \rightarrow \infty) \sim -\frac{\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)}{\rho}, \quad (8.3.53)$$

sowie

$$\frac{C}{B} =: -\tan \delta_l(k), \quad (8.3.54)$$

die asymptotische Form der Lösungen,

$$\begin{aligned} R_l(r) &= \frac{B}{kr} \left[\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - \frac{C}{B} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right] \\ &= \frac{B}{kr} \frac{1}{\cos \delta_l(k)} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \end{aligned} \quad (8.3.55)$$

Diese entsprechen, gegenüber einer freien Kugelwelle $(\sin \rho)/\rho$ um $\delta_l(k)$ phasenverschobene Kugelwellen. Für $l = 0$ erhält man aus der Anschlussbedingung bei $r = a$ die Phasenverschiebung

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{k}{q} \tan qa\right) - ka. \quad (8.3.56)$$

8. Streutheorie

Für verschiedene Potentialtiefen kann δ_0 größer oder kleiner Null sein, je nachdem, wo der oberste Bindungszustand im Potential liegt. Ohne Bindungszustand ist $\delta_0 > 0$ für $V_0 > 0$ bzw. $\delta_0 < 0$ für $V_0 < 0$.

8.3.2. Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen

Wir kehren jetzt zur Lösung des Streuproblems für allgemeine Potentiale zurück und bestimmen die Entwicklung der Wellenfunktionen der Streuzustände in Partialwellen. Die Streuwellenfunktionen (8.1.22) bestehen aus einer einlaufenden ebenen Welle sowie einer auslaufenden Kugelwelle. Die ebene Welle können wir in die auf der Kugeloberfläche S^2 vollständigen Kugelflächenfunktionen wie folgt entwickeln,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(\mathbf{k}) j_l(kr) Y_{lm}(\Omega), \quad (8.3.57)$$

mit Koeffizienten c_{lm} und radialen Funktionen j_l , welche wir im folgenden bestimmen wollen. O.B.d.A. nehmen wir an, dass $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{e}}_z$. Da auf der linken Seite der Gleichung $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = kr \cos \theta$ unabhängig von φ ist, kommt auf der rechten Seite nur Y_{l0} vor, und wir erhalten:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) \underbrace{\left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos \theta)}_{=Y_{l0}(\theta)}. \quad (8.3.58)$$

Nur die $j_l(kr)$ sind regulär bei $r \rightarrow 0$ und tragen bei! Mit der

Orthogonalitätsrelation der Legendre-Polynome (4.4.97),

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) P_{l'}(z) = 2(2l+1)^{-1} \delta_{ll'} \quad (8.3.59)$$

erhalten wir durch Multiplikation von (8.3.58) mit $P_l(z)$ und Integration über $z = \cos \theta$:

$$A_l j_l(kr) = [\pi(2l+1)]^{1/2} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz}. \quad (8.3.60)$$

Wir untersuchen das Verhalten des führenden Terms für $r \rightarrow 0$: Da $P_l(z)$ ein Polynom vom Grad l ist, folgt, dass $z^k = \alpha_k P_k(z) +$ ein Polynom vom Grad $k-2$ ist, mit einer k -abhängigen Konstante α_k , denn

$$2^k k! P_k(z) = (\partial_z)^k (z^2 - 1)^k, \quad (8.3.61)$$

vgl. (4.4.97). Desweiteren gilt wegen (8.3.59): $\int_z P_l P_k = 0$ für $k < l$. Daher trägt erst der Term $(ikrz)^l / l!$ in der Entwicklung von e^{ikrz} um $r = 0$ bei und es gilt

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) z^l = \left[\frac{2^l (l!)^2}{(2l)!} \right] \int_{-1}^1 dz P_l(z)^2 \stackrel{(8.3.59)}{=} \frac{2^{l+1} (l!)^2}{(2l+1)!}. \quad (8.3.62)$$

Damit erhalten wir

$$A_l j_l(kr) = \frac{(ikr)^l 2^{l+1} l!}{(2l+1)!} [\pi(2l+1)]^{1/2} + \mathcal{O}((kr)^{l+1}) . \quad (8.3.63)$$

Mit

$$j_l(kr) = \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} + \mathcal{O}((kr)^{l+1}) \quad (8.3.64)$$

folgt daraus, dass

$$A_l = i^l [4\pi(2l+1)]^{1/2} , \quad (8.3.65)$$

da $(2l+1)!! = (2l+1)! / (2^l l!)$. Also finden wir die

Entwicklung ebener Wellen nach Kugelflächenfunktionen Y_{l0} :

$$e^{ikrz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(z) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0}(\theta) . \quad (8.3.66)$$

8.3.3. S-Matrix und Streuphase

Wir fahren nun mit der Entwicklung der Streuwellenfunktionen (8.1.22) fort: Da V kugelsymmetrisch ist, muss die Streuamplitude $f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \equiv f_{\mathbf{k}}(\theta)$ zylindersymmetrisch sein, so dass wir sie wie folgt in "Partialwellenamplituden" f_l entwickeln können:

$$f_{\mathbf{k}}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos(\theta)) . \quad (8.3.67)$$

Um diese Amplituden f_l zu berechnen, entwickeln wir zunächst $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ nach Y_{l0} und Lösungen $R_l(r)$ der stationären Schrödingergleichung zum Eigenwert $E = \hbar^2 k^2 / 2m$,

$$\left[\partial_r^2 + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] r R_l(r) , \quad (8.3.68)$$

vgl. (4.5.128). Die Koeffizienten der Partialwellenentwicklung von $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ sind, in Analogie zu (8.3.44) und (8.3.66), diese Radiallösungen R_l :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(z) . \quad (8.3.69)$$

Für die Parametrisierung (8.1.22) mittels Streuamplitude $f_{\mathbf{k}}$ betrachten wir den Limes $r \rightarrow \infty$ und setzen $V(r \rightarrow \infty) = 0$:¹

$$R_l(r) = B_l \left[h_l^{(2)}(kr) + S_l(E) h_l^{(1)}(kr) \right] \quad (8.3.70)$$

$$\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{i B_l}{kr} \left[\underbrace{e^{-i(kr - l\pi/2)}}_{\text{einlaufende}} - S_l(E) \underbrace{e^{i(kr - l\pi/2)}}_{\text{auslaufende}} \right] . \quad (8.3.71)$$

Kugelwelle

¹Genauer muß das Potential lediglich schneller als $V(r \rightarrow \infty) < 1/r^2$ abfallen.

8. Streutheorie

Einsetzen der Partialwellenentwicklung von $\exp\{ikr\}$ und von $f_{\mathbf{k}}$ in $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ aus (8.1.22) liefert für $r \rightarrow \infty$:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \cong \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} P_l(\cos \theta) \left[\frac{i^l}{2i} \left(e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \right) + k f_l e^{ikr} \right]. \quad (8.3.72)$$

Ein Vergleich der einlaufenden Wellen $\sim e^{-ikr}$ in (8.3.71) und (8.3.72) liefert $B_l = 1/2$.

$S_l(E)$ ist eine von k und damit von E abhängige Amplitude. (Im Rahmen der allgemeinen Streutheorie sind die $S_l(E)$ Eigenwerte der S-Matrix.) Man findet für den radialen Strom der l ten Partialwelle:

$$j_{r,l} = \frac{\hbar}{m} (R_l^* \partial_r R_l) = -\frac{\hbar}{mkr^2} (1 - |S_l(E)|^2), \quad (8.3.73)$$

unter Nutzung der Asymptotik von $h_l^{(1)}$ und Weglassen von $|P_l(z)|^2 \geq 0$.

Wegen der Wahrscheinlichkeits-Erhaltung muss für jedes l gelten:

$$j_{r,l} \equiv 0, \quad (8.3.74)$$

damit durch jede Kugelschale soviele Teilchen ein wie auslaufen, daraus folgt, dass

$$|S_l(E)| = 1, \quad \forall l. \quad (8.3.75)$$

Daher muss S_l die Form

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l}, \quad \delta_l \in \mathbb{R}, \quad (8.3.76)$$

haben. Damit wird

$$\begin{aligned} R_l(r) &= \frac{1}{2} [h^{(2)}(kr) + e^{2i\delta_l(E)} h^{(1)}(kr)] \\ &= e^{i\delta_l} [j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l]. \end{aligned} \quad (8.3.77)$$

Die Wirkung des Potentials ist also lediglich eine Phasenverschiebung! Der Vergleich von (8.3.71) und (8.3.72) ergibt die

Partialwellenamplituden ausgedrückt in den **Streuphasen** $\delta_l \equiv \delta_l(k)$:

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k}. \quad (8.3.78)$$

Daraus erhalten wir die

Partialwellenzerlegung der Streuamplituden,

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta), \quad (8.3.79)$$

sowie des **differentiellen Streuquerschnitts,**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(z) P_{l'}(z), \quad (8.3.80)$$

und somit des **totalen Wirkungsquerschnitts:**

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (8.3.81)$$

Anmerkung:

In der Summe über l treten nur l mit $l \leq ka$ auf, mit $a \sim$ Reichweite des Potentials.

- **Klassisch:** Der Stoßparameter d ist kleiner als die Reichweite a .
- **QM:** Für $r > a$ wirkt nur das Zentrifugalpotential $\hbar^2 l(l+1) / (2mr^2)$.

Für $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ ist der klassische Umkehrradius an diesem $r_{kl} = \sqrt{l(l+1)}/k$. Für $r < r_{kl}$ fällt daher $\psi(|\mathbf{x}|)$ exponentiell ab. Ist also $r_{kl} > a$, so „spürt“ ψ nichts von V , d.h., die Streuung erfolgt nur für

$$\sqrt{l(l+1)} \approx l \leq ka. \quad (8.3.82)$$

Daraus folgt, dass für $k \rightarrow 0$ nur **s-Wellen-Streuung** ($l = 0$) möglich ist. Diese ist von zentraler Bedeutung für die Niederenergiestreuung von Atomen in ultrakalten Atomgasen und Bose-Einstein-Kondensaten zwischen Alkali-Atomen, welche kein permanentes Dipolmoment aufweisen.

8.4. Optisches Theorem

Aus der Partialwellen-Entwicklung von f_k folgt:

$$\text{Im } f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) P_l(z). \quad (8.4.83)$$

Vergleichen wir dies nun mit der Entwicklung für σ , so erhalten wir das

Optische Theorem:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f_k(0), \quad (8.4.84)$$

d.h., der Streuquerschnitt ist \propto Imaginärteil der Streuamplitude in Vorwärtsrichtung.
Diese Aussage entspricht der Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsdichte im Streuprozess.

Das Optische Theorem gilt allgemein auch für nicht-sphärische Potentiale.

9. Zustand und Messprozess

Erinnern wir uns zunächst an den axiomatischen Aufbau der Quantenmechanik, den man in 5 Postulaten zusammenfassen kann:

1. Ein physikalischer Zustand entspricht einem Vektor $|\psi\rangle$ in einem unendlich-dimensionalen Vektorraum \mathcal{H} (Hilbertraum).
2. Jede Observable (Messgröße) entspricht einem hermiteschen linearen Operator $\hat{\mathcal{A}} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.
3. Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit zur Messung von a_n ist gemäß der Bornschen Regel

$$P(\text{Messung von } \hat{\mathcal{A}} \text{ auf } |\psi\rangle \text{ ergibt } a_n) = |c_n|^2 = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle, \quad (9.0.1)$$

wobei $\hat{P}_{|n\rangle}$ der Projektor ist auf $|n\rangle$. Die Messung von a_n führt zu einem Kollaps des Zustandes $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$.

4. Die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ für geschlossene Systeme, die durch die Schrödingergleichung beschrieben werden können, lautet:

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \mathcal{H} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle, \quad \hat{H} = \text{Hamilton-Operator}. \quad (9.0.2)$$

5. Bei einer Messung geht $|\psi\rangle$ in $|n\rangle$ über, wenn der Messwert von \mathcal{A} gleich a_n ist (nicht-entarteter Fall).

Bemerkung: intrinsischer Probabilismus:

Für ein Ensemble aus Teilchen in $|\psi\rangle$ können wir den Zufall des Messausgangs **nicht** auf die Unkenntnis des Zustands zurückführen, wie das für den statischen Zufall der Fall war.

Im Folgenden stellen wir die Frage, ob die Quantentheorie durch verborgene Parameter ergänzt werden kann und inwiefern das Axiom 5 im Rahmen einer quantenmechanischen Behandlung des Gesamtsystems abgeleitet werden kann.

9.1. Dichtematrix

9.1.1. Reine und gemischte Gesamtheiten

Zur Unterscheidung des intrinsisch-quantenmechanischen und des statistischen Zufalls eignet sich die *Dichtematrix* ρ , die man auch als statistischen Operator oder Dichteoperator bezeichnet.

Definition 9.1. Zum Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definieren wir den linearen *Dichte-Operator* (Dichtematrix)

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}. \quad (9.1.3)$$

Alle physikalischen Größen können mit Hilfe von $\hat{\rho}$ bestimmt werden:

- Die Berechnung der Mittelwerte erfolgt als

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \hat{A} | \psi \rangle \quad (9.1.4)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_n \langle n | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \hat{A} \hat{\rho} | n \rangle . \end{aligned} \quad (9.1.5)$$

Mit der Spur $\text{Sp } \hat{O} = \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle = \text{Tr } \hat{O}$ ("trace") für $\{|n\rangle\}$ Orthonormalbasis von H lässt sich dies kompakt schreiben als

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \text{Sp}(\hat{A} \hat{\rho}_{|\psi\rangle}) . \quad (9.1.6)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Spur basisunabhängig ist und $\text{Sp}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Sp}(\hat{B}\hat{A})$ gilt (Zyklizität).

- Die Wahrscheinlichkeit a_n zu messen ist also

$$P(a_n \text{ wird gemessen}) = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle = \text{Sp}(\hat{P}_{|n\rangle} \rho) . \quad (9.1.7)$$

Die Dichtematrix $\rho_{|\psi\rangle}$ hat folgende Eigenschaften:

$$(i) \quad \text{Sp } \rho_{|\psi\rangle} = 1 \quad , \quad \text{denn} \quad \text{Sp } \rho = \langle \psi | \psi \rangle = 1 , \quad (9.1.8)$$

$$(ii) \quad \rho^2 = \rho \quad , \quad \text{denn} \quad |\psi\rangle \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1} \langle \psi | = |\psi\rangle \langle \psi | , \quad (9.1.9)$$

$$(iii) \quad \rho^\dagger = \rho \quad , \quad \text{denn} \quad |\psi\rangle^\dagger = \langle \psi | . \quad (9.1.10)$$

Auch die Schrödinger-Zeitentwicklung kann als Gleichung für die Dichtematrix geschrieben werden. Ausgehend von der Schrödingergleichung für den Zustand,

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle , \quad \text{bzw.} \quad -i\hbar \partial_t \langle \psi | = \langle \psi | \hat{H} , \quad (9.1.11)$$

berechnen wir:

$$i\hbar \partial_t \rho_{|\psi\rangle} = i\hbar (\partial_t |\psi\rangle) \langle \psi | + |\psi\rangle \partial_t \langle \psi | \quad (9.1.12)$$

$$= \hat{H} |\psi\rangle \langle \psi | - |\psi\rangle \langle \psi | \hat{H} . \quad (9.1.13)$$

Wir erhalten somit die

9. Zustand und Messprozess

von Neumann-Gleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad \text{bzw.} \quad \partial_t \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (9.1.14)$$

Man beachte, dass diese Gleichung nicht mit der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild,

$$\partial_t \hat{O}(t) = \underbrace{\quad}_{\text{kein Minuszeichen!}} \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}(t)], \quad (9.1.15)$$

(Heisenbergsche Bewegungsgleichung)

zu verwechseln ist!

Reine Zustände (Gesamtheiten)

Wir wollen uns nun erneut der Interpretation des Zufalls zuwenden. Wir erinnern uns, dass die Bedeutung des intrinsisch-quantenmechanischen Zustands wie folgt zu verstehen ist: Gegeben sei ein Ensemble von Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$. Wir messen \hat{A} N -mal und erhalten N_n -mal a_n , also

$$P(a_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} = |c_n|^2. \quad (9.1.16)$$

Ein solcher Zustand heißt **reiner Zustand** bzw. ein Ensemble von Teilchen in einem reinen Zustand. Neben diesem inhärenten Zufall, dem einzelnen Zustand innewohnenden statistischen Charakter kann in einem Ensemble noch eine gewöhnliche statistische Verteilung von Zuständen vorliegen.

Gemischte Zustände (Gesamtheiten)

Liegt ein Ensemble von unterschiedlichen (reinen) Zuständen vor, so nennt man dies eine **Gemischte Gesamtheit**, ein Gemisch oder einen gemischten Zustand.

Betrachten wir dazu ein Ensemble von N Teilchen, von denen N_i im Zustand $|\psi_i\rangle$ seien. Alle diese Zustände seien normiert, d.h., $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$, aber nicht notwendigerweise orthogonal zueinander. Man bezeichnet dieses als *gemischtes Ensemble* oder einen *gemischten Zustand*. Es gelte, dass

$$p_i = \frac{N_i}{N} \quad (9.1.17)$$

sei die Wahrscheinlichkeit, dass ein Repräsentant des Ensembles im quantenmechanischen Zustand $|\psi_i\rangle$ ist. All diese Wahrscheinlichkeiten müssen sich zu

$$\sum_i p_i = 1 \quad (9.1.18)$$

summieren. Dem Gemisch ordnet man die

Dichtematrix,

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \equiv \sum_i p_i \rho_i, \quad (9.1.19)$$

zu. Noch immer gilt:

- $\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\hat{A}\rho)$, denn

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \quad (9.1.20)$$

$$= \sum_i p_i \text{Sp}(\hat{A}\rho_i) = \text{Sp}\left(\sum_i p_i \rho_i \hat{A}\right) = \text{Sp}(\rho \hat{A}). \quad (9.1.21)$$

- $P(a_n) = \text{Sp}(\hat{P}_{|n}\rho)$, denn für $|\psi_i\rangle = \sum_n c_n^i |n\rangle$ ist

$$P(a_n) = \sum_i \underbrace{p_i}_{\text{statistischer Zufall}} \underbrace{|c_n^i|^2}_{\text{intrinsischer Zufall}} = \sum_i p_i \text{Sp}(\hat{P}_{|n}\rho_i). \quad (9.1.22)$$

- $\text{Sp}(\rho) = \sum_i p_i \text{Sp}(\rho_i) = \sum_i p_i = 1$,

- $\rho^\dagger = \rho$.

Wichtiger Unterschied: $\rho^2 \neq \rho$ sofern $p_i \neq 0$ für mehr als ein i , denn

$$\rho^2 = \left(\sum_i p_i \rho_i\right) \left(\sum_j p_j \rho_j\right) = \sum_i p_i^2 \rho_i + \sum_{i,j} p_i p_j (1 - \delta_{ij}) \rho_i \rho_j \neq \rho. \quad (9.1.23)$$

Insbesondere ist

$$\text{Sp}\rho^2 \leq 1, \quad (9.1.24)$$

denn

$$\begin{aligned} \text{Sp}\rho^2 &= \sum_n \sum_{ij} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{ij} p_i p_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 \leq \sum_{ij} p_i p_j = 1. \end{aligned} \quad (9.1.25)$$

Bemerkung: Wie eingangs erwähnt, müssen $|\psi_i\rangle$ und $|\psi_j\rangle$ nicht notwendigerweise orthogonal sein! Es gilt aber stets für normierte $|\psi_i\rangle$, dass $|\langle \psi_i | \psi_j \rangle| \leq 1$.

Dies ergibt das folgende **Unterscheidungskriterium** zur Abgrenzung von reinen und gemischten Zuständen:

$$\text{Reiner Zustand: } \text{Sp}\rho^2 = 1 \quad \leftrightarrow \quad \text{gemischter Zustand: } \text{Sp}\rho^2 < 1. \quad (9.1.26)$$

Die Unterscheidung zwischen reinen und gemischten Zuständen ist extrem wichtig, denn sie entspricht der Unterscheidung zwischen der echten quantenmechanischen Superposition und dem klassischen Mischen von Teilchen mit bestimmten Eigenschaften in einem Ensemble:

9. Zustand und Messprozess

Die quantenmechanische Superposition von Zuständen $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ führt zu einem reinen Zustand

$$\rho_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{n,m} c_n c_m^* |n\rangle\langle m|. \quad (9.1.27)$$

Diese Darstellung von ρ beinhaltet eine Matrix, die Dichtematrix

$$\rho_{|\psi\rangle, nm} \equiv c_n c_m^*. \quad (9.1.28)$$

Die Nebendiagonalelemente führen zu Interferenzeffekten der Beiträge der Basis zu $|\psi\rangle$ zu verschiedenen $n \neq m$. Setzt man die Nebendiagonalelemente gleich Null, so ergibt sich ein statistisches Gemisch:

$$\rho_G = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|. \quad (9.1.29)$$

Merke: Es ist nicht möglich, durch Transformation in eine andere Basis ρ so zu diagonalisieren, dass für einen reinen Zustand mehr als ein Eigenwert ungleich Null ist.

Beweis: Es sei $\rho_{|\psi\rangle}$ der Dichte-Operator eines reinen Zustands. Daraus folgt:

$$\rho_{|\psi\rangle}^2 = \rho_{|\psi\rangle}. \quad (9.1.30)$$

Es sei

$$(U\rho_{|\psi\rangle}U^\dagger)_{nm} = p_n \delta_{nm} \quad \text{mit } p_n \neq 0, \quad (9.1.31)$$

für $1 \leq n \leq N, N > 1$. Dann gilt

$$U\rho U^\dagger = U\rho^2 U^\dagger = U\rho U^\dagger \quad (9.1.32)$$

und

$$(U\rho U^\dagger)_{mm} = p_n = (U\rho U^\dagger U\rho U^\dagger)_{mm} = p_n^2. \quad (9.1.33)$$

Da $\sum_n p_n = 1$ ist, muss gelten $\sum_n p_n^2 = 1$, was $p_n \geq 0$ widerspricht. \square

Für einen reinen Zustand für Diagonalisierung mittels $|n'\rangle = U|n\rangle$ also zurück auf

$$\begin{aligned} \rho_{|\psi\rangle} &= \sum_{n'm'} \rho_{n'm'} |n'\rangle\langle m'|, \quad \text{mit } \rho_{n'm'} = \delta_{\bar{n}'n'} \delta_{\bar{n}'m'} \\ &= |\bar{n}'\rangle\langle \bar{n}'| \equiv |\psi\rangle\langle\psi|. \end{aligned} \quad (9.1.34)$$

Auch für einen gemischten Zustand,

$$\rho_G = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|, \quad (9.1.35)$$

generiert eine unitäre Transformation, welche auf die Darstellung bezüglich einer anderen Basis führt,

$$U\rho_G U^\dagger = \sum_{n'm'} \rho_{n'm'} |n'\rangle\langle m'|, \quad (9.1.36)$$

nichtverschwindende Nebendiagonalelemente, wenn mindestens ein p_n unterschiedlich von allen anderen $p_m, m \neq n$, ist. **Interferenzen** treten also **Basis-abhängig** auf. Ihr Auftreten allein ist noch kein Hinweis auf einen reinen Zustand!

Beispiel: Betrachten wir hierzu das Spin-1/2-System:

1. Ein Eigenzustand $|\psi\rangle = |1/2, (1/2)_x\rangle$ von $\sigma_x/2$ in der Basis der Spinzustände in z-Richtung lautet:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle). \quad (9.1.37)$$

Der entsprechende Dichteoperator ist

$$\rho_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|). \quad (9.1.38)$$

2. Demgegenüber ist ein statistisches Gemisch z.B.

$$\rho_G = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|). \quad (9.1.39)$$

Nun vergleichen wir

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2} \left[\langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle + \underbrace{2\text{Re}\langle\uparrow|\hat{A}|\downarrow\rangle}_{\text{Interferenzterm}} \right], \quad (9.1.40)$$

$$\langle\hat{A}\rangle_G = \frac{1}{2} [\langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle]. \quad (9.1.41)$$

Nur der reine Zustand weist einen Interferenzterm auf!

Anmerkung: Eine Rückdrehung in die x -Richtung,

$$\left. \begin{aligned} |\uparrow_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ |\downarrow_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle) \\ |\downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle - |\downarrow_x\rangle) \end{aligned} \right., \quad (9.1.42)$$

ergibt

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\uparrow_x|\hat{A}|\uparrow_x\rangle, \quad \text{also keine Interferenz!} \quad (9.1.43)$$

$$\langle\hat{A}\rangle_G = \frac{1}{2} \underbrace{[\langle\uparrow_x|\hat{A}|\uparrow_x\rangle + \langle\downarrow_x|\hat{A}|\downarrow_x\rangle]}_{\text{noch immer diagonal}}, \quad (9.1.44)$$

aber, z.B. für $\rho_G = p|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + (1-p)|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$, dass

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle_G &= p\langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + (1-p)\langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle\uparrow_x|\hat{A}|\uparrow_x\rangle + \langle\downarrow_x|\hat{A}|\downarrow_x\rangle + (2p-1)2\text{Re}\langle\uparrow_x|\hat{A}|\downarrow_x\rangle]. \end{aligned} \quad (9.1.45)$$

Der letzte Term beschreibt Interferenz, welche demnach Basis-abhängig ist. Die Eigenschaft der Gemischtheit ist dagegen nicht Basis-abhängig, auch wenn in (9.1.44) die gemischte Dichtematrix nur deswegen diagonal bleibt, weil sie $\propto \mathbb{1}$ ist!

9.1.2. Partielle Spur gekoppelter Systeme

Auf dem Weg zu einem klareren Bild von den Prozessen, welche die klassische Welt innerhalb der Quantenmechanik und der sie mit-definierenden unitären Zeitentwicklung hervorbringt, betrachten wir die Dichtematrix-Beschreibung gekoppelter Systeme und die partielle Spur als Mittel zur Reduktion auf ei-

9. Zustand und Messprozess

nes der Teilsysteme. Wir betrachten ein System aus zwei Teilsystemen mit Basen $\{|1n\rangle\}, \{|2m\rangle\}$, in einem reinen Zustand,

$$|\psi\rangle = \sum_{nm} c_{nm} |1n\rangle |2m\rangle, \quad (9.1.46)$$

$$\text{mit Normierung } 1 = \sum_{nm} |c_{nm}|^2. \quad (9.1.47)$$

Diesem entspricht die Dichtematrix

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{nm} \sum_{n'm'} c_{nm} c_{n'm'}^* |1n\rangle |2m\rangle \langle 1n'| \langle 2m'|. \quad (9.1.48)$$

In aller Regel ist ein Operator, welcher einer physikalischen Observable entspricht, in seiner Wirkung auf nur einen kleinen Teil des Systems eingeschränkt. Beispielsweise blenden wir bei der Messung des Aufenthaltsortes eines Teilchens, und oder dessen Geschwindigkeit, den allergrößten Teil der Umgebung, des Labors, der Stadt, der Erde, des restlichen Universums komplett aus. Außer, dass wir im Nachhinein den Fehler der Messung abschätzen, welcher aufgrund bestimmter Einflüsse der Umgebung zustandekommt, ist der genaue Zustand der Umgebung irrelevant. Wir messen die Observable, gegeben etwa durch den Operator $\hat{A}^{(1)}$, nur auf Subsystem 1,

$$\langle A^{(1)} \rangle = \text{Sp}_1 \text{Sp}_2 \hat{A}^{(1)} \rho = \text{Sp}_1 \left[(\text{Sp}_2 \rho) \hat{A}^{(1)} \right]. \quad (9.1.49)$$

Hier bezeichnet $\text{Sp}_i = \sum_n \langle in| \cdot |in\rangle$ die **partielle Spur** bezüglich des Untersystems i , und wir erhalten die

Reduzierte Dichtematrix,

$$\rho_1 = \text{Sp}_2 \rho = \sum_{m'} \sum_m c_{nm} c_{n'm'}^* |1n\rangle \langle 1n'|, \quad (9.1.50)$$

von Untersystem 1. Es folgt, dass

$$\rho_1^2 = \sum_{n'm'} \sum_{n''} \left(\sum_m c_{nm} c_{n''m}^* \right) \left(\sum_{m'} c_{n''m'} c_{n'm'}^* \right) |1n\rangle \langle 1n'|. \quad (9.1.51)$$

Im Allgemeinen ist also $\rho_1^2 \neq \rho_1$ außer wenn $c_{nm} = b_n d_m$, mit

$$\sum_n |b_n|^2 = 1, \quad \sum_n |d_n|^2 = 1, \quad (9.1.52)$$

sodass

$$|\psi\rangle = \left(\sum_n b_n |1n\rangle \right) \left(\sum_m d_m |2m\rangle \right) = |1\psi\rangle |2\phi\rangle \quad (9.1.53)$$

ein **Produkt aus reinen Zuständen** ist. Dann gilt

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |1\psi\rangle\langle 1\psi| \otimes |2\phi\rangle\langle 2\phi|, \quad (9.1.54)$$

und nach den Rechenregeln für das Tensorprodukt, dass $\rho^2 = \rho$.

Fazit: Obwohl $|\phi\rangle$ rein ist, stellt $\rho_1 = \text{Sp}_2 \rho$, die Dichtematrix nach partieller Spur über 2, ein **Gemisch** dar, es sei denn $|\psi\rangle$ ist ein Produkt reiner Zustände.

9.2. Der allgemeine Messvorgang

Erinnern wir uns zunächst an die sogenannte Standardinterpretation der Quantenmechanik, der wir bislang in dieser Vorlesung gefolgt sind: Diese postuliert, dass die Messung des Wertes “ a_n ” der Observablen \hat{A} zum Kollaps der Wellenfunktion auf den entsprechenden Eigenzustand führt,

$$|\psi\rangle = \sum_{n'} c'_n |n'\rangle \xrightarrow{\text{„Messung“}} |n\rangle. \quad (9.2.55)$$

Der Kollaps ist zufällig und charakterisiert den nichtdeterministischen Charakter der Quantenmechanik. Ein offensichtliches Problem dieser Sichtweise ist, dass nicht spezifiziert wird, was eine „Messung“ ausmacht. Es bleibt also die Frage, was die Messung genau ausmacht, d.h. wann genau oder warum kollabiert die Wellenfunktion - oder kollabiert sie womöglich gar nicht?

Die Messung wird im allgemeinen mit einem **klassischen** Apparat in Verbindung gebracht. Wir müssen uns nun fragen, was die Interferenz zum Verschwinden bringt.

Grundsätzlich sollte das kombinierte System aus Zustand und Messapparat im Rahmen der Quantenmechanik behandelt werden.

9.2.1. Von Neumanns Formulierung des Messvorgangs

Wir besprechen kurz John von Neumanns grundlegendes Konzept des Messvorgangs in einem System, ohne und mit Ankopplung an die Umgebung.¹ Dazu betrachten wir zunächst ein isoliertes mikroskopisches System S mit Hilbertraum \mathcal{H} . Das Ziel ist die Messung des Operators \hat{O}_S mit ONB $\{|s_n\rangle\}$.

Der Meßvorgang wird dann wie folgt charakterisiert.

- Das System S wird an einen Messapparat (Zeiger) \mathcal{A} mit Hilbertraum $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ gekoppelt.
- Die Zustände $\{|a_n\rangle\}$ beschreiben makroskopisch unterscheidbare Zeigerpositionen.
- Zur Zeit $t = 0$ sei das Gesamtsystem in dem Zustand

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a\rangle. \quad (9.2.56)$$

Mit der Schrödinger-Zeitentwicklung werden nach einer hinreichend langen Zeit $t \gg 0$ die möglichen Meßergebnissen mit den entsprechenden Zeigerpositionen korreliert, d.h.,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \underbrace{c_n |s_n\rangle |a_n\rangle}_{\text{„Verschränkung“}}. \quad (9.2.57)$$

Daraus erhalten wir die Dichtematrix $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, sowie die reduzierte Dichtematrix des Systems:

$$\rho_s(t) = \text{Sp}_a(t) = \sum_n |c_n|^2 |s_n\rangle \langle s_n|. \quad (9.2.58)$$

¹J. von Neumann, Math. Grundlagen der Quantenmechanik (Springer, Berlin, 1932), S. 222 ff. [60].

9. Zustand und Messprozess

Hier ging die Nicht-Überlappung der makroskopischen Zeigerstellungen ein, $\langle a_n | a_m \rangle \sim \delta_{nm}$.

- Falls man den Zeiger nicht abliest, entsteht somit ein Gemisch. (\rightarrow Schrödingers Katze²). Falls man andererseits z.B. a_n abliest, wird

$$\rho \rightarrow |s_n\rangle\langle s_n|, \quad (9.2.59)$$

und somit erhalten wir für die Wahrscheinlichkeit a_n zu messen: $|c_n|^2$. Dies wird auch als „Reduktion des Zustands“ (oder „Kollaps der Wellenfunktion“) bezeichnet.

Messung unter Kopplung an die Umgebung

Nun befinde sich die Umgebung im Zustand $|U\rangle$. Somit erhalten wir:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a\rangle |U\rangle \xrightarrow{t\text{-Entwicklung}} \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |u_n\rangle. \quad (9.2.60)$$

Dies entspricht dem „Nichtablesen von U “ (was in der Praxis immer der Fall ist, da die Umgebung dadurch definiert ist, dass man die Details ihres Zustandes nicht verfolgen kann!).

Daraus folgt wegen Nichtüberlappung der Umgebungszustände, $\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$:

$$\hat{\rho} = \sum_n |c_n|^2 |a_n\rangle |s_n\rangle\langle s_n| \langle a_n|, \quad (9.2.61)$$

d.h., ein gemischtes System aus S und A . Aber selbst wenn die Orthogonalität der Umgebungszustände nicht vollständig ist und nur näherungsweise Korrelationen zwischen Zeigerstellungen der Messapparatur und den quantenmechanischen Eigenzuständen der Observable entstehen, ist die entstandene Dichtematrix i.allg. eine gemischte. Eigentlich messen wir $\hat{O} = \hat{O}_{SA} \otimes 1_U$ an $S \oplus A \oplus U$. Die Messung von \hat{O} an $S \oplus A$ wird **effektiv** durch eine **reduzierte Dichtematrix** beschrieben:

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Sp}_{SA} (\hat{\rho}_{SA} \hat{O}_{SA}), \quad (9.2.62)$$

$$\text{mit der reduzierten Dichtematrix } \hat{\rho}_{SA} = \text{Sp}_U \hat{\rho}. \quad (9.2.63)$$

„For all practical purposes“ (FAPP; J. S. Bell [62, 63]) wird die Messung durch $\hat{\rho}_{SA}$ beschrieben. Wesentlich ist dabei die Annahme

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (9.2.64)$$

welche jedoch nicht zwingend so erfüllt sein muss.

Das hier skizzierte Verständnis des Messvorgangs beruht also auf der Annahme, dass während der Messung aus einem reinen Zustand von System, Messapparat und Umgebung ein gemischtes System entsteht, in dem die Interferenzterme zwischen den „nicht zusammengehörigen“ Zuständen von System und Messapparat effektiv verschwinden. Dies kann nur „effektiv“ geschehen, da die exakte Dichtematrix der gekoppelten Systeme nach der unitären Zeitentwicklung mit der Schrödingergleichung des Gesamtsystems nicht gemischt sein kann, wenn sie anfangs rein war. Eine unitäre Entwicklung läßt einen reinen Zustand rein bleiben. Es ist also irgendwie zu erklären, warum die Interferenzterme zumindest annähernd verschwinden. Diesen Prozeß bezeichnet man als *Dekohärenz*, mit der sich der nachfolgende Abschnitt noch kurz beschäftigt.

²E. Schrödinger (1935) [61]. Das Gedankenexperiment schafft kein Paradoxon! Nach den Überlegungen hier ist die Miez *nicht* in einer Superposition von tot und lebendig, sondern der gesamte Zustand der ungeöffneten Box allenfalls ein Gemisch.

9.2.2. Dekohärenz

Die Entwicklung der Dekohärenztheorie fand verstärkt seit Beginn der 1980er Jahre statt.³ In ihrem Kontext entstand eine Reihe von Arbeiten, in welchen die Gründe für das Verschwinden der Interferenzterme für bestimmte Observable genauer diskutiert sind. Die Dekohärenztheorie charakterisiert die Ursachen dafür, dass die im vorangegangenen Abschnitt skizzierte Zeitentwicklung von einem gekoppelten Zustand von System S und Apparat A /Umgebung U zu einem gemischten Ensemble führt. Die Ankopplung von SA an U ist generisch, so dass nach **sehr kurzer** Zeit näherungsweise

$$\langle u_m | u_n \rangle(t) \xrightarrow{t_D} \delta_{mn} \quad (9.2.65)$$

erreicht ist, d.h., die Nebendiagonalelemente praktisch Null sind,

$$\hat{\rho}_{SA} \xrightarrow{t_D} \rho_{SA}^D \cong \sum_n |c_n|^2 |s_n\rangle \langle a_n| \langle a_n| \langle s_n|. \quad (9.2.66)$$

Die nichtdiagonalen Einträge klingen umso schneller exponentiell in t ab, je

1. größer die Zahl der angekoppelten Freiheitsgrade ist,
2. stärker die physikalische Ankopplung ist.

Damit ist **effektiv** (FAPP) die Interferenzfähigkeit verloren. Für diesen Prozeß hat sich der Begriff der *Dekohärenz* eingebürgert.

Dekohärenz ist allgegenwärtig und nur durch perfekte Isolation zu vermeiden. **Eine** einzelne Beobachtung (welche eine An-/Auskopplung von Photonen beinhaltet!) reicht aus, um Interferenzfähigkeit zu unterdrücken. Bei der Messung können wir nicht die ganze Umgebung kontrollieren, und einmal durch's Fenster entwichene Photonen werden wir nicht wieder einfangen können.

Wichtig ist es hierbei jedoch zu berücksichtigen, dass während des Dekohärenzprozesses **kein Kollaps** der Wellenfunktion stattfindet! Das bedeutet, das gekoppelte „ SAU “ bleibt in einem reinen Zustand der Superposition verschiedener Zustände, wenn es anfangs in einer solchen war!

Insbesondere bleibt die

Von Neumann-Entropie [60],

$$S_{vN} = -\text{Sp}(\rho \ln \rho), \quad (9.2.67)$$

welche die intrinsisch fehlende Information mißt, aufgrund der Unitarität der Zeitentwicklung des Gesamtsystems strikt erhalten. Wir erwähnen hier kurz, dass die von Neumann-Entropie das Konzept der *Gibbs Entropie* der klassischen statistischen Mechanik auf die Quantenstatistik erweitert. Schreibt man die von Neumann-Entropie in der Basis der Eigenzustände der Dichtematrix,

$$\rho = \sum_i \eta_i |\eta_i\rangle \langle \eta_i|, \quad (9.2.68)$$

so nimmt sie die Form der informationstheoretischen *Shannon-Entropie* an [68, 69]. Die von Neumann-Entropie findet auch in von ihr abgeleiteten Formen Anwendung in der Quanteninformationstheorie,

³Siehe z.B. and H. D. Zeh, *The emergence of classical properties through interaction with the environment* [64]; W. Zurek, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical* [65]; E. Joos et al., *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, Berlin, 2003 [66]; W. Zurek, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical – Revisited* [67].

9. Zustand und Messprozess

u.a. in der *bedingten Entropie*, der *relativen Entropie*, oder der *Renyi-Entropie* [70].

Die Wechselwirkung eines Systems mit seiner *Umgebung* ist in aller Regel von der Wirkung ortslokaler Wechselwirkungspotentiale und Kräfte geprägt, welche dazu führen das "bevorzugte" Quantenzustände, sogenannte *Pointer States* [71], eine diagonale Dichtematrix bilden, d.h., keine wohldefinierten Phasenrelationen verbleiben, welche die Nichtdiagonalelemente der Dichtematrix charakterisieren [72]. Vielmehr mitteln sich diese Nebendiagonalelemente aufgrund der Dekohärenz weg und es verbleiben gemischte Ensembles. Bereits vor der eigentlichen Messung führt also die Wechselwirkung zwischen System und Meßapparat sowie Umgebung dazu, dass das Experiment in einem der Zustände ist, welcher je einem Meßergebnis und der zugehörigen Zeigerposition entspricht. Der Beitrag von der Superposition der beiden möglichen Eigenzustände der Observable wird dagegen extrem schnell vernachlässigbar. Zustände, für welche diese Art Dekohärenz gilt, werden als Pointer-States bezeichnet und entsprechen in gewissem Sinne den Ergebnissen einer klassischen Messung.

Vielfach untersucht ist darüberhinaus die Frage, ob dieses Verständnis der **Dekohärenz das Messproblem löst**. Einwände dagegen lauten:

- Betrachtet man ein endliches System, für große aber endliche Zeiten, so ist

$$\rho_{SA} \rightarrow \rho_{SA}^D \quad \text{nur für } t \rightarrow \infty \quad (9.2.69)$$

erreicht. Das bedeutet, dass die Interferenzfähigkeit für $t < \infty$ endlich bleibt, also **nicht** strikt gleich Null ist.

- Selbst wenn

$$\rho_{SA}^D = \sum_i |c_n|^2 \rho_i, \quad (9.2.70)$$

$$\rho_i = |s_i\rangle\langle a_i| \langle a_i| \langle s_i|, \quad (9.2.71)$$

diagonal ist, wird nur ein $|s_j\rangle\langle a_j|$ beobachtet! Was passiert mit den übrigen „Zweigen“ („branches“) der Wellenfunktion? Diese Frage bleibt in der Dekohärenztheorie unbeantwortet!

Diese grundlegende Problematik der Theorie der Messung ist bis heute nicht zufriedenstellend gelöst bzw. entsprechende Lösungsversuche nicht empirisch widerlegt.

Alternative Erklärungsversuche sind insbesondere:

- **Vielweltentheorie** („Many Worlds Hypothesis“, urspr. „Relative-state formulation“, von Hugh Everett III, 1957 [73], s.a. [74, 75].)

Dieser Ansatz geht davon aus, dass kein Kollaps der Wellenfunktion geschieht.

Alle Zweige $|s_n\rangle\langle a_n|$ sind tatsächlich realisiert – in verschiedenen Welten.

Eine ständige Verzweigung der Gesamtwellenfunktion geschieht, der Kollaps ist eine Illusion.

- **Dynamische Kollapstheorie** (G. Ghirardi et al. , u.a. [76, 77])

Sie beruht auf einer nichtlinearen Erweiterung der Schrödingergleichung.

- **Bohmsche Mechanik (DeBroglie-Bohm)** („Hidden-Variables“ Theorie, J. Bohm, 1952 [78, 79], s. auch [80, 81].)

Die Wellenfunktion wird als Führungsfeld für konkrete Teilchentrajektorien aufgefaßt.

Die Nichtlokalität der Quantenmechanik (s. Abschnitt 9.3) ist in ihr berücksichtigt.

Ultrakurzzusammenfassung

- Quantenmechanik „funktioniert“ unwidersprochen → „shut up and calculate“-Philosophie vieler Praktiker.
- Das Messproblem ist theoretischer Natur, aber es besteht nach wie vor. (→ s.a. verstärkte moderne Versuche, Thermalisierung im Rahmen der Quantenmechanik zu verstehen.)
- Alternative Ansätze existieren, welche empirisch äquivalent zur Standardformulierung sind.

9.3. EPR-Argument und Bellsche Ungleichung

Der nichtdeterministische Charakter der Quantenmechanik ist der klassischen Auffassung von Dingen und wahren Aussagen fremd, siehe Kapitel 1.1.

Als bekannte Zitate kommen uns in den Sinn:

- „Gott würfelt nicht.“ (A. Einstein, [82])
- „Ist der Mond erst da, wenn man hinschaut?“ (Einstein zugeschriebenes Bonmot anlässlich einer Debatte mit Niels Bohr)
- „Wenn es bei der verdammten Quantenspringerei bleiben sollte, so bedaure ich, mich mit der Quantenmechanik überhaupt beschäftigt zu haben.“ (E. Schrödinger [83])

Es hat immer wieder Versuche gegeben, die Quantentheorie durch eine statistische Theorie zu ersetzen.

Einer der prominentesten Ansätze beinhaltet die Annahme, dass es **verborgene Parameter** gibt, durch die letztlich für jedes Objekt **alle Observablen tatsächlich festgelegt sind**. Diese „hidden variables“ seien dabei prinzipiell dem Beobachter unzugänglich. Der Wahrscheinlichkeitscharakter der Quantenmechanik wäre dann analog zu dem der klassischen statistischen Mechanik, wo auch im Prinzip alle Phasenraumtrajektorien als festgelegt vorstellbar sind.

Beispiel: Spin- $\frac{1}{2}$ - Zustand, Eigenzustand zu \hat{S}_x :

$$S_x |\uparrow_x\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow_x\rangle. \quad (9.3.72)$$

In S_z -Eigenbasis: $|\uparrow_x\rangle = 1/\sqrt{2}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$. Daraus folgt, dass man nach der Quantenmechanik für $N \rightarrow \infty$ Messungen von S_z an $|\uparrow_x\rangle$ zu

$$\begin{array}{ll} 50\% & \text{den Eigenwert } \frac{\hbar}{2}, \\ 50\% & \text{den Eigenwert } -\frac{\hbar}{2} \end{array}$$

erhält. Nach der Hidden-Variables-Vorstellung wäre für jedes Teilchen durch einen verborgenen Parameter festgelegt, ob $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ resultiert. Zu je 50 % würden die verborgenen Parameter diese Werte vorgeben.

9.3.1. Einstein-Podolsky-Rosen-Argument und Nichtlokalität

Einstein bemühte sich in einer Reihe von Gedankenexperimenten, die Unvollständigkeit der quantenmechanischen Beschreibung nachzuweisen. Jedes dieser Argumente konnte letztlich widerlegt werden. Eine zentrale Rolle in der Diskussion über verborgene Parameter gewann dabei ein Argument, ursprünglich von Einstein, Podolsky und Rosen (EPR)⁴, dessen Neuformulierung durch David Bohm⁵ im Folgenden kurz besprochen werden soll.

Man betrachte zwei von einer lokalen Quelle emittierte Spin 1/2-Zustände in Singulett-Kombination,

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2), \quad (9.3.73)$$

welche sich in entgegengesetzte Richtungen voneinander weg bewegen. Nach langer Laufzeit befinden sich die beiden Spins in entsprechend großem Abstand, während ihr gemeinsamer Zustand bei ansonsten anhaltender, völliger Isolation von ihrer Umgebung dieselbe Korrelation wie zu Anfang aufweist, der Spin-Anteil also immer noch durch das Spin-Singulett (9.3.73) beschrieben ist. Eine sequentielle Messung, zunächst von Spin 1, danach Spin 2 ergibt zwei mögliche Resultate:

- (i) Messung von $+\frac{\hbar}{2}$ an 1 \Rightarrow Danach ist $-\frac{\hbar}{2}$ zu 100 % das Ergebnis einer Messung an 2.
- (ii) Messung von $-\frac{\hbar}{2}$ an 1 \Rightarrow Danach ist $+\frac{\hbar}{2}$ zu 100 % das Ergebnis einer Messung an 2.

Daraus folgt die **Nichtlokalität des Kollaps der Wellenfunktion**:

Das Experiment an 1 beeinflusst die Wahrscheinlichkeiten des Ausgangs an einem nachfolgenden Experiment an 2.

- Nichtlokalität ist die Folge der Existenz korrelierter Mehrteilchenzustände wie $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ und deren Superponierbarkeit.
- Es entsteht daraus kein Widerspruch zur Relativitätstheorie, auch wenn die beiden Messereignisse raumartigen Abstand haben. Die Information, dass nach Messung von $\pm\hbar/2$ an 1 mit 100% Wahrscheinlichkeit bei 2 $\mp\hbar/2$ gemessen wird, liegt im selben Augenblick nur lokal bei 1 vor! Bei 2 bleibt lokal für jedes ankommende Teilchen eines Pairs die Wahrscheinlichkeit 50% „up“ oder „down“ zu messen.

Eine Überprüfung der faktischen Existenz der Korrelation erfordert nachträgliche, kausale Übermittlung der Messergebnisse bei 2, die maximal mit Lichtgeschwindigkeit erfolgen kann. Weiterhin ist für die Korrelation der Meßergebnisse auch irrelevant, ob die Messung an 2 nach der an 1 erfolgt oder umgekehrt. Innerhalb des raumartigen Bereichs außerhalb der Lichtkegel, welche von den zwei Messungen ausgehen ist die zeitliche Abfolge ohnehin eine Frage der relativen Bewegung der Bezugssysteme der beiden Meßapparate, und das Ergebnis sollte von der Wahl dieses Systems nicht abhängen. Eine Messung, welche an 2 nach der an 1 erfolgt, wenn Beobachter*in 2 und 1 relativ zueinander in Ruhe sind, kann in 1 nach der an 2 erfolgen, indem deren relative Geschwindigkeit hinreichend groß gewählt wird. (Hier nehmen wir an, dass das Spin-Singulett überall im Raum vorliegt – in der Regel wird es selbst der Kinematik der Bewegung der Teilchen unterworfen sein, welche ebenso ein Bezugssystem definieren, in dem ihr totaler vektorieller Impuls gleich Null ist.)

⁴A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935) [84].

⁵D. Bohm, Y. Aharonov, Phys. Rev. **108**, 1070 (1957) [85].

Einstein, Podolsky und Rosen haben die folgende Argumentation unter der Annahme der Existenz verborgener Parameter vorgebracht. In ihrer Version betrachteten Sie 2 identische, bei $x = 0$ erzeugte Teilchen mit Impulsen p und $-p$, beschrieben etwa als Gaußsche Wellenpakete $\psi_p(x)$. Dann lautet der Zustand des kohärent ausgesandten Paares:

$$\psi(x_1, x_2, t) = \psi_p(x_1 - x(t))\psi_{-p}(x_2 + x(t)) + \alpha(x_1 \leftrightarrow x_2), \quad (9.3.74)$$

wobei $\alpha = e^{i\varphi(t)}$ als Phase aus der Zeitentwicklung resultiert. In diesem Zustand ist der Impuls mit dem Ort **verschränkt**: Wenn das Teilchen 2 bei $x(t)$ ist, ist 1 bei $-x(t)$ bzw. umgekehrt. Das heißt, die beiden Teilchen sind nie beide bei $x(t)$ oder $-x(t)$.

Nach Schrödinger⁶ spricht man allgemein von der „**Verschränkung**“ (E. Schrödinger) von Zuständen, welche Superpositionen von Produktzuständen entsprechen, die sich nicht in ein einzelnes Produkt von Zuständen transformieren lassen. Ein Gegenbeispiel dafür, ein nicht verschränkter Produktzustand ist:

$$\frac{1}{2}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle). \quad (9.3.75)$$

Verschränkte Zustände („entangled states“) spielen eine wichtige Rolle in der Quanteninformatiktheorie (u.a. für Quanten-Kryptographie, -Teleportation, -Computer), wobei Verschränkung im allgemeinen erst nützlich wird, wenn die Subsysteme, deren Zustände multipliziert werden, **räumlich getrennt** sind. Ein verschränkter Spinsingulett-Zustand $|0, 0\rangle$ kann beispielsweise mikroskopisch vorliegen und hat dort nicht die gleiche Bedeutung wie in einem raumartig getrennten EPR-Paar:

Elektronenwellenfunktion		EPR-Paar
z.B. im Heliumatom	\longleftrightarrow	(raumartige Entfernung von
(lokal gem. Ortswellenfunktion getrennt)		besonderem Interesse)

→ Bei großer räumlicher Trennung wird **Dekohärenz** zum Hauptproblem.

Zurück zu EPR und Hidden Variables: Wegen der Prinzipien der speziellen Relativitätstheorie kann die Messung an 1 das System bei 2 nicht beeinflussen bzw. umgekehrt, die Messresultate müssen also zuvor feststanden haben. Diese Sichtweise neigt die inhärente Nichtlokalität der Quantenmechanik.

9.3.2. Bellsche Ungleichung

Die Bellsche Ungleichung erlaubt eine experimentelle Falsifikation der Annahme **lokaler verborgener Parameter** zugunsten der quantenmechanischen Beschreibung oder zumindest einer nicht lokalen Formulierung. Wir betrachten hierzu ein Korrelationsexperiment. P_1 und P_2 sind Polarisatoren, wobei P_1 in α -Richtung polarisiert und P_2 in β -Richtung. P_1 und P_2 lassen Teilchen nur passieren, wenn deren Spin in \hat{n}_β bzw. \hat{n}_α -Richtung den Wert $\hbar/2$ haben. Ebenso sprechen die Detektoren bei Spin $\hbar/2$ (positiv) an. Wir messen die folgende Korrelationsfunktion:

$$N(\alpha; \beta) = \langle 0, 0 | \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \hat{n}_\alpha) \frac{1}{2}(1 + \sigma_2 \cdot \hat{n}_\beta) | 0, 0 \rangle \quad (9.3.76)$$

$$= \langle 0, 0 | \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \hat{n}_\alpha) \frac{1}{2}(1 - \sigma_1 \cdot \hat{n}_\beta) | 0, 0 \rangle \quad (9.3.77)$$

$$= \frac{1}{4}(1 - \hat{n}_\alpha \cdot \hat{n}_\beta), \quad (9.3.78)$$

⁶E. Schrödinger, „Die gegenwärtige Situation der Quantenmechanik“ (1935), in Baumann, Sexpl, „Die Deutungen der Quantentheorie“ (Vieweg, Wiesbaden, 1984) [86].

9. Zustand und Messprozess

wegen

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\sigma_i \cdot \sigma_j) a_i b_j \quad (9.3.79)$$

$$= \frac{1}{2} ([\sigma_i, \sigma_j] + \{\sigma_i, \sigma_j\}) a_i b_j \quad (9.3.80)$$

$$= \frac{1}{2} (2i\epsilon_{ijk}\sigma_k + 2\delta_{ij}) \quad (9.3.81)$$

$$= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}), \quad (9.3.82)$$

sowie

$$\langle 0, 0 | \boldsymbol{\sigma} | 0, 0 \rangle = 0, \quad (9.3.83)$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{x,y} |0, 0\rangle &\propto |\uparrow\uparrow\rangle \mp |\downarrow\downarrow\rangle = |1, 1\rangle \mp |1, -1\rangle \\ \sigma_z |0, 0\rangle &\propto |\uparrow\downarrow\rangle \mp |\downarrow\uparrow\rangle = |1, 0\rangle \end{aligned} \right\} \langle 0, 0 | 1, m \rangle \equiv 0.$$

Daraus folgt, dass weiterhin wegen $\hat{n}_\alpha \cdot \hat{n}_\beta = \cos(\alpha - \beta)$:

$$N(\alpha; \beta) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (9.3.84)$$

Wir nehmen nun verborgene Parameter lokal an. Dann ist

$$N(\alpha; \beta) = N(\alpha\gamma; \beta) + N(\alpha; \beta\gamma), \quad (9.3.85)$$

worin die Funktionen $N(\delta_1, \delta_2, \dots; \epsilon_1, \epsilon_2, \dots)$ die Teilchenpaar zählen, in denen Teilchen 1 mit positivem Spin Polarisatoren in Richtung der Winkel $\delta_1, \delta_2, \dots$ passiert und Teilchen 2 mit positivem Spin Polarisatoren in $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ Ausrichtung. Entsprechend heißt dies für die Spinausrichtung von Teilchen 1 alleine:

$$N(\alpha; \beta) = \# \text{ Teilchenpaare, bei } \begin{array}{l} \alpha \text{ positivem} \\ \text{und bei } \beta \text{ negativem} \end{array} \text{ Spin,}$$

$$N(\alpha\gamma; \beta) = \# \text{ Teilchenpaare mit } \begin{array}{l} \text{positivem Spin bei } \alpha, \gamma \\ \text{negativem Spin bei } \beta \end{array},$$

$$N(\alpha; \beta\gamma) = \# \text{ Teilchenpaare mit } \begin{array}{l} \text{positivem Spin bei } \alpha \\ \text{negativem Spin bei } \beta, \gamma \end{array}.$$

All diese Angaben müssen in verborgenen Parametern enthalten sein. Es gilt weiterhin, dass

$$N(\alpha\gamma; \beta) \leq N(\gamma; \beta), \quad (9.3.86)$$

da $N(\gamma; \beta) = N(\alpha\gamma; \beta) + N(\gamma; \beta\alpha)$ und keine der Größen kleiner Null ist, sowie

$$N(\alpha; \gamma\beta) \leq N(\alpha; \gamma). \quad (9.3.87)$$

Damit folgt aus (9.3.85) die

Bellsche Ungleichung

$$N(\alpha; \beta) \leq N(\alpha; \gamma) + N(\gamma; \beta), \quad (9.3.88)$$

bzw. eine Variante derselben, welche in unterschiedlicher Weise formuliert werden kann. Diese Unglei-

chung lässt sich experimentell überprüfen:

Experimentell werden die Spin-Korrelatoren

$$P(\alpha; \beta) = \langle 0, 0 | \sigma_1 \cdot \hat{n}_\alpha \sigma_2 \cdot \hat{n}_\beta | 0, 0 \rangle \quad (9.3.89)$$

gemessen, welche laut Quantenmechanik nur vom Winkel zwischen den Vektoren abhängen,

$$\begin{aligned} &= 4N(\alpha; \beta) - 1 = -\hat{n}_\alpha \cdot \hat{n}_\beta \\ &= -\cos(\alpha - \beta) . \end{aligned} \quad (9.3.90)$$

gemessen, für welche die Bellsche Ungleichung wie folgt lautet:

$$P(\alpha; \beta) - 1 \leq P(\alpha; \gamma) + P(\gamma; \beta) \quad (9.3.91)$$

Wir bestimmen beide Seiten dieser Ungleichung für die Winkelkombination $(\alpha, \beta, \gamma) = (0, \pi/2, \pi/4)$, für welche laut der Quantenmechanik (9.3.90) gilt, mit $\cos(\pi/2) - 1 = -1$, $\cos(\pm\pi/4) = 1/\sqrt{2}$, also, laut (9.3.91): $-1 \leq -\sqrt{2}$. Die Quantenmechanik verletzt also die Bellsche Ungleichung manifest. Ebenso zeigten die empirischen Beobachtungen im Experiment von Laméhi-Rachti und Wittig (1976)⁷, dass die Bellsche Ungleichung (dort in einer anderen Version als der obigen) durch die Beobachtungen verletzt ist. Dieses Experiment, wie auch viele danach, widerlegten damit die Existenz lokaler verborgener Variable zugunsten der Vorhersagen der Quantenmechanik!

Spätere Experimente

wurden insbesondere von Alain Aspect et al. mit Hilfe der Photonenpolarisation durchgeführt, siehe insbesondere

- Phys. Rev. Lett. **47**, 460 (1981) [88]; **49**, 91 [89], und 1804 [90] (1982).
- Aufsatz in „Quantum (Un-)Speakables – From Bell to Quantum Information“, ed. by R.A. Bertlmann & A. Zeilinger (Springer, Heidelberg, 2002) [91].

Noch immer sind solche Experimente jedoch nicht völlig frei von systematischen Fehlern, die alle „Löcher schließen lassen“. Siehe z.B. M.A. Rowe et al., Nature **409**, 291(2001) [92], I. Gerhardt et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 170404 (2011) [93], welche insbesondere sogen. „**Loopholes**“ in Experimenten untersuchen, welche Verletzungen der Bellschen Ungleichungen detektieren.

⁷M. Laméhi-Rachti, W. Mittig, Phys. Rev. D **14**, 2543 (1976) [87].

A. Funktionale Ableitungen und Integrale

Um Pfadintegrale berechnen und sie zur Ableitung von Momenten, d.h. Korrelationsfunktionen der Freiheitsgrade, die in die Wirkung eingehen, verwenden können, wollen wir ein wenig unseren Werkzeugkasten mit mathematischen Elementen der Funktionalanalysis vorbereiten.

A.1. Funktionalableitungen

Die Funktionalableitung kann als eine Erweiterung der gewöhnlichen Ableitung von Funktionen auf Funktionale beschrieben werden, d.h. auf Abbildungen von Funktionen auf \mathbb{C} -Zahlen. Im Folgenden betrachten wir üblicherweise Funktionen, die Punkte im Raum und in der Zeit auf N -dimensionale Vektoren oder, im Fall $N = 1$, auf Skalare abbilden.

Terminologie:

- Funktionenraum = ∞ -dimensionaler Raum von Funktionen, z.B. auf Raum-Zeit:

$$f : \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{C}^N : (\mathbf{x}, t) \rightarrow f_i(\mathbf{x}, t)$$

- Funktional = Abbildung von $f \in \mathcal{A}$ auf \mathbb{C} :

$$F : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C} : f \rightarrow F[f].$$

Beispiel. Ein bestimmtes Integral über eine Funktion f ist ein Funktional, z.B. über alle x :

$$F[f] = \int dx f(x). \quad (\text{A.1.1})$$

Beachten Sie, dass Argumente von Funktionalen – d.h. Funktionen – typischerweise in eckigen Klammern angegeben werden.

Definition: Die Funktionalableitung von F bezüglich $f(x)$, ausgewertet an der Stelle x , ist definiert als

$$\frac{\delta F[f(z)]}{\delta f(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(z) + \epsilon \delta(x-z)] - F[f(z)]}{\epsilon}. \quad (\text{A.1.2})$$

Hier ist z ein beliebiges Argument von f , das innerhalb des Funktionals F integriert wird, wie es z.B. in (A.1.1) der Fall ist, während x ein festes Argument der Funktion f darstellt, bezüglich dessen die Ableitung genommen wird. In seiner Struktur der Freiheitsgrade ist dies die Version mit kontinuierlichem Argument (Index) der Ableitung einer skalaren Funktion F , die auf einem Vektorraum bezüglich eines gegebenen Elements eines Vektors $f(x)$ in diesem Raum ausgewertet wird. So stellt x den Vektorindex dar – im Fall, dass dieser Index diskret ist, würden alle Dirac-Distributionen durch Kronecker-Deltas ersetzt.

Wir wenden diese Ableitung auf das folgende spezielle Funktional an:

$$F_y[f] = \int f(z) \delta(z-y) dz = f(y) . \quad (\text{A.1.3})$$

Daraus ergibt sich sofort eine Beziehung, die wir oft benötigen werden:

$$\frac{\delta f(y)}{\delta f(x)} = \delta(x-y) = \frac{\delta f(x)}{\delta f(y)} . \quad (\text{A.1.4})$$

Das Hamilton'sche Prinzip (7.0.1) impliziert, dass die Ableitung (7.1.36) verschwindet, was der Bewegungsgleichung entspricht.

A.2. Funktionale Taylor-Entwicklung

Unter Verwendung der Ableitung eines Funktionals können wir das Konzept der Taylor-Reihenentwicklung auf Funktionale übertragen. Durch Variation der Funktion f_i um δf_i ergibt sich die Variation des Funktionals,

$$\begin{aligned} F[\{f_i + \delta F_i\}] &= F[\{f_i\}] + \sum_i \int dz \frac{\delta F}{\delta f_i(z)} \delta f_i(z) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int dz_1 dz_2 \delta f_i(z_1) \frac{\delta^2 F}{\delta f_i(z_1) \delta f_j(z_2)} \delta f_j(z_2) + \mathcal{O}(\delta f^3) . \end{aligned} \quad (\text{A.2.5})$$

Dies verallgemeinert die Taylor-Entwicklung in N Dimensionen auf kontinuierliche Funktionen.

A.3. Funktionalintegrale

In ähnlicher Weise verallgemeinern Funktionalintegrale die Integration auf Funktionale. Sie sind Integrale von Funktionalen über Funktionenräume und können als solche nicht immer wohldefiniert sein. Eine präzisere mathematische Definition von Funktionalintegralen können wir hier in der Kürze nicht geben. Im Folgenden werden wir im Wesentlichen auf die oben gegebene Formulierung im Kontext der Einführung in Pfadintegrale zurückgreifen. $\mathcal{D}f$ stellt das Maß des Funktionalintegrals über die Funktionen f dar. In der Praxis kommen zwei typische Arten von Funktionalintegralen oft vor, die wir hier kurz besprechen:

(a) Integrale über Funktionale Dirac-Verteilungen

$$\int \mathcal{D}f \delta[f - \varphi] = 1 , \quad (\text{A.3.6})$$

wobei

$$\begin{aligned} \mathcal{D}f &= \prod_z df(z) , \\ \delta[f - \varphi] &= \prod_z \delta(f(z) - \varphi(z)) . \end{aligned} \quad (\text{A.3.7})$$

und die Produkte den Raum abdecken, auf dem f definiert ist. Daraus folgt, dass

$$\int \mathcal{D}f F[f] \delta[f - \varphi] = F[\varphi] . \quad (\text{A.3.8})$$

A. Funktionale Ableitungen und Integrale

(b) Gaußsche Integrale, der Form

$$\int \mathcal{D}f \exp\{-F[f]\}, \quad (\text{A.3.9a})$$

$$F[f] = \int dz [f(z)]^2. \quad (\text{A.3.9b})$$

Da die Exponentialfunktion faktorisiert, erhält man mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-at^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a \in \mathbb{C}, \quad (\text{A.3.10})$$

dass

$$\int \mathcal{D}f \exp\left\{-\int dz f^2(z)\right\} = \prod_z \sqrt{\pi}, \quad (\text{A.3.11})$$

was eine divergierende Konstante ist. Folgende Gaußsche Integrale mit z -abhängigen "Breiten" werde häufig gebraucht,

$$\int \mathcal{D}f \exp\left\{-\int dz g(z) f^2(z)\right\} = \prod_z \sqrt{\frac{\pi}{g(z)}}, \quad (\text{A.3.12})$$

sowie Integrale des allgemeinen Gaußschen Typs,

$$\mathcal{F} = \int \mathcal{D}f \exp\left\{-\int dx dy f(x) g(x,y) f(y)\right\}, \quad (\text{A.3.13})$$

wobei $g(x,y)$ mittels einer unitären Transformation $u(x,y)$ diagonalisiert werden kann,

$$g(x,y) = \int dz dz' u^\dagger(x,z) \bar{g}(z,z') u(z',y), \quad (\text{A.3.14})$$

mit

$$\bar{g}(z,z') = \lambda(z) \delta(z-z'). \quad (\text{A.3.15})$$

$\lambda(z)$ sind die Eigenwerte von g , und

$$\delta(x-y) = \int dz u^\dagger(x,z) u(z,y). \quad (\text{A.3.16})$$

Das Einsetzen von (A.3.14) in den Exponenten von (A.3.13) ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \int \left[\prod_z d\bar{f}(z) \right] \exp\left\{-\int_{xy} \bar{f}(x) \bar{g}(x,y) \bar{f}(y)\right\} \\ &= \prod_z \left\{ \int d\bar{f}_z \exp\{-\lambda(z) \bar{f}(z)^2\} \right\} \\ &= \prod_z \sqrt{\frac{\pi}{\lambda(z)}} = \left[\det\left\{\left(\frac{g}{\pi}\right)\right\} \right]^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (\text{A.3.17})$$

wobei $\bar{f}(x) = \int_z u(x, z) f(z)$, und $|\det u| = 1$ in der Jacobi-Determinante verwendet wurde,

$$\left| \frac{\delta \bar{f}(x)}{\delta F(y)} \right| = |\det\{u\}| = 1. \quad (\text{A.3.18})$$

Bibliographie

- [1] F. Schwabl, [Quantenmechanik \(QM I\): Eine Einführung](#), Springer-Lehrbuch, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [2] L. V. de Broglie, Waves and Quanta, *Nature* **112**, 540–540 (1923).
- [3] C. Davisson and L. H. Germer, [Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel](#), *Phys. Rev.* **30**, 705–740 (1927).
- [4] G. P. Thomson, [Über die Streuung von Kanalstrahlen durch Wasserstoff](#), *Zeitschrift für Physik* **46**, 93–105 (1927).
- [5] M. Koecher, [Lineare Algebra und analytische Geometrie](#), Springer Lehrbuch, Springer, Berlin Heidelberg, 1997.
- [6] G. Baym, [Lectures On Quantum Mechanics \(1st ed.\)](#), CRC Press, Boca Raton, 1969.
- [7] J. D. Jackson, [Classical Electrodynamics](#), Wiley, 2021.
- [8] F. Gieres, [Dirac’s formalism and mathematical surprises in quantum mechanics](#), *Rept. Prog. Phys.* **63**, 1893 (2000).
- [9] M. G. Raymer, [Uncertainty principle for joint measurement of noncommuting variables](#), *American Journal of Physics* **62**, 986–993 (1994).
- [10] H. Weyl, [Quantenmechanik und Gruppentheorie](#), *Zeitschrift für Physik* **46**, 1–46 (1927).
- [11] H. Groenewold, [On the principles of elementary quantum mechanics](#), *Physica* **12**, 405 – 460 (1946).
- [12] J. E. Moyal, [Quantum mechanics as a statistical theory](#), *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **45**, 99–124 (1949).
- [13] V. F. Müller, [Quantenmechanik](#), Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München Wien, 2000.
- [14] J. Jauch, [Foundations of Quantum Mechanics](#), A-W series in advanced physics, Addison-Wesley Publishing Company, 1968.
- [15] W. Pauli, [Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik](#), pages 83–272, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1933.
- [16] R. Weder and V. S. Olkhovsky, [Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy, and Foundations of Self-Consistent Time Analysis of Quantum Processes](#), *Advances in Mathematical Physics* **2009**, 859710 (2009).
- [17] K. Bostroem, [Quantizing Time](#), arXiv e-prints , quant-ph/0301049 (2003).
- [18] K. J. Bostroem, [Basic Concepts for a Quantum Mechanical Theory of Events](#), arXiv e-prints , quant-ph/0411175 (2004).

- [19] E. Schrödinger, [Quantisierung als Eigenwertproblem](#), *Annalen der Physik* **384**, 361–376 (1926).
- [20] E. Schrödinger, [Quantisierung als Eigenwertproblem](#), *Annalen der Physik* **384**, 489–527 (1926).
- [21] E. Schrödinger, [Quantisierung als Eigenwertproblem](#), *Annalen der Physik* **385**, 437–490 (1926).
- [22] E. Schrödinger, [Quantisierung als Eigenwertproblem](#), *Annalen der Physik* **386**, 109–139 (1926).
- [23] E. Noether, [Invarianten beliebiger Differentialausdrücke.](#), *Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl.* **1918**, 37–44 (1918).
- [24] E. Noether, [Invariant variational problems](#), *Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl.* **1918**, 235–257 (1918).
- [25] H. Goldstein, [Prehistory of the “Runge-Lenz” vector](#), *American Journal of Physics* **43**, 737–738 (1975).
- [26] H. Goldstein, [More on the prehistory of the Laplace or Runge-Lenz vector](#), *American Journal of Physics* **44**, 1123–1124 (1976).
- [27] W. Gerlach and O. Stern, [Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld](#), *Zeitschrift für Physik* **9**, 349–352 (1922).
- [28] W. Gentner, [Gedenkworte für Walter Gerlach](#), *Reden und Gedenkworte, Orden pour le Merité der Wissenschaften und Künste* **16**, 47–55 (1980).
- [29] P. A. M. Dirac and R. H. Fowler, [The quantum theory of the electron](#), *Proc. Roy. Soc. Ser. A* **117**, 610–624 (1928).
- [30] P. Clifford, [Applications of Grassmann’s Extensive Algebra](#), *American Journal of Mathematics* **1**, 350–358 (1878).
- [31] J. M. T. Thompson, J. Lasenby, A. N. Lasenby, and C. J. L. Doran, [A unified mathematical language for physics and engineering in the 21st century](#), *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **358**, 21–39 (2000).
- [32] M. Fierz, [Über die relativistische Theorie kräftefreier Teilchen mit beliebigem Spin](#), *Helvetica Physica Acta* **12**, 3 (1939).
- [33] W. Pauli, [The Connection Between Spin and Statistics](#), *Phys. Rev.* **58**, 716–722 (1940).
- [34] R. Streater and A. Wightman, [PCT, Spin and Statistics, and All that](#), *Princeton landmarks in mathematics and physics*, Princeton University Press, 2000.
- [35] D. Finkelstein and J. Rubinstein, [Connection between Spin, Statistics, and Kinks](#), *Journal of Mathematical Physics* **9**, 1762–1779 (1968).
- [36] J. A. Morgan, [Spin and statistics in classical mechanics](#), *American Journal of Physics* **72**, 1408–1417 (2004).
- [37] J. Sakurai and J. Napolitano, [Modern Quantum Mechanics](#), Cambridge University Press, 2017.
- [38] X. Fan, T. G. Myers, B. A. D. Sukra, and G. Gabrielse, [Measurement of the Electron Magnetic Moment](#), *Phys. Rev. Lett.* **130**, 071801 (2023).
- [39] T. Aoyama, M. Hayakawa, T. Kinoshita, and M. Nio, [Tenth-Order QED Contribution to the Electron \$g-2\$ and an Improved Value of the Fine Structure Constant](#), *Phys. Rev. Lett.* **109**, 111807 (2012).

Bibliographie

- [40] T. Aoyama, M. Hayakawa, T. Kinoshita, and M. Nio, [Tenth-order electron anomalous magnetic moment: Contribution of diagrams without closed lepton loops](#), Phys. Rev. D **91**, 033006 (2015).
- [41] Y. Aharonov and D. Bohm, [Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory](#), Phys. Rev. **115**, 485–491 (1959).
- [42] R. G. Chambers, [Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux](#), Phys. Rev. Lett. **5**, 3–5 (1960).
- [43] H. Boersch, H. Hamisch, K. Grohmann, and D. Wohlleben, [Experimenteller Nachweis der Phasenschiebung von Elektronenwellen durch das magnetische Vektorpotential](#), Zeitschrift für Physik **165**, 79–93 (1961).
- [44] R. M. Herman, [Classical origins of the Aharonov-Bohm effect](#), Foundations of Physics **22**, 713–725 (1992).
- [45] M. V. Berry, [Quantal phase factors accompanying adiabatic changes](#), Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **392**, 45–57 (1984).
- [46] M. Berry, [Anticipations of the Geometric Phase](#), Physics Today **43**, 34–40 (1990).
- [47] F. Wilczek and A. Shapere, [Geometric Phases in Physics](#), Advanced series in mathematical physics, World Scientific, 1989.
- [48] T. Kato, [On the Convergence of the Perturbation Method. I](#), Progress of Theoretical Physics **4**, 514–523 (1949).
- [49] C. Bloch, [Sur la théorie des perturbations des états liés](#), Nuclear Physics **6**, 329–347 (1958).
- [50] J. Streubel and A. Messiah, [Albert Messiah: Quantenmechanik. Band 2](#), De Gruyter, 2021.
- [51] H. F. Trotter, [On the product of semi-groups of operators](#), Proc. Amer. Math. Soc. **10**, 545–551 (1959).
- [52] H. Kleinert, [Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets; 3rd ed.](#), World Scientific, River Edge, NJ, 2004, Based on a Course on Path Integrals, Freie Univ. Berlin, 1989/1990.
- [53] E. Nelson, [Feynman Integrals and the Schrödinger Equation](#), Journal of Mathematical Physics **5**, 332–343 (1964).
- [54] I. Duru and H. Kleinert, [Solution of the path integral for the H-atom](#), Physics Letters B **84**, 185–188 (1979).
- [55] I. Duru and H. Kleinert, [Quantum Mechanics of H-Atom from Path Integrals](#), Fortschr. d. Phys. **30**, 401–435 (1982).
- [56] G. Roepstorff, [Path Integral Approach to Quantum Physics: An Introduction](#), Theoretical and Mathematical Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [57] I. M. Gel'fand and A. M. Yaglom, [Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics](#), Journal of Mathematical Physics **1**, 48–69 (1960).
- [58] F. G. Mehler, [Ueber die Entwicklung einer Function von beliebig vielen Variabeln nach Laplace-schen Functionen höherer Ordnung](#), Journal für die reine und angewandte Mathematik **66**, 161–176 (1866).

- [59] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions*, Number Vol. II in Bateman Manuscript Project California Institute of Technology, McGraw-Hill, 1955.
- [60] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Die Grundlehren der Math. Wiss., Springer, Berlin, 1932.
- [61] E. Schrödinger, *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*, *Naturwissenschaften* **23**, 807–812 (1935).
- [62] J. Bell, *Against 'measurement'*, *Physics World* **3**, 33 (1990).
- [63] K. Gottfried and N. David Mermin, *John Bell and the Moral Aspect of Quantum Mechanics*, *Europhys. News* **22**, 67–69 (1991).
- [64] E. Joos and H. D. Zeh, *The emergence of classical properties through interaction with the environment*, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **59**, 223–243 (1985).
- [65] W. H. Zurek, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical*, *Physics Today* **44**, 36–44 (1991).
- [66] E. Joos, H. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, J. Kupsch, and I. Stamatescu, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [67] W. H. Zurek, *Decoherence and the transition from quantum to classical – REVISITED*, arXiv:quant-ph/0306072 (2003).
- [68] C. E. Shannon, *A mathematical theory of communication*, *The Bell System Technical Journal* **27**, 379–423 (1948).
- [69] C. E. Shannon, *A mathematical theory of communication*, *The Bell System Technical Journal* **27**, 623–656 (1948).
- [70] M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*, Cambridge University Press, 2010.
- [71] W. H. Zurek, *Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse?*, *Phys. Rev. D* **24**, 1516–1525 (1981).
- [72] J. P. Paz, S. Habib, and W. H. Zurek, *Reduction of the wave packet: Preferred observable and decoherence time scale*, *Phys. Rev. D* **47**, 488–501 (1993).
- [73] H. Everett, *"Relative State" Formulation of Quantum Mechanics*, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 454–462 (1957).
- [74] M. Tegmark, *Many Worlds in Context*, pages 553–581 (2009).
- [75] B. S. DeWitt, *Quantum mechanics and reality*, *Physics Today* **23**, 30–35 (1970).
- [76] G. C. Ghirardi, A. Rimini, and T. Weber, *Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems*, *Phys. Rev. D* **34**, 470–491 (1986).
- [77] A. Bassi and G. Ghirardi, *Dynamical reduction models*, *Physics Reports* **379**, 257–426 (2003).
- [78] D. Bohm, *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I*, *Phys. Rev.* **85**, 166–179 (1952).

Bibliographie

- [79] D. Bohm, [A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. II](#), Phys. Rev. **85**, 180–193 (1952).
- [80] J. S. Bell and A. Aspect, [Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics: Collected Papers on Quantum Philosophy](#), Cambridge University Press, 2 edition, 2004.
- [81] J. S. Bell, [On the impossible pilot wave](#), Foundations of Physics **12**, 989–999 (1982).
- [82] A. Einstein, M. Born, and H. Born, [Briefwechsel, 1916-1955](#), Rowohlt Taschenbuch Verlag, Reinbek bei Hamburg, Ungekürzte Ausg. edition, 1972, 1969.
- [83] W. Heisenberg, [Der unanschauliche Quantensprung](#), Physikalische Blätter **2**, 4–6 (1946).
- [84] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, [Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?](#), Phys. Rev. **47**, 777–780 (1935).
- [85] D. Bohm and Y. Aharonov, [Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky](#), Phys. Rev. **108**, 1070–1076 (1957).
- [86] K. Baumann and R. Sexl, [Die Deutungen der Quantentheorie](#), Facetten der Physik, Vieweg, 1987.
- [87] M. Lamehi-Rachti and W. Mittig, [Quantum mechanics and hidden variables: A test of Bell's inequality by the measurement of the spin correlation in low-energy proton-proton scattering](#), Phys. Rev. D **14**, 2543–2555 (1976).
- [88] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, [Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem](#), Phys. Rev. Lett. **47**, 460–463 (1981).
- [89] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, [Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities](#), Phys. Rev. Lett. **49**, 91–94 (1982).
- [90] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, [Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers](#), Phys. Rev. Lett. **49**, 1804–1807 (1982).
- [91] J. Bell, R. Bertlmann, and A. Zeilinger, [Quantum \(Un\)speakables: From Bell to Quantum Information](#), Physics and astronomy online library, Springer, 2002.
- [92] M. A. Rowe, D. Kielpinski, V. Meyer, C. A. Sackett, W. M. Itano, C. Monroe, and D. J. Wineland, [Experimental violation of a Bell's inequality with efficient detection](#), Nature **409**, 791–794 (2001).
- [93] I. Gerhardt, Q. Liu, A. Lamas-Linares, J. Skaar, V. Scarani, V. Makarov, and C. Kurtsiefer, [Experimentally Faking the Violation of Bell's Inequalities](#), Phys. Rev. Lett. **107**, 170404 (2011).