

Kursvorlesung Theoretische Physik IV (PTP4)

Quantenmechanik

Sommersemester 2013

Thomas Gasenzer



Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg

Auf der Grundlage des Vorlesungsskripts von Timo Weigand (SS 2011),
erstellt von David Breyel, überarbeitet von
Jonathan Förste, Dominik Ludwig, Michael Meyer
und Thomas Gasenzer.

Inhaltsverzeichnis

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 Zustand und Vektorraum	10
1.4 Skalarprodukt, Norm, und Dualer Vektorraum	14
1.5 Lineare Operatoren & Observable	16
1.5.1 Die Algebra der Linearen Operatoren	20
1.5.2 Adjungierter Operator und Hermitizität	22
1.6 Messung und Projektion	25
1.7 Kompatible und inkompatible Observablen	27
1.8 Erwartungswert, Varianz, Unschärfe	29
1.9 Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion	31
1.9.1 Unendlich-dimensionale Zustandsräume	31
1.9.2 Der quantenmechanische Ortsraum	33
1.9.3 Der Begriff der Wellenfunktion	34
1.10 Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen	35
1.10.1 Aktive Translationen	35
1.10.2 Translationen als Lie-Gruppe	36
1.10.3 Der Impuls als Generator der Translationen	37
1.10.4 Kanonische Kommutatorrelationen und Kanonische Quantisierung	38
1.10.5 Darstellung von \hat{p} im Ortsraum	39
1.10.6 Generalisierte Eigenvektoren und Gel'fandsche Raumtripel*	40
1.11 Wellenfunktionen im Impulsraum	42
1.11.1 Wellenfunktion der Impulseigenzustände	42

1.11.2	Zusammenhang von $\psi_\alpha(x)$ und $\phi_\alpha(p)$ für beliebiges $ \alpha\rangle$	43
1.11.3	Beispiel: Gaußsche Wellenfunktion	44
2	Quantendynamik	47
2.1	Zeitentwicklungsoperator und Schrödingergleichung	47
2.2	Schrödingergleichung für Wellenfunktionen und Propagator	51
2.3	Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung	56
2.4	Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild	58
2.4.1	Heisenbergbild und Bewegungsgleichung für Operatoren	58
2.4.2	Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem	61
2.4.3	Basis-Kets im Heisenberg-Bild	63
3	Eindimensionale Probleme	65
3.1	Harmonischer Oszillator	65
3.1.1	Algebraische Lösung	65
3.1.2	Ortsraumdarstellung der H.O.-Zustände	71
3.1.3	Direkte Lösung der Ortsraum-Schrödingergleichung	73
3.1.4	Kohärente Zustände	77
3.2	Potentialstufen	80
3.2.1	Stückweise stetige Potentiale	80
3.2.2	Potentialstufe	81
3.3	Potentialbarriere und Tunneleffekt	85
3.4	Potentialtopf	87
3.4.1	Gebundene Zustände des Potentialtopfs	87
3.4.2	Unendlich tiefer Potentialtopf	88
3.4.3	Resonanzen	89
4	Bewegung im Zentralpotential	95
4.1	Rotationen und Lie-Theorie	95
4.2	Drehimpuls und Darstellungen der $\mathfrak{so}(3)$	98
4.3	Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses	99
4.4	Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen	102
4.5	Bewegung im Zentralpotential	106
4.6	Das Coulombpotential	108

5	Bewegung im elektromagnetischen Feld	115
5.1	Spin	115
5.1.1	Phänomenologie des Spins	115
5.1.2	Ontologie des Spins & Gesamtdrehimpuls	119
5.1.3	Rechnen mit Tensorprodukten für Spin-1/2-Felder	122
5.2	Addition von Drehimpulsen	123
5.3	Kopplung an das elektromagnetische Feld	128
5.3.1	Schrödingergleichung, Pauli-Gleichung	128
5.3.2	Eichprinzip und kovariante Ableitung	130
6	Näherungsmethoden	135
6.1	Stationäre (Rayleigh-Schrödinger) Störungstheorie	135
6.1.1	Nicht entarteter Fall	135
6.1.2	Entarteter Fall	137
6.1.3	Ritzsches Variationsverfahren	138
6.2	Relativistische Korrekturen zum Wasserstoffatomspektrum - Feinstruktur	139
6.2.1	Relativistische Korrektur zur kinetischen Energie	140
6.2.2	Spin-Bahn-Kopplung	140
6.2.3	Darwin-Term	142
6.3	H-Atom im äußeren Feld: Zeeman- und Stark-Effekt	143
6.3.1	Zeeman-Effekt	143
6.3.2	Stark-Effekt	145
6.4	Zeitabhängige Störungstheorie	145
6.4.1	Wechselwirkungsbild	145
6.4.2	Sudden Approximation	146
6.4.3	Übergänge 1. Ordnung & Goldene Regel	147
6.4.4	Elektrische Dipolübergänge in Atomen	149
6.5	Die Feynmansche Pfadintegral-Darstellung	154
6.6	Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Näherung	164
7	Zeitabhängige Phänomene	167
7.1	Zeitabhängige Störungstheorie	167
7.1.1	Wechselwirkungsbild	167
7.1.2	Übergänge erster Ordnung und Goldene Regel	168

8	Zustand und Messprozess	171
8.1	Mess- und Interpretationsproblem	171
8.1.1	Dichtematrix, reiner und gemischter Zustand	171
8.1.2	Dichtematrix gekoppelter Systeme	175
8.1.3	Das Messproblem und einige Lösungsansätze	176
8.2	Pfadintegralformulierung und Streutheorie	180

Vorbemerkungen & Literatur

Bei diesem Vorlesungsskript handelt es sich um eine Zusammenfassung meiner Aufzeichnungen im Rahmen der Kursvorlesung Theoretische Physik IV (PTP4), Quantenmechanik, gehalten im Sommersemester 2013 an der Universität Heidelberg. Die Grundlage dieses Skripts bildet das aus den Vorlesungsnotizen von PD Dr. Timo Weigand im SS 2011 von David Breyel erstellte Skript, welches für die vorliegende Version gründlich überarbeitet wurde. Einige Abschnitte wurden ergänzt, andere komplett neu hinzugefügt. Ein besonderer Dank gilt **Jonathan Förste, Dominik Ludwig und Michael Meyer** für die technische wie inhaltliche Überarbeitung dieses Skripts.

Der hier dargestellte Stoff wurde in 24 Vorlesungen zu je 90 Minuten durchgenommen. Das Vorlesungsskript erhebt nicht den Anspruch einer literarischen Anforderungen genügenden, originären geschweige denn umfassenden Darstellung der Quantenmechanik, sondern soll lediglich die wesentlichen Inhalte der Vorlesung zusammenfassen.

In Ergänzung des zugrundeliegenden Skripts von Timo Weigand wurden einige zentrale, in der Vorlesung nur oder nicht angerissenen Themen zusätzlich aufgenommen. Die Darstellung geht infolgedessen z.T. etwas weiter über den konkret abgehandelten Stoff hinaus. Diese Ergänzungen sind für entsprechend interessierte Leserinnen und Leser zur Vertiefung gedacht und wurden soweit wie möglich durch kleinere Schriftgröße vom übrigen Text abgesetzt.

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.

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 Frage steht am Anfang unserer über 2000 Jahre alten abendländischen Philosophie und 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 abendländische, kulturell und historisch geprägte 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, ...
- Alles, was nicht Nichts ist: Die Farben, die Schönheit, ...

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

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, einen der zentralen Standpunkte der abendländischen Philosophie.

Damit wird der klassische Dingbegriff offenbar, welcher uns bis hinein in unsere Sprachstruktur (Subjekt - Prädikat) 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:

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.

- Empirische Erkenntnisse, welche mit der klassischen Beschreibung nicht vereinbar sind, betreffen 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, Experimente von Davisson und Germer, 1927, Thomson, 1928).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. Es wird nun die Annahme aufgestellt, daß es eine Grenze der Schwachheit der Störung eines Systems bei einer Messung gibt. 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*

$$h = 6.67 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.1.3)$$

gegeben ist.

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 Polarisationsexperimente werden wir heuristisch-induktiv die wesentlichen Grundzüge der neuen Theorie kennenlernen. Unsere Vorgehensweise wird vom Versuch geleitet sein, die Resultate dieser Experimente mit dem angesprochenen Teilchencharakter des Lichts in Ein-

⁴Eine Übersicht über einige der wichtigsten Experimente findet sich beispielsweise in F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Kapitel 1.1.

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.”

klang 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 transversale Lichtwelle in z -Richtung:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= E_x(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_x + E_y(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_y = \begin{pmatrix} E_x(\mathbf{r}, t) \\ E_y(\mathbf{r}, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{c}(\mathbf{e}_z \times \mathbf{E}) = \frac{1}{\omega}(\mathbf{k} \times \mathbf{E}), \quad (\text{Faraday}) \\ E_i(\mathbf{r}, t) &= \text{Re}(E_i^{(0)} e^{i(kz - \omega t)}), \quad i \in \{x, y\}, \quad E_z(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \text{wobei} \\ k &= \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu = c|k| \quad \text{und} \quad E_i^{(0)} = |E_i^{(0)}| e^{i\alpha_i}.\end{aligned}\tag{1.2.1}$$

Hierbei stellen die α_i konstante Phasen dar. Die Energiedichte der Welle berechnet sich zu

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8\pi}(|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2)(\mathbf{r}, t).\tag{1.2.2}$$

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 $\alpha_x - \alpha_y = \frac{\pi}{2}$).

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

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \text{wobei} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}.\tag{1.2.3}$$

Das Plancksche Wirkungsquantum $h = 6,63 \cdot 10^{-34}\text{Js}$ 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.

- 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

$$\text{Lichtintensität } I \propto \text{Anzahl der Photonen.} \quad (1.2.4)$$

1.2.2 Einfache Experimente mit Polarisationsfiltern

Experiment 1

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

Klassisches Bild

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

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{|\mathbf{E}_{\text{out}}|^2}{|\mathbf{E}_{\text{in}}|^2} = \frac{|\mathbf{E}_x|^2}{|\mathbf{E}_x|^2 + |\mathbf{E}_y|^2}. \quad (1.2.5)$$

Dieses Resultat läßt sich leicht aus der Energiestromdichte der Lichtwelle ableiten, welche für eine ebene Welle in z -Richtung durch den Poynting-Vektor

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{E} \times \mathbf{B})(\mathbf{r}, t) = c\epsilon_0 E_0^2 \cos^2(\omega t - kz) \mathbf{e}_z \quad (1.2.6)$$

gegeben ist.

Quantenmechanisches Bild

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

$$\frac{I_{\text{out}}}{I_{\text{in}}} = \frac{\# \text{ der auslaufenden Photonen}}{\# \text{ der einlaufenden Photonen}} = \frac{|\mathbf{E}_x|^2}{|\mathbf{E}_x|^2 + |\mathbf{E}_y|^2} =: P_x, \quad 0 \leq P_x \leq 1, \quad (1.2.7)$$

interpretiert werden. P_x ist zunächst eine relative Häufigkeit für das Ensemble von Photonen. Da nur einzelne Photonen als Ganzes durchgelassen werden können, sind wir gezwungen, P_x als die *Wahrscheinlichkeit*, dass ein 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.

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

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{in}} = \frac{1}{|\mathbf{E}|} (E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y, \quad \text{mit } A_x, A_y \in \mathbb{C}, \quad |A_x|^2 + |A_y|^2 = 1. \quad (1.2.8)$$

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

$$P_x = |A_x|^2. \quad (1.2.9)$$

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

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{out}} = \frac{E_x}{|E_x|} \mathbf{e}_x \quad \text{zu.} \quad (1.2.10)$$

Hier sehen wir bereits ein allgemeine Eigenschaft von Messungen: Abgesehen von der Normierung ändert sich der Zustandsvektor durch die Polarisationsmessung entsprechend einer Polarisation auf die Richtung des Polarisators:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=: \hat{\mathbb{P}}_x} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (1.2.11)$$

Der *Projektionsoperator* $\hat{\mathbb{P}}_x$ besitzt die definierende Eigenschaft

$$\hat{\mathbb{P}}_x^2 = \hat{\mathbb{P}}_x. \quad (1.2.12)$$

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

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{e}_{x'} &= \cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \phi \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_{y'} &= -\sin \phi \mathbf{e}_x + \cos \phi \mathbf{e}_y \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \cos \phi \mathbf{e}_{x'} - \sin \phi \mathbf{e}_{y'} \\ \mathbf{e}_y &= \sin \phi \mathbf{e}_{x'} + \cos \phi \mathbf{e}_{y'} \end{aligned} \right. \quad (1.2.13)$$

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

Im klassischen Wellenbild können wir deshalb schreiben

$$\mathbf{E}_1 = E_x \mathbf{e}_x = E_x \underbrace{(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{x'})}_{\cos(\phi)} \mathbf{e}_{x'} + E_x \underbrace{(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{y'})}_{-\sin(\phi)} \mathbf{e}_{y'}, \quad (1.2.14)$$

$$\Rightarrow \mathbf{E}_2 = E_x \cos \phi \mathbf{e}_{x'} = (\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{e}_{x'}) \mathbf{e}_{x'}. \quad (1.2.15)$$

Wir schreiben

$$\mathbf{E}_1 = A_{x'} \mathbf{e}_{x'} + A_{y'} \mathbf{e}_{y'}, \quad \text{mit } |A_{x'}|^2 + |A_{y'}|^2 = 1. \quad (1.2.16)$$

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

Damit ergibt sich für das Verhältnis der Intensitäten der Felder:

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{|E_2|^2}{|E_1|^2} = |\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_{x'}|^2 = \cos^2 \phi. \quad (1.2.17)$$

Quantenmechanisches Bild

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

$$\hat{\mathbf{E}}_1 = \underbrace{\frac{E_x}{|E_x|}}_{=A_x} \mathbf{e}_x \quad (1.2.18)$$

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

$$\hat{\mathbf{E}}_1 = A_{x'} \mathbf{e}_{x'} + A_{y'} \mathbf{e}_{y'}, \quad (1.2.19)$$

wobei die jeweiligen Größen durch

$$A_{x'} = \hat{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathbf{e}_{x'} \quad \text{und} \quad A_{y'} = \hat{\mathbf{E}}_1 \cdot \mathbf{e}_{y'}, \quad \text{mit} \quad |A_{x'}|^2 + |A_{y'}|^2 = 1 \quad (1.2.20)$$

gegeben sind. Das Photon kann insofern als in der *Superposition* von $A_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $A_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ aufgefasst werden. Umgekehrt gilt: Die Vektoren $A_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $A_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ können wie üblich addiert werden.

Die Aussage, dass sich das Photon in einer Superposition von $A_{x'} \mathbf{e}_{x'}$ und $A_{y'} \mathbf{e}_{y'}$ befindet, ist so zu deuten, dass sich das Photon mit der Wahrscheinlichkeit $|A_{x'}|^2$ so verhält wie ein x' -polarisiertes Photon und mit der Wahrscheinlichkeit $|A_{y'}|^2$ wie ein y' -polarisiertes Photon. Das heißt, die Wahrscheinlichkeit, dass das sich in diesem Superpositionszustand befindliche Photon durch den x' -Polarisator durchgelassen wird, ist

$$P_{x'} = |A_{x'}|^2. \quad (1.2.21)$$

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

1.3 Zustand und Vektorraum

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

$$\text{Zustand} \leftrightarrow |\alpha\rangle. \quad (1.3.1)$$

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 $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle, \dots$, so dass das System als gleichsam in Superposition dieser Zustände aufgefasst werden kann,

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle + \dots \quad (1.3.2)$$

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:

$$\underbrace{E_x \mathbf{e}_x}_{|\gamma\rangle} = \underbrace{E_x \cos \phi \mathbf{e}_{x'}}_{|\alpha\rangle} + \underbrace{(-E_x \sin \phi) \mathbf{e}_{y'}}_{|\beta\rangle}. \quad (1.3.3)$$

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

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.

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 $|\alpha\rangle \in V$ – zusammen mit den Operationen

$$+ : V \times V \rightarrow V \quad (\text{Vektoraddition}) \quad \text{und} \quad \cdot : \mathbb{C} \times V \rightarrow V \quad (\text{Skalarmultiplikation}) \quad (1.3.4)$$

so dass gilt:

- ‘+’
- $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle \in V$,
 - $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V$ ist $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$ (abelsch),
 - $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \in V$ ist $(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$ (assoziativ),
 - $\exists |\emptyset\rangle \in V : \forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle + |\emptyset\rangle = |\alpha\rangle$ (Null-Vektor),
 - $\forall |\alpha\rangle \in V \exists (-|\alpha\rangle) \in V : |\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = |\emptyset\rangle$ (Inverses Element),
- ‘·’
- $\forall c \in \mathbb{C}$ und $|\alpha\rangle \in V$ ist $c|\alpha\rangle \in V$,
 - $\forall |\alpha\rangle \in V$ ist $1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$,
 - $\forall c, d \in \mathbb{C}$ 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 $(c + d)|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle + d|\alpha\rangle$.

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

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.⁶

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 Übungen beweise man mit Hilfe dieser Definitionen das

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

$$\mathbf{e}_x = |x\rangle, \quad \mathbf{e}_y = |y\rangle. \quad (1.3.5)$$

Jeder Polarisationszustand kann damit als

$$|E\rangle = A_x|x\rangle + A_y|y\rangle \quad \text{geschrieben werden, wobei} \quad |E\rangle \cong c \cdot |E\rangle \quad \text{für} \quad c \neq 0, \quad (1.3.6)$$

d.h., Multiplikation mit c ändert lediglich die Norm und damit die ‘‘Länge’’ des Vektors.

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 $|e_x\rangle, |e_y\rangle$.

Wie lauten die Amplituden A_x und A_y für ein Photon, ausgedrückt in E_x und E_y ?

Zur Erinnerung: Die Energiedichte einer ebenen Welle in z -Richtung lautet

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2)(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[|E_x^{(0)}|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_x) + |E_y^{(0)}|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_y) \right]. \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

Integration über viele Wellenlängen ergibt die totale Energie

$$\mathcal{E}_{\text{tot}}(t) = \int d^3r \varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{V}{8\pi} \left[|E_x^{(0)}|^2 + |E_y^{(0)}|^2 \right]. \quad (1.3.8)$$

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 und daraus die Amplituden

$$A_i = \sqrt{\frac{V}{8\pi\hbar\omega}} E_i^{(0)}, \quad i = x, y, \quad (1.3.9)$$

des auf Eins normierten Zustandsvektors eines Photons abgelesen werden können.

⁶Für Elemente der Linearen Algebra siehe z.B. M. Koecher, Lineare Algebra und Analytische Geometrie (Springer, Berlin, etc., 2002).

1.4 Skalarprodukt, Norm, und Dualer Vektorraum

Erinnern wir uns an Gleichung (1.2.14), 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.

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

$$SP : |\alpha\rangle, |\beta\rangle \mapsto (|\alpha\rangle, |\beta\rangle) \in \mathbb{C} \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle, \quad (1.4.1)$$

für welche gilt, dass

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

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

$$(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle, |\gamma\rangle) = c_1^*(|\alpha\rangle, |\gamma\rangle) + c_2^*(|\beta\rangle, |\gamma\rangle). \quad (1.4.2)$$

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

$$|(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)|^2 \leq (|\alpha\rangle, |\alpha\rangle)(|\beta\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.4.3)$$

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

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

$$(|\alpha_j\rangle, |\gamma\rangle) = (|\alpha_j\rangle, \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle) = \sum_{i=1}^k c_i (|\alpha_j\rangle, |\alpha_i\rangle) = c_j (|\alpha_j\rangle, |\alpha_j\rangle), \quad (1.4.4)$$

woraus wiederum

$$c_j = \frac{(|\alpha_j\rangle, |\gamma\rangle)}{(|\alpha_j\rangle, |\alpha_j\rangle)} \quad (1.4.5)$$

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

Definition 1.8. Eine Norm ist eine Abbildung

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

so dass

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

Ein VR mit einer Norm heißt normiert.

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

$$\|\alpha\| := \sqrt{(|\alpha\rangle, |\alpha\rangle)}. \quad (1.4.6)$$

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

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

Für eine solche ONB $|e_i\rangle$ gilt

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle \Rightarrow c_i = (|e_i\rangle, |\gamma\rangle), \quad (1.4.7)$$

im Einklang mit dem Polarisationsbeispiel (1.2.14).

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 $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V, \quad a, b \in \mathbb{C} : f(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = af(|\alpha\rangle) + bf(|\beta\rangle).$

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

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

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

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

$$f_{|\alpha\rangle} : V \rightarrow \mathbb{C} : f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle). \quad (1.4.8)$$

Wir stellen fest :

$$f_{|\alpha\rangle} \in V^* \overset{\text{dual}}{\leftrightarrow} |\alpha\rangle. \quad (1.4.9)$$

Beachte dabei, dass aus (1.4.2) und (1.4.8) folgt, dass $f_{c|\alpha\rangle} = c^* f_{|\alpha\rangle}$. Wir führen die folgende, wichtige Notation ein,

$$f_{|\alpha\rangle} \equiv \langle \alpha |, \quad (1.4.10)$$

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

$$f_{|\alpha\rangle}(|\beta\rangle) = \langle \alpha | \beta \rangle = (|\alpha\rangle, |\beta\rangle) \quad (1.4.11)$$

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

$$\langle \alpha | = (|\alpha\rangle)^\dagger \Rightarrow \langle \alpha | c^* = (c|\alpha\rangle)^\dagger \quad \text{für } c \in \mathbb{C}. \quad (1.4.12)$$

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

$$|\gamma\rangle = \sum_{i=1}^k c_i |\alpha_i\rangle, \quad \Rightarrow c_i = \frac{\langle \alpha_i | \gamma \rangle}{\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle}; \quad (1.4.13)$$

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

1.5 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 Polarisationsexperimentes:

Betrachte die Polarisationszustände

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle), \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle). \quad (1.5.1)$$

Der Vergleich mit dem in Kapitel 1.2.1 beschriebenen klassischen Wellenvektor 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 gilt

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{x'} \\ A_{y'} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle x' | \psi \rangle \\ \langle y' | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle x' | x \rangle & \langle x' | y \rangle \\ \langle y' | x \rangle & \langle y' | y \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle x | \psi \rangle \\ \langle y | \psi \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\left[\cos(\phi) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \sin(\phi) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right]}_{=: R(\phi)} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.5.2)$$

$$\Rightarrow R(\phi) = \mathbb{1}_2 \cos(\phi) + i S \sin(\phi) \text{ mit } S = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.5.3)$$

Durch genaues Hinschauen sehen wir:

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

sind zwei Eigenvektoren von S zu den Eigenwerten $\lambda_R = 1$, $\lambda_L = -1$:
 $S|R\rangle = |R\rangle$, $S|L\rangle = -|L\rangle$

Damit vereinfacht sich in dieser Basis

$$R(\phi)|R\rangle = (\cos(\phi) + i \sin(\phi))|R\rangle = e^{i\phi}|R\rangle$$

$$R(\phi)|L\rangle = (\cos(\phi) + i \sin(\phi))|L\rangle = e^{-i\phi}|L\rangle$$

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 $\lambda_{R/L}$ (Eigenwerte)?

Drehimpuls des e-m Feldes eines Photons:⁷

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \quad \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \quad \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A})) \quad (1.5.4)$$

aus dem Poynting-Vektor 1.2.6 für eine ebene Welle im Vakuum, so dass $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, und man schreiben kann:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.5.5)$$

⁷s. auch Baym, Lectures on QM (Westview, 2010)

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

Wir integrieren nun \mathbf{L} partiell und erhalten

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \left\{ \mathbf{E} \times \mathbf{A} + \sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i \right\} \quad (1.5.6)$$

Für eine ebene Welle in z -Richtung gilt

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{c}{\omega} \left\{ E_x^{(0)} \sin(kz - \omega t + \alpha_x) \mathbf{e}_x + E_y^{(0)} \sin(kz - \omega t + \alpha_y) \mathbf{e}_y \right\} \quad (1.5.7)$$

Hierfür liegen \mathbf{E} und \mathbf{B} in der x - y -Ebene, so dass \mathbf{L} keine z -Komponente haben kann. In der Tat mittelt sich der zweite Term im Integranden in z -Richtung, $(\mathbf{r} \times \nabla)_z \sim \partial/\partial\phi$ bei Integration in $\int d^3r = \int r dr dz d\phi$ über ϕ heraus. Es bleibt aber insgesamt ein Oberflächenterm, der erste im Integranden:

$$L_z = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r [E_x(\mathbf{r}, t) A_y(\mathbf{r}, t) - E_y(\mathbf{r}, t) A_x(\mathbf{r}, t)] \quad (1.5.8)$$

Einsetzen der ebenen Welle ergibt:

$$\begin{aligned} L_z &= \frac{1}{4\pi\omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} \int d^3r \sin(\alpha_y - \alpha_x) \\ &= \frac{V}{4\pi\omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} \sin(\alpha_y - \alpha_x) \\ &= \frac{V}{8\pi i\omega} E_x^{(0)} E_y^{(0)} [e^{i\alpha_y} e^{-i\alpha_x} - e^{-i\alpha_y} e^{i\alpha_x}] \\ &= \frac{V}{8\pi i\omega} [E_x^* E_y - E_x E_y^*] \\ &= \frac{V}{8\pi\omega} \left[\left| \frac{E_x - iE_y}{\sqrt{2}} \right|^2 - \left| \frac{E_x + iE_y}{\sqrt{2}} \right|^2 \right] \end{aligned} \quad (1.5.9)$$

Ersetzen wir letztlich die Felder durch die Amplituden (siehe 1.3.9), so ergibt sich für die z -Komponente des Drehimpulses eines Photons:

$$L_z = \hbar \left[\left| \frac{A_x - iA_y}{\sqrt{2}} \right|^2 - \left| \frac{A_x + iA_y}{\sqrt{2}} \right|^2 \right] \quad (1.5.10)$$

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

$$|\psi\rangle = |R\rangle \langle R|\psi\rangle + |L\rangle \langle L|\psi\rangle \quad (1.5.11)$$

und finden:

$$\begin{aligned} \langle R|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle x| - i\langle y|) (A_x|x\rangle + A_y|y\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x - A_y) \equiv A_R \end{aligned} \quad (1.5.12)$$

$$\langle L|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x + A_y) \equiv A_L \quad (1.5.13)$$

Damit erhalten wir

$$L_z = \hbar [\langle \psi|R\rangle \langle R|\psi\rangle - \langle \psi|L\rangle \langle L|\psi\rangle] \quad (1.5.14)$$

als Drehimpuls des Photons in z -Richtung.

Letztlich beobachten wir noch, dass

$$S|\psi\rangle = S|R\rangle\langle R|\psi\rangle + S|L\rangle\langle L|\psi\rangle = |R\rangle\langle R|\psi\rangle - |L\rangle\langle L|\psi\rangle \quad (1.5.15)$$

und daraus

$$\langle\psi|S|\psi\rangle = [\langle\psi|R\rangle\langle R| + \langle\psi|L\rangle\langle L|]S|\psi\rangle = \langle\psi|R\rangle\langle R|\psi\rangle - \langle\psi|L\rangle\langle L|\psi\rangle \quad (1.5.16)$$

, wobei wir die Normierung $\langle R|R\rangle = 1 = \langle L|L\rangle$ und Orthogonalität $\langle R|L\rangle = 0$ verwenden. Wir finden also

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

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

Wir beobachten weiter:

$$|\psi\rangle = |R\rangle \Rightarrow L_z = \hbar$$

$$|\psi\rangle = |L\rangle \Rightarrow L_z = -\hbar$$

$$\left| \frac{A_x \mp iA_y}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} (|A_x|^2 + |A_y|^2 \pm 2\operatorname{Im}(A_x^* A_y)) = \frac{1}{2} (1 \pm 2|A_x||A_y| \sin(\alpha_x - \alpha_y))$$

Wähle zum Beispiel $|A_x| = |A_y| = 1/\sqrt{2}$:

$$|A_{R/L}|^2 = \frac{1}{2} (1 \pm \sin(\alpha_x - \alpha_y))$$

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

L_z ist durch die Wahrscheinlichkeitsamplituden A_R und A_L bestimmt.

Ganz allgemein gilt in der QM:

- Messgrößen entsprechen lineare Operatoren $\hat{\theta}$ wie S , die z.B. durch Matrizen dargestellt werden können (für $\dim(V) \leq \infty$)
- Das Spektrum der Eigenwerte von θ liefert die möglichen Messwerte ($\Rightarrow \gamma$: 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 $\langle\psi|\theta|\psi\rangle$ aus vielen Einzelmessungen machen.

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

1.5.1 Die Algebra der Linearen Operatoren

Definition 1.12. Ein linearer Operator ist eine Abbildung

$$\hat{A} : V \rightarrow V \quad \text{so dass} \quad \hat{A}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{A}|\alpha\rangle + b\hat{A}|\beta\rangle. \quad (1.5.17)$$

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

$$\hat{A} : V^* \rightarrow V^*, \quad \langle \alpha | \rightarrow \langle \alpha | \hat{A}, \quad (1.5.18)$$

was definiert ist durch

$$\langle \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \rangle := \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) \Rightarrow \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) = \langle \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \rangle. \quad (1.5.19)$$

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

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

$$A_{ji} = \langle e_j | \sum_k A_{ki} |e_k\rangle = \langle e_j | \hat{A} |e_i\rangle. \quad (1.5.20)$$

Dies führt uns zu der Identifikation

$$\text{linearer Operator } \hat{A} \leftrightarrow \text{quadratische Matrix } A_{ji}. \quad (1.5.21)$$

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

$$\hat{A}|\gamma\rangle = (|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle) = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle \quad (1.5.22)$$

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

$$\forall |\alpha\rangle \in V : |\alpha\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle \quad (1.5.23)$$

$$\Rightarrow \mathbb{1} = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i| \quad (\text{Vollständigkeitsrelation}) \quad \text{falls } \{|e_i\rangle, i = 1, \dots, N\} \text{ ONB ist.} \quad (1.5.24)$$

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

$$\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \left(\sum_{j=1}^N |e_j\rangle\langle e_j|\right) \hat{A} \left(\sum_{k=1}^N |e_k\rangle\langle e_k|\right) = \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle\langle e_j|\hat{A}|e_k\rangle\langle e_k| \quad (1.5.25)$$

$$(1.5.26)$$

zur Matrixdarstellung eines linearen Operators,

$$\hat{A} = \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle A_{jk} \langle e_k|. \quad (1.5.27)$$

Beleuchten wir nun die mathematische Struktur der Operatoren etwas genauer:

Definition 1.13. Eine Operatoralgebra $\mathcal{A} = \{\hat{A}, \hat{B}, \dots\}$ ist eine abelsche Gruppe unter der Addition, mit den Eigenschaften:

- $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$ (abelsch)
- $\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}$ (assoziativ)
- $\hat{A} + \hat{0} = \hat{A}$ wobei $\hat{0}|\alpha\rangle = |\emptyset\rangle \quad \forall |\alpha\rangle$ (Nullelement)
- $\hat{A} + (-\hat{A}) = \hat{0}$ (Inverses)

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

Die Hintereinanderausführung zweier linearer Operatoren ergibt wieder einen linearen Operator, gegeben durch das Produkt der Operatoren, "·": $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ mit den Eigenschaften

- $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$ (Assoziativität),
- $\mathbb{1}\hat{A} = \hat{A}$ (Existenz der Eins).
- $\exists \hat{A}^{-1} : \hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}$ (Existenz des Inversen)

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

Wichtig: Im Allgemeinen kommutiert die Multiplikation nicht!

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad (1.5.28)$$

Definition 1.14. Wir bezeichnen

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.5.29)$$

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

Der Kommutator erfüllt die *Jacobi-Identität*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.5.30)$$

1.5.2 Adjungierter Operator und Hermitizität

Ein wesentliches Konzept ist das des adjungierten Operators:

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

$$(\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle) = (|\alpha\rangle, \hat{A} |\beta\rangle) = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle. \quad (1.5.31)$$

Beachte dabei, dass

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) = (\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle) \quad \text{d.h.} \quad \langle \alpha | \hat{A} \overset{\text{dual}}{\leftrightarrow} \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle. \quad (1.5.32)$$

Alternativ können wir wegen

$$(|\beta\rangle, \hat{A}^\dagger |\alpha\rangle) = (\hat{A}^\dagger |\alpha\rangle, |\beta\rangle)^* = (|\alpha\rangle, \hat{A} |\beta\rangle)^* \quad (1.5.33)$$

auch schreiben

$$\langle \beta | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle^*. \quad (1.5.34)$$

In Matrixschreibweise bedeutet dies

$$\hat{A} = \sum_{j,k} |e_j\rangle A_{jk} \langle e_k|, \quad \hat{A}^\dagger = \sum_{j,k} |e_j\rangle (A^\dagger)_{jk} \langle e_k|, \quad (A^\dagger)_{jk} = A_{kj}^*. \quad (1.5.35)$$

Beweis:

$$(A^\dagger)_{jk} = \langle e_j | \hat{A}^\dagger | e_k \rangle = \langle e_k | \hat{A} | e_j \rangle^* = A_{kj}^*. \quad (1.5.36)$$

In den Übungen werden wir folgende Identität zeigen:

Hilfssatz 1.3.

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (1.5.37)$$

Definition 1.16. Ein linearer Operator heißt hermitesch, wenn

$$\langle \alpha | A | \beta \rangle = \langle \beta | A | \alpha \rangle^* \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle. \quad (1.5.38)$$

Für endlich-dimensionale VR impliziert dies, dass $A = A^\dagger$, d.h. der Operator ist selbstadjungiert. Selbstadjungiertheit, $A = A^\dagger$ erfordert zusätzlich zu Hermitizität, dass auch die Definitionsbereiche von A und A^\dagger übereinstimmen müssen. Dies ist auf endlich-dimensionalen Vektorräumen immer der Fall, stellt für unendlich-dimensionale VR aber eine nicht-triviale Einschränkung dar.

Im Folgenden wollen wir die Bedeutung selbstadjungierter Operatoren anhand ihrer "guten" Eigenschaften bzgl. Diagonalisierung darlegen.

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

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \text{d.h.} \quad (\hat{A} - \lambda\mathbb{1})|\lambda\rangle = 0. \quad (1.5.39)$$

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

Die wichtige Eigenschaft von hermiteschen Operatoren ist zusammengefasst in

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

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

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

$$\begin{aligned} \lambda \langle \lambda | \mu \rangle &= (\lambda \langle \mu | \lambda \rangle)^* = (\langle \mu | \hat{A} | \lambda \rangle)^* \\ &= \langle \lambda | \hat{A} | \mu \rangle = \mu \langle \lambda | \mu \rangle \end{aligned} \quad (1.5.40)$$

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

Für selbstadjungierte Operatoren ist darüberhinaus folgende Aussage von zentraler Wichtigkeit:

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

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

Allgemeiner hat die charakteristische Gleichung $\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0$ eine Anzahl k Lösungen $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ mit Multiplizität (= Entartungsgrad) $d(\lambda_1), \dots, d(\lambda_k) : \sum_{i=1}^k d(\lambda_i) = N$. Dann gilt (siehe Literatur zur linearen Algebra), dass jeder Eigenwert λ_i seiner Vielfachheit $d(\lambda_i)$ entsprechend viele linear unabhängige Eigenvektoren besitzt.

$$\hat{A}|\lambda_i^{(n_i)}\rangle = \lambda_i|\lambda_i^{(n_i)}\rangle, \quad n_i = 1, \dots, d(\lambda_i). \quad (1.5.41)$$

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 anti-hermiteschen, $A^\dagger = -A$, die unitären, $A^\dagger = A^{-1} \Leftrightarrow A^\dagger A = \mathbb{1}$ sowie weitere Matrizen ein (Bsp: $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$).

Jede normale Matrix lässt sich mit Hilfe einer unitären Matrix diagonalisieren: $\exists U, UU^\dagger = \mathbb{1} : U^\dagger A U = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$. In der QM werden uns als Observable keine anderen als normale Matrizen begegnen.

Allerdings werden uns Operatoren begegnen, welche Transformationsaufgaben erfüllen, z.B. $\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, welche nicht normale Operatoren sind. Weiteres Bsp: Leiteroperatoren mit $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$.

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

$$\text{Insbesondere gilt } \hat{A} = \sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \lambda_i \langle \lambda_i| \quad (\text{nicht entarteter Fall}) \quad (1.5.42)$$

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

$$\hat{A}|\lambda_i\rangle = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j | \lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle. \quad (1.5.43)$$

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 den Zusammenhang festgestellt

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

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

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.

1.6 Messung und Projektion

Am Beispiel der Photonenpolarisation sahen wir:

$$L_z = \hbar [|\langle R | \psi \rangle|^2 - |\langle L | \psi \rangle|^2], \quad (1.6.1)$$

dass im Mittel mit Wahrscheinlichkeit $|\langle R/L | \psi \rangle|^2$ der Wert $\pm\hbar$ für den durch den Operator $\hat{L}_z = \hbar\hat{S}$ beschriebenen Drehimpuls in z -Richtung bzw. Spin gemessen wird. Eine Einzelmessung ergibt entweder $\lambda = \hbar$ oder $\lambda = -\hbar$, da $|R\rangle$ und $|L\rangle$ die Eigenzustände von \hat{L}_z sind.

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

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\lambda_i\rangle, \quad c_i = \langle \lambda_i | \gamma \rangle, \quad \sum_i |c_i|^2 = 1. \quad (1.6.2)$$

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, dass die Wahrscheinlichkeit, den Wert λ_i zu messen, gegeben ist durch

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 \quad (\text{Bornsche Regel}). \quad (1.6.3)$$

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 3.a

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

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2 = |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2. \quad (1.6.4)$$

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 (“Kopenhagenscher”) Interpretation der Quantenmechanik wird nicht weiter erklärt, wie oder warum dieser Kollaps geschieht. Dies wird als *Messproblem* bezeichnet. Am Ende der Vorlesung werden wir den Messprozess genauer beleuchten und mögliche Interpretationen des Kollapses der Wellenfunktion kennenlernen. An dieser Stelle sei lediglich

betont, dass das Postulat 3.a in exzellenter Übereinstimmung mit allen Experimenten steht und zumindest als effektive Beschreibung eines Messvorgangs Bestand hat.

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

$$\underbrace{|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|}_{\hat{P}_i} \gamma = c_i |\lambda_i\rangle \Rightarrow |\lambda_i\rangle = \frac{|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|\gamma\rangle}{c_i}. \quad (1.6.5)$$

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

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

$$\langle x|\hat{P}_j|y\rangle = \langle x|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|y\rangle = (\langle y|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|x\rangle)^* = \langle y|\hat{P}_j|x\rangle^*. \quad (1.6.6)$$

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

$$\hat{P}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \hat{P}^2|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle = \hat{P}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (1.6.7)$$

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

$$P(\lambda_i) = \langle\gamma|\hat{P}_i|\gamma\rangle = \|\hat{P}_i|\gamma\rangle\|^2, \quad (1.6.8)$$

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

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{\hat{P}_i|\gamma\rangle}{\|\hat{P}_i|\gamma\rangle\|} \cong |\lambda_i\rangle. \quad (1.6.9)$$

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

Nun betrachten wir entartete Eigenwerte, d.h. die Observable \hat{A} hat Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ mit 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 wählen können,

$$\hat{A}|\lambda_i^{(a)}\rangle = \lambda_i|\lambda_i^{(a)}\rangle, \quad \langle\lambda_i^{(a)}|\lambda_j^{(b)}\rangle = \delta_{ij}\delta_{ab}. \quad (1.6.10)$$

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

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

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

$$\hat{P}_i = \sum_{a=1}^{d(\lambda_i)} |\lambda_i^{(a)}\rangle \langle \lambda_i^{(a)}|. \quad (1.6.11)$$

Eine naheliegende Verallgemeinerung des Messaxioms für entartete Eigenwerte ist gegeben durch

Postulat 3.b

Sei \hat{A} eine Observable mit (degenerierten) Eigenwerten λ_i und \hat{P}_i der in (1.6.11) 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

$$P(\lambda_i) = \langle \gamma | \hat{P}_i | \gamma \rangle. \quad (1.6.12)$$

Bei der Messung kollabiert die Wellenfunktion gemäß

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{\hat{P}_i |\gamma\rangle}{\|\hat{P}_i |\gamma\rangle\|}. \quad (1.6.13)$$

1.7 Kompatible und inkompatible Observablen

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 Eigenbasis von \hat{A} . Wir nehmen zunächst Nichtentartung an. Dann gilt:

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle. \quad (1.7.1)$$

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

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

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

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

(i) Nicht-degenerierter Fall

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

$$\hat{A}|a_i, b_i\rangle = a_i|a_i, b_i\rangle, \quad \hat{B}|a_i, b_i\rangle = b_i|a_i, b_i\rangle. \quad (1.7.2)$$

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

(ii) Degenerierter Fall

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

$$\hat{A}|a_i^{(n_i)}\rangle = a_i|a_i^{(n_i)}\rangle \quad \text{mit} \quad n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.7.3)$$

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} ,

$$\hat{B}|a_i^{(n_i)}\rangle = b_i^{(n_i)}|a_i^{(n_i)}\rangle \quad \text{mit} \quad n_i = 1, \dots, d(a_i). \quad (1.7.4)$$

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

$$|\gamma\rangle = \sum_{i, n_i} c_i^{(n_i)} |a_i, b_i^{(n_i)}\rangle. \quad (1.7.5)$$

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

$$|\gamma\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n_i=1}^{d(a_i)} c_i^{n_i} |a_i, b_i^{n_i}\rangle, \quad N = \left(\sum_{n_i=1}^{d(a_i)} |c_i^{(n_i)}|^2 \right)^{1/2}. \quad (1.7.6)$$

- 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

$$|\psi_1\rangle \rightarrow |a_i, b_i^{(k)}\rangle. \quad (1.7.7)$$

- 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.

1.8 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.

$$H(\lambda_i) = \frac{n_i}{n}, \quad \sum_i n_i = n \quad (1.8.1)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} &= \sum_i \lambda_i P(\lambda_i) = \sum_i \lambda_i |\langle \lambda_i | \gamma \rangle|^2 \\ &= \sum_i \lambda_i \langle \gamma | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \gamma \rangle = \langle \gamma | \left(\sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| \right) | \gamma \rangle. \end{aligned} \quad (1.8.2)$$

Wir lesen ab:

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle} = \langle \gamma | \hat{A} | \gamma \rangle \quad (\text{Mittelwert} = \text{Erwartungswert}) \quad (1.8.3)$$

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

$$(\Delta A)_{|\gamma\rangle}^2 := \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\gamma\rangle} - \langle \hat{A} \rangle_{|\gamma\rangle}^2 = \sum_i \lambda_i^2 P(\lambda_i) - \left(\sum_i \lambda_i P(\lambda_i) \right)^2, \quad (1.8.4)$$

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:⁸

⁸Diese Unschärferelation ist jedoch nicht vollkommen allgemein gültig. Vorsicht sei etwa bei periodischen Observablen gewahrt, s. z.B. F. Gières, arXiv:quant-ph/9907069.

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |[\hat{A}, \hat{B}]| \quad (\text{angewendet auf beliebigen Zustand}). \quad (1.8.5)$$

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 $|\psi\rangle$.

Dann erfüllen die jeweiligen Streuungen die Unschärferelation (1.8.5). **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 adiiert werden.⁹

Beweis der Unschärferelation (1.8.5):

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

$$|\phi_A\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle, \quad |\phi_B\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle. \quad (1.8.6)$$

Hierfür gilt:

$$\langle \phi_A | \phi_A \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (1.8.7)$$

$$= \langle \psi | (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}^2 - \langle \hat{A} \rangle^2) | \psi \rangle = (\Delta A)^2. \quad (1.8.8)$$

Außerdem gilt mit Hilfe der Schwarzschen Ungleichung, dass

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \leq \sqrt{|\langle \phi_A | \phi_A \rangle \langle \phi_B | \phi_B \rangle|} = (\Delta A)(\Delta B). \quad (1.8.9)$$

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

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| = \sqrt{(\text{Re} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2}. \quad (1.8.10)$$

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

$$\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (1.8.11)$$

⁹Weitere Details können z.B. in M.G. Raymer "Uncertainty principle for joint measurement of non-commuting variables", Am. J. Phys **62** (11), November 1994, gefunden werden.

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 $\langle \hat{C} \rangle$ rein imaginär. Damit ist in unserem Fall $\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \in \mathbb{R}$. Aber $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ ist weder hermitesch noch anti-hermitesch. Wir können jedoch

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}). \quad (1.8.12)$$

in einen hermiteschen und einen anti-hermiteschen Anteil zerlegen:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2} \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\text{Kommutator, anti-hermitesch}} + \frac{1}{2} \underbrace{\{\hat{A}, \hat{B}\}}_{\text{Anti-Kommutator, hermitesch}}. \quad (1.8.13)$$

Es folgt unmittelbar, dass

$$\text{Re}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{\hat{A}, \hat{B}\} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (1.8.14)$$

$$\text{Im}\langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle, \quad (1.8.15)$$

was uns zu

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad \Rightarrow \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (1.8.16)$$

führt. Wir bemerken abschließend, daß die Änderung der Begriffe der Objekteigenschaften und deren Messung in der Quantenmechanik nur inkompatible Observablen betreffen.

1.9 Hilbertraum, Ortsdarstellung, Wellenfunktion

1.9.1 Unendlich-dimensionale Zustandsräume

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

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle, \quad \langle a' | a'' \rangle = \delta_{a', a''} \quad (1.9.1)$$

In der Quantenmechanik besitzt 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 Eigenschaften der endlichen, diskreten Eigenbasis:

- Orthogonalität

$$\begin{aligned} \langle a' | a'' \rangle &= \delta_{a', a''} \rightarrow ? \\ \text{Idee: } \langle \xi' | \xi'' \rangle &= 0 \quad \text{für } \xi' \neq \xi'' \quad \text{und} \\ \sum_{a'} \langle a' | a'' \rangle &= \sum_{a'} \delta_{a', a''} = 1 \rightarrow \int d\xi' \langle \xi' | \xi'' \rangle = 1 \\ &\Rightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'') \end{aligned} \quad (1.9.2)$$

- Vollständigkeit

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{1} \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = \mathbb{1} \quad (1.9.3)$$

- Entwicklung in eine Basis

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \quad (1.9.4)$$

- Normierung

$$\sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1 \rightarrow \int d\xi' |\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 = 1 \quad (1.9.5)$$

- Skalarprodukt

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \sum_{a'} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | \beta \rangle \rightarrow \langle \alpha | \beta \rangle = \int d\xi' \langle \alpha | \xi' \rangle \langle \xi' | \beta \rangle \quad (1.9.6)$$

- Matrixelemente

$$\langle a'' | \hat{A} | a' \rangle = a' \delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi'' | \hat{\xi} | \xi' \rangle = \xi' \delta(\xi' - \xi'') \quad (1.9.7)$$

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

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle \Rightarrow c_i = \langle e_i | \gamma \rangle \quad (\langle e_i | \gamma \rangle) = \begin{pmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix} = \sum_i c_i \underline{e}_i \quad (1.9.8)$$

mit $\underline{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}, \underline{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix},$ usw.

Im unendlich-dimensionalen VR schreiben wir $|\psi\rangle = \int d\xi |\xi\rangle \psi(\xi)$.
($\psi(\xi)$) 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 $\delta(\xi - \xi')$.

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

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

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x\rangle \| < \epsilon \quad \forall n \geq n_0. \text{ (Supremums-Norm)} \quad (1.9.9)$$

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

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists n_0 : \quad \| |x_n\rangle - |x_m\rangle \| < \epsilon \quad \forall n, m \geq n_0. \quad (1.9.10)$$

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.

Postulat 1 (endgültig)

Der quantenmechanische Zustandsraum ist ein Hilbertraum.

1.9.2 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

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\text{Koeffizienten}} \quad (1.9.11)$$

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

$$|\alpha\rangle \rightarrow |x'\rangle. \quad (1.9.12)$$

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

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \rightarrow \int_{x' - \Delta/2}^{x' + \Delta/2} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle. \quad (1.9.13)$$

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

$$P = |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx \quad (dx = \text{Länge des infinitesimalen Intervalls}). \quad (1.9.14)$$

Insbesondere beträgt die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum zu finden

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = 1. \quad (1.9.15)$$

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

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.9.16)$$

1.9.3 Der Begriff der Wellenfunktion

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

$\forall x'$ ist $\langle x' | \alpha \rangle \in \mathbb{C}$, d.h. $\langle x' | \alpha \rangle$ 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:

$$\psi_\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \quad x' \mapsto \psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle. \quad (1.9.17)$$

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

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int dx' |x'\rangle \psi_\alpha(x') \quad (1.9.18)$$

Wir vergleichen dies mit dem endlich-dimensionalen Fall:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \alpha \rangle = \sum_i |e_i\rangle \alpha_i. \quad (1.9.19)$$

Daher entsprechen sich der

$$\text{Index } i \text{ der ONB-Vektoren } \{|e_i\rangle\} \leftrightarrow \text{Argument } x' \text{ der ONB-Vektoren } \{|x'\rangle\}. \quad (1.9.20)$$

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 quadratintegabel sein, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\alpha(x)|^2 < \infty$.

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

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

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

$$\forall |\alpha\rangle : \langle x' | \alpha \rangle = \psi_\alpha(x') \quad (1.9.21)$$

Auf der anderen Seite gilt aber auch

$$\langle x' | \alpha \rangle = \int dx \langle x' | x \rangle \langle x | \alpha \rangle = \int dx \psi_{x'}^*(x) \psi_\alpha(x). \quad (1.9.22)$$

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

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

1.10 Impulsoperator & kanonische Kommutatorrelationen

1.10.1 Aktive Translationen

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

- Passive Transformationen, bei 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

$$\begin{aligned} \hat{T}(\Delta x) : \text{Zustand bei } x &\mapsto \text{Zustand bei } x + \Delta x \\ \hat{T}(\Delta x) |x\rangle &= |x + \Delta x\rangle \end{aligned} \quad (1.10.1)$$

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

$$\begin{aligned} |x + \Delta x\rangle &= \hat{T}(\Delta x) |x\rangle = \hat{T}(\Delta x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \hat{T}(\Delta x) |x'\rangle \langle x' | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x' + \Delta x\rangle \langle x' | x \rangle \end{aligned} \quad (1.10.2)$$

Mit $x'' = x' + \Delta x$ erhalten wir daraus $\dots = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x'' - \Delta x | x \rangle$. Damit folgern wir $|x + \Delta x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x' - \Delta x | x \rangle}_{\psi_x(x' - \Delta x)}$, was dann

$$\hat{T}(\Delta x)\psi(x) = \psi(x - \Delta x) \quad (1.10.3)$$

bedeutet.

1.10.2 Translationen als Lie-Gruppe

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

- Gruppeneigenschaften:
 - Abgeschlossenheit: $\hat{T}(\Delta x) \cdot \hat{T}(\Delta x') = \hat{T}(\Delta x'')$ mit $\Delta x'' = \Delta x + \Delta x'$
 - Assoziativität: $[\hat{T}(\Delta x)\hat{T}(\Delta x')] \hat{T}(\Delta x'') = \hat{T}(\Delta x) [\hat{T}(\Delta x')\hat{T}(\Delta x'')]$
 - Existenz des Inversen: $[\hat{T}(\Delta x)]^{-1} = \hat{T}(-\Delta x)$
 - Existenz der Eins: $\hat{T}(0) = \mathbb{1}$
- Die Eigenschaft der *einparametrischen, kontinuierlichen Gruppe* bedeutet, dass $\hat{T}(\Delta x)$ durch einen Parameter $\Delta x \in \mathbb{R}$ bestimmt 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 $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \hat{T}(\Delta x) = \mathbb{1}$.

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:

$$(\hat{T}(\Delta x)|\alpha\rangle, \hat{T}(\Delta x)|\alpha\rangle) = (|\alpha\rangle, |\alpha\rangle). \quad (1.10.4)$$

Das bedeutet

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{T}^\dagger(\Delta x) = \mathbb{1}, \quad \text{d.h.} \quad \hat{T}^\dagger(\Delta x) = [\hat{T}(\Delta x)]^{-1}. \quad (1.10.5)$$

Wir betrachten nun *infinitesimale* Translationen

$$\hat{T}(dx) = \mathbb{1} - i\hat{K}dx + O(dx^2). \quad (1.10.6)$$

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

$$\hat{T}(dx) \text{ unitär} \leftrightarrow \hat{K} \text{ hermitesch.} \quad (1.10.7)$$

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:

$$\hat{T}(\Delta x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i\hat{K} \frac{\Delta x}{N} \right)^N. \quad (1.10.8)$$

Dies entspricht einer Definition der Exponentialfunktion:

$$\hat{T}(\Delta x) = \exp(-i\hat{K}\Delta x) \quad (T^{-1} = T^\dagger \Leftrightarrow K^\dagger = K) \quad (1.10.9)$$

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

$$[\hat{x}, \hat{T}(\Delta x)] = ? \quad (1.10.10)$$

Dazu berechnen wir:

$$\hat{x}\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = \hat{x}|x' + \Delta x\rangle = (x' + \Delta x)|x' + \Delta x\rangle, \quad (1.10.11)$$

$$\hat{T}(\Delta x)\hat{x}|x'\rangle = x'\hat{T}(\Delta x)|x'\rangle = x'|x' + \Delta x\rangle. \quad (1.10.12)$$

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

$$(\hat{x}\hat{T}(dx) - \hat{T}(dx)\hat{x})|x'\rangle = dx|x'\rangle + O(dx^2) \quad \implies \quad [\hat{x}, \hat{T}(dx)] = dx\mathbb{1} = dx. \quad (1.10.13)$$

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

$$[\hat{x}, \hat{K}] = i. \quad (1.10.14)$$

1.10.3 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 $\{, \}$:

$$\{A(q, p), B(q, p)\}_{\text{PB}} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}. \quad (1.10.15)$$

- Unter einer aktiven Translation um Δq transformiert eine Funktion $F(q, p)$ wie¹⁰

$$F(q, p) \mapsto \tilde{F}(q, p) = F(q + \Delta q, p). \quad (1.10.16)$$

Im infinitesimalen Fall bedeutet das

$$\tilde{F}(q, p) = \left(1 + dq \frac{\partial}{\partial q}\right) F(q, p) = F + \delta F \quad (1.10.17)$$

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

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

¹⁰Dass $F(q, p) \mapsto \tilde{F}(p, q) = F(q + \Delta q, p)$ 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.

- Ein *Beweis* dieses Zusammenhangs in der QM ist nicht möglich. Vielmehr gehen wir auch hier wieder heuristisch vor: Wir versuchen, die Strukturen aus der Klassischen Mechanik so gut wie möglich auf die QM zu übertragen. Die Sinnhaftigkeit dieser Übertragung muss sich dann ex post zeigen.
- Eine genauere Begründung für die Identifikation von \hat{p} mit dem Generator der Translationen bedarf einer Definition der Translation angewendet auf Operatoren (bisher hat unser Translationsoperator nur auf Zustände gewirkt!). Wir kommen später mit der Einführung des Heisenbergbildes darauf zurück (siehe Diskussion um Gl. (2.4.17)).
- \hat{p} und \hat{K} tragen unterschiedliche Einheiten:

$$\begin{aligned} \psi(x - dx) &= (\mathbb{1} - idx\hat{K})\psi(x), \\ [\hat{K}] &= \frac{1}{[\text{Länge}]}, \quad [\text{Impuls}] = \frac{[\text{Wirkung}]}{[\text{Länge}]} = \frac{Js}{m} \end{aligned} \quad (1.10.18)$$

Es bedarf einer fundamentalen Naturkonstanten mit Einheiten einer Wirkung:

$$\hat{p} = \hbar\hat{K}, \quad [\hbar] = \text{Wirkung} \quad (1.10.19)$$

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

Wegen (1.10.14) gilt die kanonische Kommutatorrelation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (1.10.20)$$

Als Anwendung der allgemeinen Unschärferelation (1.8.5) finden wir damit, dass Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf messbar sein können:

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{Heisenbergsche Unschärferelation.} \quad (1.10.21)$$

1.10.4 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 (1.10.20) 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

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (1.10.22)$$

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

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.10.23)$$

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

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (1.10.24)$$

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) ,

$$\{q_i, p_j\}_{\text{PB}} = \delta_{ij}. \quad (1.10.25)$$

Wir stellen fest, dass die quantenmechanischen Kommutatorrelationen aus den klassischen Poisson-Bracket-Relationen durch die Ersetzung $[\cdot, \cdot] \equiv i\hbar\{\cdot, \cdot\}_{\text{PB}}$ folgen. Diese Vorgehensweise heißt kanonische Quantisierung:

$$\begin{aligned} \text{Klassische Phasenraumkoordinaten} &\mapsto \text{quantenmechanische Operatoren} \\ \{\cdot, \cdot\}_{\text{PB}} &\mapsto \frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot]. \end{aligned} \quad (1.10.26)$$

In den Übungen werden wir sehen, dass die Ersetzung klassischer Funktionen auf dem Phasenraum durch nicht-kommutierenden Operatoren den Zusammenhang $[\cdot, \cdot] \equiv i\hbar\{\cdot, \cdot\}_{\text{PB}}$ erzwingt. Diese Erkenntnis kann auch als eine alternative Motivation der Relationen (1.10.24) 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. Deshalb benötigt man einen Faktor i .
- $[\cdot, \cdot]_{\text{PB}} = \left[\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p}\right] = (\text{kg m}^2)^{-1}\text{s}$, daher ist der Faktor $\sim \hbar$ aus Einheitengründen nötig.

1.10.5 Darstellung von \hat{p} im Ortsraum

Betrachte den infinitesimalen Translationsoperator in einer Dimension,

$$\hat{T}(\delta x) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{p}\delta x, \quad \delta x : \text{infinitesimal}. \quad (1.10.27)$$

Wir berechnen seine

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

$$\hat{T}(\delta x)|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x' - \delta x | \alpha \rangle. \quad (1.10.28)$$

Eine Taylor-Entwicklung ergibt

$$\langle x' - \delta x | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha \rangle - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle + \dots \quad (1.10.29)$$

und damit

$$\psi_\alpha(x' - \delta x) = \psi_\alpha(x') - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \psi_\alpha(x') + \dots \quad (\text{Taylor-Entwicklung}). \quad (1.10.30)$$

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

$$\hat{p}|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar \partial_{x'}) \langle x'|\alpha\rangle, \quad (1.10.31)$$

$$\hat{p} = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar \partial_{x'}) \langle x'|. \quad (1.10.32)$$

- Wirkung auf Wellenfunktionen: Aus (1.10.32) folgt die Ortsdarstellung des Impulsoperators,

$$p(x, x') = \langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar \partial_x \delta(x - x'). \quad (1.10.33)$$

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

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (1.10.34)$$

Insbesondere gilt

$$\langle \beta|\hat{p}|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') (-i\hbar \partial_{x'}) \psi_\alpha(x'). \quad (1.10.35)$$

1.10.6 Generalisierte Eigenvektoren und Gel'fandsche Raumtripel*

- Orts- und Impulsoperator sind lineare Operatoren auf dem Raum \hat{L}^2 der quadratintegrablen Funktionen:

$$\begin{aligned} \hat{x} : \psi(x) &\mapsto x\psi(x), \text{ mit } D(\hat{x}) = \{\psi \in L^2 | x\psi \in L^2\} \\ \hat{p} : \psi(x) &\mapsto \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi, \text{ mit } D(\hat{p}) = \{\psi \in L^2 | \partial_x \psi \in L^2\} \end{aligned} \quad (1.10.36)$$

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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hbar}{i} (x\partial_x - \partial_x x) = \frac{\hbar}{i} (x\partial_x - (\partial_x x) - x\partial_x) = -\frac{\hbar}{i} (\partial_x x) = i\hbar \quad (1.10.37)$$

- Der Impulsoperator ist hermitisch, jedoch besitzt sein adjungierter Partner einen größeren Definitionsbereich:

Wir betrachten $\hat{p}\psi = \hbar/i \partial_x \psi$ für alle $\psi \in D_{max}(\hat{p}) = \{\psi \in L^2([a, b], dx) | \psi' \in L^2([a, b], dx), \psi(a) = \psi(b) = 0\}$, den quadrat-integrablen Funktionen auf dem 1D Intervall $[a, b]$ mit Dirichlet-Randbedingungen.

$$\Rightarrow \langle \phi|\hat{p}|\phi\rangle = \int_a^b dx \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \phi^*(x) \psi(x) \Big|_a^b - \frac{\hbar}{i} \int_a^b dx (\partial_x \phi^*(x)) \psi(x) \quad (1.10.38)$$

$$= \int_a^b dx \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \phi(x) \right)^* \psi(x) = \langle \hat{p}\phi|\psi\rangle \quad (1.10.39)$$

Damit ist \hat{p} hermitisch. Da in 1.10.39 lediglich die Dirichlet-Randbed. von ψ eingehen, ist der max. Definitionsbereich des Operators \hat{p} , $D_{max}(\hat{p}^\dagger) = \{\phi \in L^2([a, b], dx), \phi' \in L^2([a, b], dx)\}$ größer als $D_{max}(\hat{p}) \subset D_{max}(\hat{p}^\dagger)$.

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

Ganz allgemein findet man derartige Komplikationen für Observable auf einen HR \mathcal{H} .

1. Deren Spektrum nicht beschränkt ist; ihr Def. Bereich kann nur ein Teil des Hilbertraums sein. Bsp: \hat{p} kann auf $L^2([a, b], dx)$ beliebig große, positive und negative Eigenwerte aufweisen;
2. deren Spektrum einen kontinuierlichen Teil aufweist; ihre entsprechenden Eigenvektoren gehören zu einem Raum, der größer als \mathcal{H} ist. Bsp: Die Eigenfunktionen des Ortsoperators auf $\mathcal{H} = L^2([a, b], dx)$ sind nicht quadratintegrabel: Das Integral über $|\delta(x - x_0)|^2$ ist nicht definiert.

Von Neumann hat gezeigt, dass einer oder mehr Operatoren, welche in kanonische Vertauschungsrelationen $[q_i, p_j] \sim \delta_{ij}$ vorkommen ein unbeschränktes Spektrum besitzen.

Damit ist die Def. solcher Operatoren immer nur auf einem Unterraum von \mathcal{H} möglich, was z.B. zur Notwendigkeit der Einführung Randbedingungen führt.

Die sich ergebenden Unterräume von \mathcal{H} , zusammen mit \mathcal{H} sowie den 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 Schwarz-Raum $S(\mathbb{R})$ der quadrat-integrablen 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* $\omega_\psi \in S'(\mathbb{R})$,

$$\omega_\psi : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto \omega_\psi(\phi) = \int dx \quad \psi^*(x)\phi(x) \quad (1.10.40)$$

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

$$\delta_{x_0} : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto \delta_{x_0}(\phi) = \phi(x_0) \quad (1.10.41)$$

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

$$l_p : S(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C} : \phi \mapsto l_p(\phi) = \int dx \quad \psi_p^*(x)\phi(x) \quad (1.10.42)$$

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 $L^2(\mathbb{R}, dx)$! All dies sollte 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 am ende den Limes unendlichen Volumens betrachten.
- Ggf. Distributionen mit Testfunktionen ausschmieren (\rightarrow Wellenpakete).

Wer sich schlauer machen möchte, sei auf mathematische Lehrbücher verwiesen, z.B. U.F. Müller: QM (Oldenburg, München 2000), J.M. Jauch: Foundations of QM (Addison-Wesley, Reading 1968). A nice introduction is found in F. Gieres, arXiv:quant-ph/9907069v2.

1.11 Wellenfunktionen im Impulsraum

1.11.1 Wellenfunktion der Impulseigenzustände

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

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p-p'). \quad (1.11.1)$$

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

$$|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|\alpha\rangle = \int dp |p\rangle \underbrace{\phi_\alpha(p)}_{\text{Wellenfunktion im Impulsraum}}. \quad (1.11.2)$$

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 (1.10.31) gewinnen wir durch Multiplikation beider Seiten mit $\langle x|$, dass

$$\forall |\alpha\rangle : \quad \langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|\alpha\rangle. \quad (1.11.3)$$

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

$$p\langle x|p\rangle = \langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|p\rangle. \quad (1.11.4)$$

$$(1.11.5)$$

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

$$\partial_x\langle x|p\rangle = \frac{i}{\hbar}p\langle x|p\rangle \quad (1.11.6)$$

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

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

Bestimmen wir nun noch die Normierung. Wir leiten sie aus der Ortseigenfunktion $\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$ her. Nun berechnen wir

$$\langle x'|x\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|x\rangle \quad (1.11.7)$$

$$= \int dp' |N|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}p'(x'-x)\right). \quad (1.11.8)$$

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

$$\langle x | p \rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}. \quad (1.11.9)$$

1.11.2 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

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \alpha \rangle. \quad (1.11.10)$$

Mithilfe des soeben berechneten Zusammenhangs (1.11.9) und $\langle p | \alpha \rangle = \phi_\alpha(p)$ wird daraus

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \phi_\alpha(p). \quad (1.11.11)$$

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

$$\phi_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi_\alpha(x) \quad (1.11.12)$$

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

$$\mathcal{F} : \psi_\alpha(x) \mapsto \mathcal{F}[\psi_\alpha](p) = \phi_\alpha(p), \quad (1.11.13)$$

$$\mathcal{F}^{-1} : \phi_\alpha(p) \mapsto \mathcal{F}^{-1}[\phi_\alpha](x) = \psi_\alpha(x), \quad (1.11.14)$$

Kommentare

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

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}, \quad \text{mit } k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.11.15)$$

also

$$\text{Teilchen mit Impuls } p \leftrightarrow \text{Ebene Welle mit Wellenzahl } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}. \quad (1.11.16)$$

Dies ist die DeBroglie-Relation für Materiewellen,

$$p = \hbar k. \quad (1.11.17)$$

Man kann diese Relation experimentell, z.B., mittels Elektronstreuung an Kristallgittern, untersuchen und damit die Naturkonstante $\hbar = h/(2\pi) = (2\pi)^{-1}6.67 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ messen.

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

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar, \quad (1.11.18)$$

$$\hat{x}\phi(p) = +i\hbar\partial_p\phi(p). \quad (1.11.19)$$

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

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad \langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle \quad (1.11.20)$$

und

$$\int d^3x |\mathbf{x}\rangle\psi(\mathbf{x}) = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}\rangle = -i\hbar\nabla_x\psi(\mathbf{x}). \quad (1.11.21)$$

Wir erhalten daraus

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{x}} \phi_\alpha(\mathbf{p}), \quad (1.11.22)$$

$$\phi_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{x}} \psi_\alpha(\mathbf{x}), \quad (1.11.23)$$

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{x}}. \quad (1.11.24)$$

1.11.3 Beispiel: Gaußsche Wellenfunktion

Wir betrachten einen Zustand mit Wellenfunktion im Ortsraum

$$\psi_\alpha(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + ikx}, \quad a \in \mathbb{R}^+. \quad (1.11.25)$$

In den Übungen werden wir folgende Erwartungswerte berechnen:

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

Daraus folgt sofort

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.11.26)$$

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

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

$$\text{Lokalisierung im Ortsraum-Raum} \quad \leftrightarrow \quad \text{Delokalisierung im Impulsraum} \quad (1.11.27)$$

$$\Delta x \rightarrow 0 \quad \leftrightarrow \quad \Delta p \rightarrow \infty \quad (1.11.28)$$

Anders ausgedrückt:

$$|\alpha\rangle \text{ stark lokalisiert im } x\text{-Raum} \leftrightarrow \phi_\alpha(p) \text{ signifikant über weiten } k\text{-Bereich} \quad (1.11.29)$$

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

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 widersprechen, wiederholt vorgeschlagen¹, 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.

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 $|\alpha, t_0; t\rangle$ schreiben. Insbesondere gilt in dieser Notation

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle. \quad (2.1.1)$$

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

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle. \quad (2.1.2)$$

Wir finden folgende Eigenschaften:

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

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

- Transitivität: $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$, wobei $t_0 \leq t_1 \leq t_2$.
- Stetigkeit: $\lim_{dt \rightarrow 0} \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} = \hat{U}(t_0, t_0)$.

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

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i \hat{\Omega} dt. \quad (2.1.3)$$

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. Handbuch der Physik XXIV, Springer, Berlin, 1933. Allerdings kann ein Operator \hat{t} definiert werden, der schwächere Eigenschaften erfüllen (insbesondere Hermitizität). Eine Diskussion, inwieweit dies ausreicht, um einen Zeitoperator sinnvoll zu definieren, findet sich z.B. in V. S. Olkhovsky, Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy, and Foundations of Self-Consistent Time Analysis of Quantum Processes, Advances in Mathematical Physics, vol. 2009, Article ID 859710, 83 pages, 2009. doi:10.1155/2009/859710, <http://www.hindawi.com/journals/amp/2009/859710/cta/> oder K. Boström, arXiv: quant-ph/0301049,0411175.

Dies erfüllt alle obigen Eigenschaften, falls $\hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}$. $\hat{\Omega}$ generiert also die Zeittranslation um dt .

Wie im Kontext von \hat{T} sowie des Impulses interpretieren wir $\hat{\Omega}$, indem wir uns an der klassischen Dynamik orientieren: *Klassisch* generiert die Hamiltonfunktion die Zeittranslation. Wir identifizieren deshalb

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

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

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

Bemerkung: Die Konstanten 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.

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

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

Dies entspricht:

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

Eine Taylorentwicklung zur ersten Ordnung,

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

führt uns zu:

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

Mit der Gleichung $|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0; t\rangle$ erhalten wir daraus die

Schrödingergleichung für die Zeitentwicklung eines Zustands:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \hat{H} |\alpha, t_0; t\rangle. \quad (2.1.8)$$

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

- Falls \hat{H} 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 $\hat{H} = \hat{H}(t)$ 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*

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

Man kann beweisen, dass der durch die Dyson-Reihe gegebene Operator $\hat{U}(t, t_0)$ in der Tat die Schrödingergleichung

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

erfüllt. Für den Spezialfall $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] = 0, \forall t_i, t_j$, vereinfacht sich die Dyson-Reihe zu

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

Bemerkungen:

- Die Zeiten sind hierin 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. Das führt zurück auf $\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right\}$.

- Die vorige Rechnung gilt allgemein, wenn $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] = 0$ 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} in den Vielfachintegralen 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,

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

worin die 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 \mathfrak{T} ,

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

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:

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

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

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

Dieses zeitgeordnete Exponentialintegral lässt sich auch als zeitgeordnetes Produkt schreiben,

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

was insbesondere für die numerische Auswertung brauchbar 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*.

Im folgenden betrachten wir $\hat{H} = \text{konst.}$ in der Zeit. Von besonderem Interesse sind die

Energie-Eigenzustände:

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

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

- Wir betrachten die Zeitentwicklung der $|a\rangle$:

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

Das bedeutet, dass sich die Energie-Eigenzustände nur mit einem Phasenfaktor multipliziert werden. Insbesondere gilt für den Erwartungswert bzgl. eines beliebigen Operators \hat{B} :

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

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

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

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

Der Zustand zur Zeit t ist dann

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

mit $c_a(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}c_a(t_0)$. Dies ist ein *nicht-stationärer Zustand*.

Wir formulieren folgende **allgemeine Lösungsstrategie**:

- Entwickle $|\alpha, t_0\rangle$ in 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 ist $|\alpha, t\rangle = \sum_a c_a(t)|a\rangle$ 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,

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

2.2 Schrödinger-Gleichung für Wellenfunktionen und Propagator

Wir können die Schrödinger-Gleichung (SG)

$$i\hbar \partial_t |\alpha, t\rangle = \hat{H} |\alpha, t\rangle \quad (2.2.1)$$

in eine Gleichung für $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle$ umschreiben. Im einfachsten Fall eines *zeitunabhängigen* Hamiltonoperators besitzt \hat{H} die Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.2.2)$$

Hier ist $\hat{p}^2/2m$ der Operator der kinetischen und $V(\hat{\mathbf{x}})$ der Operator der potentiellen Energie. Nun werten wir die Schrödingergleichung in der Form $\langle \mathbf{x} | i\hbar\partial_t | \alpha, t \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{H} | \alpha, t \rangle$ mithilfe folgender Identitäten aus:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \alpha, t \rangle = -i\hbar\nabla\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.3)$$

$$\langle \mathbf{x} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \alpha, t \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.4)$$

$$\langle \mathbf{x} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \alpha, t \rangle = V(\mathbf{x})\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle, \quad (2.2.5)$$

$$\implies i\hbar\partial_t\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle. \quad (2.2.6)$$

Damit erhalten wir die Schrödingergleichung im Ortsraum,

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.2.7)$$

Beachte: Wenn $\psi(\mathbf{x}, t)$ Lösung ist, so ist $\psi(\mathbf{x}, -t)$ keine Lösung, weil die SG eine DGL erster Ordnung in t ist. $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ hingegen ist eine Lösung. Dies bedeutet, daß die Schrödingergleichung invariant unter der Zeitumkehr $t \rightarrow -t$, 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 zeitinvariante 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, um eine Norm-erhaltende Zeitentwicklung und damit die Wahrscheinlichkeitsinterpretation des Quadrats der Wellenfunktion sicherzustellen, $\hat{U}^T = U^{-1}$. Die SG wäre damit reell, und es gäbe keine Möglichkeit zur Implementierung der Zeitumkehrinvarianz.

Auch im Wellenfunktionsbild ergibt sich aus der SG die einfache Zeitentwicklung für *Energie-Eigenzustände* $|a, t_0\rangle$, welche durch $\hat{H}|a, t_0\rangle = E_a|a, t_0\rangle$ definiert sind:

$$\psi_{a,t_0}(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}\psi_{a,t_0}(\mathbf{x}, t_0). \quad (2.2.8)$$

Eingesetzt in die SG ergibt dies die **stationäre Schrödingergleichung**, deren Lösungen die Wellenfunktionen der Energie-Eigenzustände darstellen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t) = E\psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{Erwin Schrödinger (1926)}. \quad (2.2.9)$$

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:

$$\hat{H}\chi_n(\mathbf{x}) = E_n\chi_n(\mathbf{x}), \quad \int d^3x \chi_m^*(\mathbf{x}) \chi_n(\mathbf{x}) = \delta_{mn} \quad (2.2.10)$$

- Entwickle die Wellenfunktion des Anfangszustands in dieser Basis:

$$\psi(\mathbf{x}, t_0) = \sum_n c_n \chi_n(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad c_n = \int d^3y \chi_m^*(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.11)$$

- Es folgt sofort, dass

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3y \sum_n \chi_n^*(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

Damit erhält man

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) \psi(\mathbf{y}, t_0), \quad (2.2.13)$$

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \chi_n^*(\mathbf{y}) \chi_n(\mathbf{x}). \quad (2.2.14)$$

(2.2.14) stellt den *Propagator* dar.

Wir demonstrieren dies am **Beispiel des kräftefreien Teilchens in einer Dimension**, dessen Hamiltonoperator keinen Potentialterm aufweist,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.2.15)$$

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

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad , \quad u_{-k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \quad (2.2.16)$$

aufgespannt. Die zugehörigen Energie-Eigenwerte lauten

$$E_{\pm k} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (2.2.17)$$

Wir haben also *zweifach entartete* Energie-Eigenwerte aufgrund der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie $x \rightarrow -x$ (Parität) von \hat{H} . Wir wollen nun die volle SG $i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{x}, t)$, ausgehend von dem Anfangszustand

$\psi(x, 0) = (a/\pi)^{\frac{1}{4}} \exp(-ax^2/2)$, lösen, und folgen dazu unserem Lösungsschema:

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

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk c(k) e^{ikx}, \quad \text{mit} \quad c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (2.2.18)$$

2. Schritt: Zeitpropagation:

$$\psi(x, t) = \int dk c(k) e^{ikx} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \int dk c(k) e^{ikx - i\hbar(k^2/2m)t}. \quad (2.2.19)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 \pm ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}} \quad (2.2.20)$$

berechnen wir

$$c(k) = \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-k^2/(2a)}, \quad \psi(x, t) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1+i\gamma(t)}} e^{-\frac{1}{2}(x^2 a/(1+i\gamma(t)))}, \quad (2.2.21)$$

mit $\gamma(t) = \hbar a(t - t_0)/m$. Aus

$$\exp\left\{-\frac{x^2}{2} \frac{a}{1+i\gamma(t)}\right\} = \exp\left\{-\frac{x^2 a}{2(1+\gamma^2(t))}\right\} \exp\left\{i \frac{x^2 a \gamma(t)}{2(1+\gamma^2(t))}\right\} \quad (2.2.22)$$

folgt, dass die Breite des Gaußpakets entsprechend der Zeitabhängigkeit von γ zunimmt. Nach weiterer expliziter Rechnung (siehe Übung) ergibt sich die Ortsunschärfe zur Zeit t zu

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)_{t=0}^2} t^2. \quad (2.2.23)$$

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

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t=0}^2 + \frac{(\Delta p)^2}{m^2} t^2. \quad (2.2.24)$$

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

Zusätzliche Anmerkungen:

- Das Wellenpaket ist zu allen Zeiten normiert:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 &= \int dx \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} \psi^*(k, t_0) \psi(k', t_0) e^{-i(k-k')x} e^{i\frac{\hbar}{2m}(t-t_0)(k-k')} \\ &= \int \frac{dk dk'}{2\pi} \psi^*(k, t_0) \psi(k', t_0) 2\pi \delta(k - k') \exp \left\{ i \frac{\hbar}{2m} (t - t_0) (k - k') \right\} \\ &= \int dk |\psi(k, t_0)|^2 = 1 \quad (\text{Parseval Theorem}). \end{aligned} \quad (2.2.25)$$

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

$$\psi_a(x, t_0) = \left(\frac{a}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{xa}{2} \right\} \quad (2.2.26)$$

Im Limes $1/a \rightarrow 0$ stellt

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \psi_a(x, t_0) = \delta(x) \quad (2.2.27)$$

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

$$(\Delta x)_{t=t_0} = \sqrt{\frac{1}{2a}} \xrightarrow{a \rightarrow \infty} 0 \quad (2.2.28)$$

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

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\frac{1}{2a}} [1 + \gamma^2(t)]^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{\gamma \gg 1} \frac{\hbar}{m} \sqrt{\frac{a}{2}} (t - t_0) \quad (2.2.29)$$

linear mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit $v = (\Delta p)_{t=t_0}/m = \hbar\sqrt{a/2}/m$ auseinander. Wir sehen, 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.

- Wir betrachten noch die "lokale Wellenzahl"

$$\begin{aligned} k(x) &= x^{-1} \arg[\psi(x, t)] \\ &= \frac{\phi(t)}{x} + \frac{a}{2} \frac{\gamma(t)}{1 + \gamma(t)} x, \end{aligned} \quad (2.2.30)$$

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

$$k(x) \cong \frac{1}{2\hbar} m \frac{x}{t - t_0} \quad (2.2.31)$$

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

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,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.32)$$

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

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.2.33)$$

finden wir

$$\langle \mathbf{x} | \alpha, t \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) \int d^3 y | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \alpha, t_0 \rangle \quad (2.2.34)$$

$$\Rightarrow \psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3 y \underbrace{\langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle}_{G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0)} \psi(\mathbf{y}, t_0). \quad (2.2.35)$$

In der Tat gilt, in Übereinstimmung mit (2.2.14),

$$\langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle = \sum_n \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | n \rangle \langle n | \mathbf{y} \rangle \quad (2.2.36)$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \chi_n^*(\mathbf{y}) \chi_n(\mathbf{x}). \quad (2.2.37)$$

Wir haben also folgende wichtige Interpretation des Propagators:

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) = \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{y} \rangle. \quad (2.2.38)$$

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

$$\begin{aligned} G(t-t_0) &= \int d^3 y G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t_0) &&= \int d^3 y \sum_n \langle \mathbf{y} | e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} | n \rangle \langle n | \mathbf{y} \rangle \\ &= \int d^3 y \sum_n \langle n | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} &&= \sum_n \langle n | \underbrace{\int d^3 y | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | n \rangle}_{=1} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)}. \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

$G(t-t_0)$ erhält Information über das Energiespektrum und führt zur Beschreibung der Quantenmechanik mittels Greenscher Funktionen. Diese spielen insbesondere in der Quantenfeldtheorie eine wichtige Rolle.

2.3 Wahrscheinlichkeitsstrom & Kontinuitätsgleichung

Wir betrachten die Größe $\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)$. 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

$$P(\text{Teilchen ist zur Zeit } t \text{ im Volumen } V) = \int_V d^3 \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.1)$$

Die Änderung von $\rho(\mathbf{x}, t)$ mit der Zeit wird in der *Kontinuitätsgleichung* beschrieben.

Ausgangspunkt für ihre Herleitung sind die Schrödingergleichung und ihre komplex Konjugierte

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.3.2)$$

$$-i\hbar \partial_t \psi^*(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V^*(\mathbf{x}) \right) \psi^*(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.3)$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) &= (\partial_t \psi^*(\mathbf{x}, t))\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^*(\mathbf{x}, t)\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [-(\Delta \psi^*)\psi + \psi^* \Delta \psi] + \frac{i}{\hbar}(V^* - V)\psi^* \psi.\end{aligned}\quad (2.3.4)$$

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

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi). \quad (2.3.5)$$

Diese Gleichung beschreibt die lokale Erhaltung eines Stroms,

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (2.3.6)$$

worin der räumliche Anteil \mathbf{j} des Stroms durch

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \quad (2.3.7)$$

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 (2.3.6) über V . Dies ergibt

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \mathbf{j} = - \int_F d\mathbf{F} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t). \quad (2.3.8)$$

Im zweiten Schritt haben wir den Gaußschen Integralsatz angewendet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Volumen V ändert sich gemäß der aus dem Volumen heraus bzw. hineinströmenden Wahrscheinlichkeitsdichte. Diese Kontinuitätsgleichung ist uns von der Hydrodynamik inkompressibler Flüssigkeiten her vertraut.

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

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (\text{Normerhalt}). \quad (2.3.9)$$

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 (2.3.8) verhält sich wie

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\partial K(r)} d\mathbf{F} \cdot \mathbf{j} \lesssim \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi \frac{r^2}{r^3} \rightarrow 0, \quad (2.3.10)$$

was (2.3.9) entspricht.

Bemerkung: Die Erhaltung der Norm erfordert, dass das Potential reell ist,

$$V(\mathbf{x}) = V^*(\mathbf{x}). \quad (2.3.11)$$

Komplexe Potentiale $V(\mathbf{x}) \neq V^*(\mathbf{x})$ beschreiben dagegen Prozesse, bei denen die Teilchenzahl nicht erhalten ist, z.B. die Absorption oder den Verlust von Teilchen.

Wir beschäftigen uns nun noch etwas näher mit der physikalischen Interpretation von $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$: Aus $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ folgt

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{x}, t) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\mathbf{x}, t) (\hat{\mathbf{p}} \psi^*(\mathbf{x}, t))^* \right). \quad (2.3.12)$$

Damit ergibt sich, daß

$$\int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle(t)}{m}. \quad (2.3.13)$$

Dieser Zusammenhang wird weiter relevant in Kombination mit folgender Beobachtung:

Wir schreiben die Wellenfunktion mittels der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie einer reellen Phase S als

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{x}, t)}, \quad (2.3.14)$$

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} e^{-\frac{i}{\hbar} S} \left(\frac{\nabla \rho}{2\sqrt{\rho}} e^{\frac{i}{\hbar} S} + \sqrt{\rho} e^{\frac{i}{\hbar} S} \frac{i}{\hbar} \nabla S \right) = \frac{1}{2} \nabla \rho + \frac{i}{\hbar} \rho \nabla S. \quad (2.3.15)$$

Daraus erhalten wir

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \frac{\nabla S(\mathbf{x}, t)}{m}, \quad (2.3.16)$$

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

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{m} \nabla S(\mathbf{x}, t), \quad (2.3.17)$$

und der Erwartungswert des Impulses lautet $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle(t) = m \int d^3x \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Damit nimmt die Kontinuitätsgleichung die folgende vertraute Form an:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.3.18)$$

Allerdings ist in der konventionellen Kopenhagenschen Interpretation der Quantenmechanik die Identifizierung von $\mathbf{v} = \nabla S(\mathbf{x}, t)/m$ mit der Geschwindigkeit des Teilchens nur eine rein formale Analogie, da es hier **keine feste Trajektorie für ein Teilchen mit festem Impuls** gibt.

Bemerkung: Die Gleichung $\mathbf{v} = \nabla S(\mathbf{x}, t)/m$ ist Ausgangspunkt der sogenannten “Bohmschen Mechanik”, einer von der Kopenhagenschen Interpretation abweichenden Interpretation der Quantenmechanik, in der \mathbf{v} das Geschwindigkeitsfeld des Teilchens darstellt.

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 Basissätze. Aus diesen ergeben sich die Wahrscheinlichkeiten für alle Meßgrößen.

Wir betrachten daher im folgenden die Zeitentwicklung der Matrixelemente von Operatoren bzgl. einer gegebenen Basis,

$$U(t) : \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \quad \text{bei } t = t_0 = 0 \quad \longrightarrow \quad \langle \alpha | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0) | \beta \rangle \quad \text{für } t > 0. \quad (2.4.1)$$

Hier rechnen wir die Zeitentwicklungsoperatoren \hat{U} den Zuständen $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ zu. Alternativ können wir die Zeitentwicklung der Matrix-Elemente aber auch über eine Zeitentwicklung der Operatoren anstelle der Zustandsvektoren darstellen. In dieser Form ergibt sich die Zeitentwicklung wie folgt:

$$U(t) : \hat{A} \quad \longrightarrow \quad \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0), \quad (2.4.2)$$

$$U(t) : |\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad |\alpha\rangle. \quad (2.4.3)$$

Im folgenden schreiben wir: $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)$.

- Die Observable im Heisenberg-Bild ist definiert als

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t), \quad (2.4.4)$$

wobei \hat{A}_S den Operator im Schrödinger-Bild bezeichnet. Insbesondere stimmen die Operatoren zu einem (willkürlich gewählten) Referenzzeitpunkt $t_0 \equiv 0$ überein,

$$\hat{A}_H(t = 0) = \hat{A}_S. \quad (2.4.5)$$

- Der Zustandsvektor ist zeitunabhängig und

$$\forall t : |\alpha, t\rangle_H = |\alpha, t_0 = 0\rangle \equiv |\alpha\rangle_H. \quad (2.4.6)$$

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

$${}_S\langle \alpha, t | \hat{A}_S | \alpha, t \rangle_S = {}_H\langle \alpha | \hat{A}_H(t) | \alpha \rangle_H. \quad (2.4.7)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= \frac{d}{dt} \left(\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t) \right) \\ &= (\partial_t \hat{U}^\dagger(t)) \hat{A}_S \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \partial_t \hat{U}(t). \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= \frac{1}{i\hbar} (-\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A}_S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{H} \hat{U}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} (-\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U}}_{\hat{A}_H(t)} + \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U}}_{\hat{A}_H(t)} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t)]. \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Den Hamilton-Operator im Heisenberg-Bild bezeichnen wir als

$$\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hat{H}_H(t), \quad (2.4.10)$$

und erhalten damit die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \quad (2.4.11)$$

Wenn \hat{H} zeitunabhängig ist², 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

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \left(\partial_t \hat{A} \right)_H + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}], \quad (2.4.12)$$

$$\text{mit } \left(\partial_t \hat{A} \right)_H = \hat{U}^\dagger(t) [\partial_t \hat{A}_S(t)] \hat{U}(t). \quad (2.4.13)$$

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 (2.4.12) das quantenmechanische Analogon zu

$$\frac{d}{dt} F(q, p, t) = \partial_t F(q, p, t) + \{F(q, p, t), H\}_{\text{PB}}. \quad (2.4.14)$$

Hier ist $\{F, G\}_{\text{PB}} = (\partial_q F)(\partial_p G) - (\partial_p F)(\partial_q G)$ die klassische Poisson-Klammer. Berücksichtigt man, daß bei der kanonischen Quantisierung die Poissonklammer gemäß

$$\{ \quad , \quad \} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\quad , \quad] \quad (2.4.15)$$

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

- Eine ähnliche Analogie besteht für den Translationsoperator. Anstelle von $|x\rangle \rightarrow |x + \Delta x\rangle = \hat{T}(\Delta x)|x\rangle$ kann man die Translation in den Observable vornehmen,

$$\hat{A} \rightarrow \hat{T}^\dagger(\Delta x) \hat{A} \hat{T}(\Delta x). \quad (2.4.16)$$

Infinitesimal ergibt sich wegen $\hat{T}(\delta x) = \mathbb{1} - i\delta x \hat{K}$ für δx 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,

$$\begin{aligned} F(q, p) \rightarrow \tilde{F}(q, p) &= F(q + \delta q, p) = F(q, p) + \delta F, \\ \text{mit } \delta F &= \delta q \partial_q F = \delta q \{F, Q\}, \quad Q = p. \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

Nach Quantisierung mittels (2.4.15) erhalten wir daraus den Zusammenhang $\hat{K} \leftrightarrow \hat{p}/\hbar$, wie bereits in Gl. (1.10.19) angegeben.

² $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$ gilt ganz allgemein, wenn $[\hat{H}(t_i), \hat{H}(t_j)] = 0$.

2.4.2 Teilchen im Potential und Ehrenfest-Theorem

Wir verdeutlichen die Zeitentwicklung der Operatoren im Heisenberg-Bild am Beispiel des freien Teilchens. Im Folgenden sei $\hat{x} = \hat{x}_H(t)$ und $\hat{p} = \hat{p}_H(t)$ im Heisenberg-Bild. Der Hamilton-Operator für das freie Teilchen ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (2.4.18)$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung für den Impuls

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{p}}, H] = 0, \quad (2.4.19)$$

da $[\hat{p}_i, f(\hat{p}_j)] = 0$. Es folgt unmittelbar, daß der Impuls zeitunabhängig ist,

$$\hat{\mathbf{p}}(t) = \hat{\mathbf{p}}(0). \quad (2.4.20)$$

Die Bewegungsgleichung für $\hat{\mathbf{x}}$ lautet

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}]. \quad (2.4.21)$$

Man kann folgendes zeigen (Übungen):

$$[\hat{x}_i, f(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \right), \quad [\hat{p}_i, g(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right). \quad (2.4.22)$$

Damit läßt sich der Kommutator des Orts- mit dem Hamilton-Operator berechnen,

$$[\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{1}{2m} i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial p_i} \sum_{j=1}^3 p_j^2 \right) = \frac{1}{2m} i\hbar 2\hat{p}_i, \quad (2.4.23)$$

woraus die Bewegungsgleichung $d\hat{x}_i(t)/dt = \hat{p}_i(t)/m = \hat{p}_i(0)/m$ folgt, welche durch

$$\hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \frac{\hat{p}_i(0)}{m} t \quad (2.4.24)$$

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.

$$\begin{aligned} [\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)] &= [\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S\hat{U}(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{B}_S\hat{U}(t)] \\ &= \hat{U}^\dagger(t)[\hat{A}_S, \hat{B}_S]\hat{U}(t). \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

Insbesondere ist $[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(t)] = 0$. Der Kommutator zweier zu unterschiedlichen Zeiten ausgewerteter Ortsoperatoren verschwindet hingegen *nicht*:

$$[\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(0)] = [\hat{p}_i t/m, \hat{x}_j(0)] = -\frac{i\hbar t}{m} \delta_{ij}. \quad (2.4.26)$$

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,

$$(\Delta x_i)_t^2 (\Delta x_i)_{t=0}^2 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \quad (2.4.27)$$

Als zweites Beispiel diene ein Teilchen im Potential $V(\mathbf{x})$,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \quad (2.4.28)$$

Aus diesem Hamilton-Operator erhalten wir die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i}\hat{V}(\mathbf{x}) \quad (2.4.29)$$

sowie

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m}] = \frac{\hat{p}_i}{m}, \quad (2.4.30)$$

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,

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}_i(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{d}{dt}\hat{x}_i, \hat{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hat{p}_i}{m}, \hat{H}\right] = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\hat{p}_i. \quad (2.4.31)$$

Zusammengenommen ergibt sich die folgende Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\hat{\mathbf{x}}_H(t) = -\nabla V(\hat{\mathbf{x}}_H). \quad (2.4.32)$$

Da $|\alpha\rangle_H$ unabhängig von t ist, ergibt sich daraus unmittelbar eine Bewegungsgleichung zweiter Ordnung in der Zeit für den Erwartungswert des Ortsoperators,

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = -\langle\nabla V(\hat{\mathbf{x}})\rangle. \quad (2.4.33)$$

Gültig für allgemeine Hamiltonsche Bewegungsgleichungen bezeichnet man diese Relation als

Ehrenfest'sches 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, die 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:

$$|\alpha, t\rangle_S = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle, \text{ d.h. der Zustandsvektor entwickelt sich in der Zeit.}$$

In einer Entwicklung nach Eigenvektoren eines zeitunabhängigen Schrödinger-Operators,

$$\hat{A}_S|a\rangle = a|a\rangle. \quad (2.4.34)$$

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,

$$c_a(t) = \langle a|\alpha, t\rangle_S = \langle a|\hat{U}(t)|\alpha, t_0\rangle. \quad (2.4.35)$$

Der Übergang ins Heisenberg-Bild liefert dann:

$$\underbrace{\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S\hat{U}(t)}_{\hat{A}_H(t)}\hat{U}^\dagger(t)|a\rangle = \hat{U}^\dagger(t)a|a\rangle, \quad (2.4.36)$$

also

$$\hat{A}_H(t)(\hat{U}^\dagger(t)|a\rangle) = a(\hat{U}^\dagger(t)|a\rangle). \quad (2.4.37)$$

Somit ist $\hat{U}^\dagger(t)|a\rangle$ Eigenket zu $\hat{A}_H(t)$ mit Eigenwert a . Damit können wir die Eigenkets im Heisenberg-Bild definieren:

$$|a, t\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t)|a\rangle. \quad (2.4.38)$$

Sie erfüllen die "inverse Schrödingergleichung"

$$i\hbar\partial_t|a, t\rangle_H = -\hat{H}|a, t\rangle_H. \quad (2.4.39)$$

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

$$\underbrace{|\alpha, t\rangle_H}_{=|\alpha, t_0\rangle} = \sum_a c_a(t)|a, t\rangle_H, \quad (2.4.40)$$

mit

$$c_a(t) = {}_H\langle a, t|\alpha, t\rangle_H = (\langle a|\hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle). \quad (2.4.41)$$

Wir sehen also, dass die $c_a(t)$ in Schrödinger- und im Heisenberg-Bild übereinstimmen.

3. Eindimensionale Probleme

Wir bestimmen das Spektrum und die Energieeigenfunktionen für eine Reihe wichtiger, d.h. häufig benötigter Potentiale $V(x)$, welche die Bewegung eines Teilchens in 1 Dimension bestimmen.

3.1 Harmonischer Oszillator

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

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 \hat{x}^2. \quad (3.1.1)$$

Es erweist sich als sinnvoll zu einheitenlosen Größen überzugehen, da H einem elliptischen Paraboloid im Phasenraum entspricht.

Definition 3.1.

$$\hat{\mathcal{X}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \quad \hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}, \quad (3.1.2)$$

Damit ist

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}^2) \quad (3.1.3)$$

mit $[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}] = i$. Dies entspricht einem rotationssymmetrischen Paraboloid in $\{X, P\}$

3.1.1 Algebraische Lösung

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

Definition 3.2. Leiteroperatoren

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\mathcal{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (3.1.4)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (3.1.5)$$

Diese erfüllen die Kommutatorrelation

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2}[\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}] \\ &= \frac{i}{2}([\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{X}}] - [\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}]) = -\frac{i}{2}2i = 1, \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

also

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1; [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (3.1.7)$$

Wir schreiben den Hamiltonoperator H mithilfe der Leiteroperatoren als

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}((a + a^\dagger)^2 - (a - a^\dagger)^2) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{2}(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 - a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a - (a^\dagger)^2) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger), \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

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

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}). \quad (3.1.9)$$

Definieren wir nun den sogenannten *Anzahloperator*

Definition 3.3. Anzahloperator

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad \text{mit} \quad \hat{N}^\dagger = \hat{N}. \quad (3.1.10)$$

Damit erhalten wir

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}). \quad (3.1.11)$$

Wir können $\hat{N} + 1/2$ als *Radius*²/2 interpretieren, was in etwa $(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)/2$ im Phasenraum entspricht.

Bemerkungen:

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

$$\forall |\psi\rangle: \quad \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = \langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle = \|a|\psi\rangle\|^2 \geq 0. \quad (3.1.12)$$

- Desweiteren ist \hat{N} hermitesch, d.h. es gilt $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ entsprechend zu $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Daraus folgt zusätzlich, dass die Eigenwerte von \hat{N} reell sind.

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

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

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.1.13)$$

so ist

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle. \Rightarrow \text{Energiespektrum} \quad (3.1.14)$$

Wir wollen herausfinden, welche Besetzungszahlen n (also welche Eigenwerte von 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. Dieser wird weiterhin o.B.d.A. als normiert angenommen. Dann gilt weiterhin:

$$0 = \langle 0|a^\dagger a|0\rangle = \langle 0|aa^\dagger|0\rangle - \underbrace{\langle 0|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]|0\rangle}_{= \langle 0|0\rangle = 1} \quad (3.1.15)$$

Daraus folgt: $a^\dagger|0\rangle$ ist normiert auf 1. Nun stellt sich die Frage, ob $a^\dagger|0\rangle$ ebenfalls ein Eigenzustand von \hat{N} ist. Wir überprüfen dies:

$$\hat{N}a^\dagger|0\rangle = a^\dagger aa^\dagger|0\rangle = a^\dagger \underbrace{a^\dagger a|0\rangle}_{= \hat{N}|0\rangle = 0} + a^\dagger|0\rangle \quad (3.1.16)$$

$a^\dagger|0\rangle$ ist also Eigenzustand von \hat{N} zum Eigenwert $n = 1$.

Wir symmetrisieren dies mittels der Kommutatoren. Aus der allgemeinen Relation

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (3.1.17)$$

folgt

$$[N, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{= 0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{= -1} a = -a. \quad (3.1.18)$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger \quad (3.1.19)$$

Damit erhalten wir insgesamt:

$$[N, a] = -a \quad \text{und ebenso} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (3.1.20)$$

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

$$N(a|n\rangle) = ([N, a] + aN)|n\rangle = -a|n\rangle + an|n\rangle, \quad (3.1.21)$$

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. Ähnlich finden wir

$$\hat{N}a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \quad (3.1.23)$$

Wir halten fest:

$$a \text{ erniedrigt den EW um } 1 \quad \longleftrightarrow \quad \text{Absteigeoperator} \quad (3.1.24)$$

$$a^\dagger \text{ erhöht den EW um } 1 \quad \longleftrightarrow \quad \text{Aufsteigeoperator} \quad (3.1.25)$$

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

Es gilt deshalb

$$a^\dagger |n\rangle = c_{n+} |n+1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n | a = c_{n+}^* \langle n+1 | \quad (3.1.26)$$

$$a |n\rangle = c_{n-} |n-1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n | a^\dagger = c_{n-}^* \langle n-1 |. \quad (3.1.27)$$

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

$$1 = \langle n+1 | n+1\rangle = \frac{1}{|c_{n+}|^2} \langle n | a a^\dagger |n\rangle \quad (3.1.28)$$

und verwenden dafür den Standardtrick

$$\langle n | a a^\dagger |n\rangle = \langle n | ([a, a^\dagger] + a^\dagger a) |n\rangle = \langle n | n\rangle + \langle n | N |n\rangle = (n+1) \underbrace{\langle n | n\rangle}_{=1}. \quad (3.1.29)$$

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

$$1 = \langle n-1 | n-1\rangle = \frac{1}{|c_{n-}|^2} \langle n | \underbrace{a^\dagger a}_N |n\rangle = \frac{n}{|c_{n-}|^2} \quad (3.1.30)$$

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

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (3.1.31)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (3.1.32)$$

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

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad (n \geq 0 \text{ weil } N \text{ positiv semi-definit}). \quad (3.1.33)$$

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

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ a^2 |n\rangle &= \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle, \\ &\vdots \\ a^k |n\rangle &= \sqrt{n(n-1)\dots(n-k+1)} |n-k\rangle. \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

Da $n \geq 0$ und $n - k \geq 0$ notwendig sind, muss $n - k \in \mathbb{N}_0$ sein, da sonst $|n - k - 1\rangle$ mit $-1 < n - k - 1 < 0$ existieren würde. Damit ist $n \in \mathbb{N}_0 = (\mathbb{N} \cup \{0\})$. Der kleinste Eigenwert ist damit $n = 0$ und das Spektrum der Eigenwerte gleich \mathbb{N}_0 .

Formal: $a^L|n\rangle = 0$ mit $L \in \mathbb{N}^{(+)}$. Das entspricht

$$0 = aa^{L-1}|n\rangle \quad \rightarrow \quad a|n - L + 1\rangle = 0. \quad (3.1.35)$$

Nutzen wir dies nun und schreiben

$$0 = \langle n - L + 1 | \underbrace{a^\dagger a}_N |n - L + 1\rangle = (n - L + 1)\langle n - L + 1 |n - L + 1\rangle = n - L + 1. \quad (3.1.36)$$

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

$$0 \neq a^{L-1}|n\rangle = a^n|n\rangle = \sqrt{n!}|0\rangle \quad \text{und} \quad a|0\rangle = 0. \quad (3.1.37)$$

$$\Rightarrow \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (3.1.38)$$

$$a|0\rangle = 0. \quad (3.1.39)$$

Damit ist $|0\rangle$ der minimale Besetzungszustand. Man bezeichnet ihn als Grundzustand oder Vakuumzustand (Begriff aus der Quantenfeldtheorie). Damit meinen wir den Zustand minimaler Energie, welches ein Teilchen im Potential des harmonischen Oszillators annehmen kann. Er ist nicht zu verwechseln mit dem Nullvektor des Vektorraums, $|0\rangle \neq |\varnothing\rangle$.

Merke:

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad \text{ist normiert.} \quad (3.1.40)$$

$$\langle \varnothing|\varnothing\rangle = 0 \quad \text{(Nullvektor)} \quad (3.1.41)$$

$$a|0\rangle = 0 \quad (3.1.42)$$

Ausgehend von $|0\rangle$ kann jeder höhere Energiezustand durch Anwendung des Erzeugers a^\dagger erreicht werden:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a^\dagger|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger)^2|0\rangle. \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.1.43)$$

Der allgemeine Energiezustand ist also:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.1.44)$$

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

$$\text{Vakuumentnergie} \quad E_0 = \hbar\omega \frac{1}{2}. \quad (3.1.45)$$

In der Quantenfeldtheorie (QFT) dienen diese Zustände der Beschreibung der Dynamik (Kinematik) eines Feldes an einem Punkt im Raum (Orts-, Impuls-, etc.) im Rahmen der Quantentheorie. Jeder Mode beziehungsweise jedem Punkt im Raum wird eine solche ∞ Leiter von \hat{N} -Eigenvektoren zugeordnet. Der Operator kann dann zum Beispiel als Teilchenzahloperator für den entsprechenden Raumpunkt aufgefasst werden (bzw. Besetzungszahloperator für die 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**.

Es lässt sich leicht zeigen: (\rightarrow Übungen)

$$(\Delta x)_n^2 (\Delta p)_n^2 = (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2. \quad (3.1.46)$$

wobei $(\Delta x)_n^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{x} | n \rangle^2$ etc..

Der Grundzustand $|0\rangle$ saturiert damit die Unschärferelation.

Die Existenz der **nichtverschwindenden Vakuumentnergie** ist Folge der Unschärferelation: $\langle n | \hat{p} | n \rangle = \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0$, da $\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$

Beweis: Annahme o.B.d.A.: $n < n'$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle n | n' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n'!}} \langle n | (a^\dagger)^{n'} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n'!}} (\langle 0 | a^{n'} | n \rangle)^* \\ &= \sqrt{\frac{n!}{n'!(n'-n)!}} (\langle 0 | a^{n'-n} | 0 \rangle)^* = 0 \quad \square \end{aligned} \quad (3.1.47)$$

(Für $n > n'$ betrachte $(\langle n' | n \rangle)^*$.)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle n | \hat{H} | n \rangle &= \frac{1}{2m} \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle \\ &= \frac{1}{2m} (\Delta p)_n^2 + \frac{m \omega^2}{2} (\Delta x)_n^2 \\ &> 0 \quad \text{für alle } n. \end{aligned} \quad (3.1.48)$$

3.1.2 Ortsraumdarstellung der H.O.-Zustände

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

$$|\emptyset\rangle = a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle. \quad (3.1.49)$$

Wir erhalten daraus

$$0 = \langle x|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\langle x|0\rangle. \quad (3.1.50)$$

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

$$\langle x|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{x_0}\left(x + x_0^2\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle \quad \text{mit der Oszillatorlänge } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (3.1.51)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \Leftrightarrow \omega = \frac{\hbar}{mx_0^2}$$

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

$$\left(x + x_0^2\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0. \quad (3.1.52)$$

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

$$\psi_0(x) = \mathcal{N}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}. \quad (3.1.53)$$

Bestimmen wir nun noch die Normierung \mathcal{N} indem wir fordern

$$1 = \int dx|\psi(x)|^2 = \int dx|\mathcal{N}|^2e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}. \quad (3.1.54)$$

Daraus erhalten wir $\mathcal{N} = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{x_0}}$. Damit lautet HO-Grundzustandswellenfunktion

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{x_0}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}. \quad (3.1.55)$$

Wir sehen also, dass es sich beim Grundzustand um ein **Gauß-Wellenpaket** mit $a = 1/x_0^2$ handelt, welches des Potentials wegen stationär ist, also **nicht zerfließt**. Dies war zu erwarten, weil, wie nach (3.1.46) beschrieben, der Grundzustand die Orts-Impuls-Unschärfe erfüllt. Nun finden wir die Wellenfunktion der angeregten Zustände $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ durch die Wirkung von a^\dagger mit der Darstellung

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right) \quad (\text{im Ortsraum}). \quad (3.1.56)$$

Multiplikation mit $\langle x |$ ergibt

$$\begin{aligned}\langle x | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (x - x_0^2 \frac{d}{dx})^n \langle x | 0 \rangle,\end{aligned}\quad (3.1.57)$$

was zu

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} (x - x_0^2 \frac{d}{dx})^n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (3.1.58)$$

führt. Daraus folgt, dass die angeregten Wellenfunktionen von ψ_0 generiert werden. Die generierten Funktionen stellen durch Exponential(Gauß)-Funktionen im ∞ regularisierte Hermite-Polynome dar:

Definition 3.4. *Hermite-Polynome*

$$H_n(\xi) = e^{\frac{\xi^2}{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.1.59)$$

Explizit findet man:

$$\begin{aligned}H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi.\end{aligned}\quad (3.1.60)$$

Beachte dabei, dass $H_{2n}(-\xi) = H_{2n}(\xi)$ sowie $H_{2n+1}(-\xi) = -H_{2n+1}(\xi)$ gilt. Induktiv findet man allgemein

$$H_{2n}(\xi) = \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \frac{(2n)!(2\xi)^{2k}}{(n-k)!(2k)!}, \quad (3.1.61)$$

$$H_{2n+1}(\xi) = 2\xi \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2n+1)!(2\xi)^{2n-2k}}{k!(2n-2k+1)!}. \quad (3.1.62)$$

Aus $\langle m | n \rangle = \delta_{nm} = \int dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)$ folgt dann die Orthogonalität:

$$\int d\xi e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) = \delta_{mn} \sqrt{\pi} 2^n n!. \quad (3.1.63)$$

Damit lauten die HO Wellenfunktionen:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right). \quad (3.1.64)$$

Orthonormalität:

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm}$$

Vollständigkeit:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(x') = \delta(x - x')$$

Bemerkung:

- H_n und damit auch ψ_n hat n Knoten (einfache reelle Nullstellen) hat.
- Wie für stationäre Zustände erwartet, ist die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ reell. Dies ist im Einklang mit dem Verschwinden des Wahrscheinlichkeitsstromes \mathbf{j} für stationäre Zustände.

Mathematischer Zusatz:

Definition 3.5. DGL für die Hermite-Polynome:

$$(\partial_x^2 - 2x\partial_x + 2n) H_n(x) = 0 \quad (3.1.65)$$

Definition 3.6. Erzeugende Funktion:

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x) \equiv Z(t) \quad (3.1.66)$$

$$\Rightarrow H_n(x) = (\partial_t)^n Z(t) \Big|_{t=0} \quad (3.1.67)$$

3.1.3 Direkte Lösung der Ortsraum-Schrödingergleichung

Alternativ zur Operatormethode können wir den harmonischen Oszillator auch direkt im Ortsraum lösen. Ausgangspunkt ist die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.1.68)$$

Mit $\xi = \frac{x}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ folgt die *Hermiteische Differentialgleichung*

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \lambda \right) \psi(\xi) = 0. \quad (3.1.69)$$

Wir wenden folgende allgemeine Lösungsstrategie an:

- Finde zunächst die asymptotische Lösung $u(\xi)$ für $\xi \rightarrow \infty$,

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 \right) u(\xi) = 0 \quad (\lambda \ll \xi^2), \quad (3.1.70)$$

was zu $u(\xi) \cong e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ für $\xi \rightarrow \infty$ führt ($e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ wäre nicht normierbar).

- Setze den Produktansatz: $\psi(\xi) = u(\xi) v(\xi)$ in (3.1.69) ein und erhalte die Hermitesche DGL

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + \lambda - 1 \right) v(\xi) = 0. \quad (3.1.71)$$

Die erlaubten Werte von λ ergeben sich aus der Forderung nach der Normierbarkeit vom V:
Wir wählen einen Potenzreihenansatz

$$V(\xi) = \xi^m \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n. \quad (3.1.72)$$

Einsetzen in die DGL ergibt

$$\begin{aligned} 0 &= \xi^{m-2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left[(m+n)(m+n-1) \underbrace{-2(m+n)\xi^2 + (\lambda-1)\xi^2}_{\text{ersetze } n \rightarrow n-2} \right] \xi^n \\ &= \xi^{m-2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n (m+n)(m+n-1) - \sum_{n=2}^{\infty} c_{n-2} \xi^n [2(m+n-2) - (\lambda-1)] \right] \end{aligned} \quad (3.1.73)$$

Dies soll für beliebige ξ gelten, so dass jeder Koeffizient der Reihe einzeln = 0 sein muss. Für $n \geq 2$ erhält man eine Rekursionsrelation, während $n < 2$ gesondert zu behandeln ist:

$$\begin{aligned} (a) \quad n=0 &: m(m-1)c_0 = 0 \\ (b) \quad n=1 &: (m+1)mc_1 = 0 \\ (c) \quad n \geq 2 &: (m+n)(m+n-1)c_n = [2(m+n-2) - \lambda + 1]c_{n-2} \end{aligned}$$

Mögliche Fälle:

$$\begin{aligned} (i) \quad c_0 = c_1 = 0 &\Rightarrow \text{wegen (c): } c_n = 0 \Rightarrow v \equiv 0 \text{ trivial, aber nutzlos} \\ (ii) \quad c_0 \neq 0, c_1 \neq 0 &\Rightarrow m = 0 \text{ nach (a, b)} \\ (iii) \quad c_0 = 0, c_1 \neq 0 &\Rightarrow m \in \{0, -1\} \text{ nach (b)} \\ (iv) \quad c_0 \neq 0, c_1 = 0 &\Rightarrow m \in \{0, 1\} \text{ nach (a)} \end{aligned}$$

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:

$$v(\xi) = c_1 + c_3 \xi^2 + c_5 \xi^4 + \dots, \quad (3.1.74)$$

aus (iv), $m = 0$:

$$v(\xi) = c_0 + c_2 \xi^2 + c_4 \xi^4 + \dots, \text{ etc.} \quad (3.1.75)$$

Wir wählen also o.B.d.A. $m = 0$. Damit folgt die Rekursion

$$c_n = \frac{2(n-2) - \lambda + 1}{n(n-1)} c_{n-2} \quad (3.1.76)$$

Für große n gilt (nehme an $\lambda \notin \mathbb{Z}$)

$$\frac{c_n}{c_{n-2}} \leq \begin{cases} 2/n & \text{für } n \text{ gerade} \\ 2/(n-1) & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.1.77)$$

Die Potenzreihe ist demnach asymptotisch kleiner als

$$\begin{aligned} & c_0 \left(1 + \frac{2}{2} \xi^2 + \frac{2^2}{2 \cdot 4} \xi^4 + \frac{2^3}{2 \cdot 4 \cdot 6} \xi^6 + \dots \right) \\ & + c_1 \left(\xi + \frac{2}{2} \xi^3 + \frac{2^2}{2 \cdot 4} \xi^5 + \frac{2^3}{2 \cdot 4 \cdot 6} \xi^7 + \dots \right) \\ & = (c_0 + c_1 \xi) e^{\xi^2} \end{aligned} \quad (3.1.78)$$

Diese Reihe divergiert zu stark, um durch Multiplikation mit $e^{-\xi^2/2}$ quadratintegabel zu werden. Normierbare Lösungen existieren also nur, wenn entweder der $c_0 = 0, c_1 \neq 0$ oder $c_1 = 0, c_0 \neq 0$ und die mit dem 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 das Spektrum des harmonischen Oszillators wiedergefunden.

Die zugehörigen Polynome sind abwechselnd gerade und ungerade und genügen der Hermitschen DGL (3.1.71), so dass die ausgesetzten Polynome proportional zu den Hermite-Polynomen sind.

Zusammenfassung:

Das Eigenwert-Problem

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \varphi(\xi) = \epsilon \varphi(\xi) \quad (3.1.79)$$

für $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$ -Funktionen φ , wird gelöst durch die Eigenfunktionen

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\xi) e^{\frac{1}{2} \xi^2} \quad (3.1.80)$$

mit den Eigenwerten

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2}. \quad (3.1.81)$$

Die Lösungen des Harmonischen Oszillators ($x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi$) lauten:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (3.1.82)$$

mit den Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.1.83)$$

Bemerkungen:

- Grundzustand des Harmonischen Oszillators:

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

⇒ Gaußsches Wellenpaket mit $a = m\omega/\hbar = 1/x_0^2$ und

$$\langle \hat{x} \rangle = 0$$

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{x_0^2}{2}.$$

Im Grundzustand ist zwar der Mittelwert $\langle \hat{x} \rangle$ am Minimum des Potentials, die Energieeigenfunktion hat jedoch eine nichtverschwindende Ausdehnung, d.h. sie zeigt **Grundzustandsfluktuationen** oder so genannte Nullpunktsschwankung.

Dieser entspricht die Energie $E_0 = \hbar\omega/2$, welche auch aus der Unschärferelation herleitbar ist:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle \langle \hat{x} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

wegen $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$. Die Energie erfüllt dann

$$\begin{aligned} E = \langle \hat{H} \rangle &= \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle \\ &\geq \frac{1}{2m} \left(\langle \hat{p}^2 \rangle + \frac{m^2\omega^2\hbar^2}{4} (\langle \hat{p}^2 \rangle)^{-1} \right) \end{aligned} \quad (3.1.84)$$

Das Minimum der rechten Seite ergibt sich durch Ableiten nach $\langle \hat{p}^2 \rangle$ zu

$$1 - \frac{1}{4}m^2\omega^2\hbar^2 (\langle \hat{p}^2 \rangle)^{-2} = 0 \Rightarrow \langle \hat{p}^2 \rangle_{min} = \frac{\hbar m \omega}{2} \quad (3.1.85)$$

$$\Rightarrow E \geq \hbar\omega \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \square \quad (3.1.86)$$

Die Nullpunktenergie ist die kleinste mit der Unschärferelation zu vereinbarende Energie.

- Was bedeuten die HO Wellenfunktionen? Wir vergleichen diese dazu mit dem klassischen Oszillator:

$$x = q_0 \sin \omega t, \quad E = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2$$

Definition 3.7. Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$P_{\text{class}}(x) dx = 2 \frac{dt}{T}, \quad T = \frac{2\pi}{\omega} \quad (3.1.87)$$

$$\text{Mit } dx = q_0 \omega \cos \omega t dt = q_0 \omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{q_0}\right)^2} dt \quad (3.1.88)$$

$$\Rightarrow P_{\text{class}}(x) = \left[\pi q_0 \sqrt{1 - \left(\frac{x}{q_0}\right)^2} \right]^{-1} \quad (3.1.89)$$

Wir vergleichen dies mit dem ($n = 1$) HO Zustand, $E_1 = (3/2) \hbar\omega \Rightarrow q_0 = \sqrt{3}x_0$, sowie mit dem ($n = 10$)-Zustand, $q_0 = \sqrt{21}x_0$:

- Im Vergleich zum klassischen Grenzfall gibt es Interferenz-maxima und -minima, bei denen die Wahrscheinlichkeit verschwindet, die räumliche phasen-ausgewaschene 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 (Phasenunschärfe leichter, weniger Eindringen am Rand) → **klassischer Grenzfall**.

3.1.4 Kohärente Zustände

Die Fockraum-Zustände $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$ sind Energie-Eigenzustände und somit stationär:

$$|n; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|n; t_0\rangle = e^{-i\omega(n+1/2)(t-t_0)}|n; t_0\rangle. \quad (3.1.90)$$

Insbesondere ist zu jedem Zeitpunkt t

$$\langle \hat{x} \rangle_t = 0, \quad \langle \hat{p} \rangle_t = 0. \quad (3.1.91)$$

Charakteristisch für die klassische Lösung des harmonischen Oszillators ist hingegen die Oszillation von x und p mit Frequenz ω .

Um dieses Verhalten quantenmechanisch zu beschreiben führt man die **Kohärenten Zustände** ein.

Definition 3.8. Kohärenter Zustand $|\alpha\rangle$:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C} \quad (3.1.92)$$

Unser Ansatz für einen solchen Zustand lautet

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle. \quad (3.1.93)$$

Damit erhalten wir:

$$\alpha|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle \stackrel{(m=n-1)}{=} \sum_{m=0}^{\infty} c_{m+1} \sqrt{m+1} |m\rangle. \quad (3.1.94)$$

Daraus folgt, dass

$$c_{m+1} \sqrt{m+1} = c_m \alpha \quad (3.1.95)$$

$$\Rightarrow \frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{\alpha}{\sqrt{m+1}} \Rightarrow c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0, \quad n \geq 1 \quad (3.1.96)$$

$$\Rightarrow |\alpha\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.1.97)$$

Normierung:

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad (3.1.98)$$

$$\Rightarrow |c_0| = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \quad (3.1.99)$$

Der normierte Zustand ist damit

$$\Rightarrow |\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a^\dagger \alpha)^n}{n!} |0\rangle \quad (3.1.100)$$

$$= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle, \quad \forall \alpha \in \mathbb{C} \quad (3.1.101)$$

wobei wir $|n\rangle = \left(1/\sqrt{n!}\right) (a^\dagger)^n |0\rangle$ verwendet und eine totale Phase gleich 1 gewählt haben.

Bemerkung: Man kann zeigen $\langle \beta | \alpha \rangle = e^{\beta^* \alpha}$

Um eine physikalische Interpretation der kohärenten Zustände zu finden, führen wir die Zeitentwicklung durch und setzen dafür $t_0 = 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\alpha; t\rangle &= e^{-i\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})t} |\alpha; 0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}; 0\rangle \end{aligned} \quad (3.1.102)$$

Bis auf eine multiplikative t-abhängige Phase besteht die Zeitentwicklung in einer Phasenrotation

$$\alpha(t) = \alpha(0) e^{-i\omega t}. \quad (3.1.103)$$

Insbesondere

$$\begin{aligned} \langle \alpha(t) | \hat{a} | \alpha(t) \rangle &= \langle \alpha(t) | \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) | \alpha(t) \rangle \\ &= \alpha(t) = \alpha(0) [\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)] \\ \Rightarrow \langle \alpha(t) | \hat{X} | \alpha(t) \rangle &= \sqrt{2} \alpha(0) \cos(\omega t) \end{aligned} \quad (3.1.104)$$

Analog für \hat{P} . In \hat{x}, \hat{p} :

$$\langle \hat{x} \rangle_{\alpha, t} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha(0) \cos(\omega t) = q_0 \cos(\omega t) \quad (3.1.105)$$

$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha, t} = -\sqrt{2\hbar m\omega} \alpha(0) \sin(\omega t) = -m\omega q_0 \sin(\omega t) \quad (3.1.106)$$

$$\Rightarrow \alpha(0) = q_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} = \frac{q_0}{\sqrt{2}x_0} \quad (3.1.107)$$

Dies entspricht gerade einer klassischen Oszillation von $\langle \hat{x} \rangle$.

Als nächstes möchten wir nun die Wellenfunktion bestimmen. Dazu betrachten wir

$$(a - \lambda) | \alpha \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle x | a - \alpha | \alpha \rangle = 0. \quad (3.1.108)$$

Wir erhalten damit

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) - \alpha \right] \psi_\alpha(x) = 0, \quad (3.1.109)$$

was gleichbedeutend mit

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} - \sqrt{2}\alpha \right) \psi_\alpha(x) = 0 \quad (3.1.110)$$

ist. Diese DGL lösen wir mithilfe des Ansatzes

$$\psi_\alpha(x) = \mathcal{N}_\alpha e^{-Ax^2+Bx+C}. \quad (3.1.111)$$

Eingesetzt in (3.1.110) führt dies zu dem Ergebnis

$$\psi_\alpha(x) = \mathcal{N}_\alpha e^{-\frac{1}{2x_0^2}(x-\sqrt{2}Re(\alpha)x_0)^2+i\delta(x,t)}. \quad (3.1.112)$$

Denn damit

$$\left(\frac{x}{x_0} + Bx_0 - 2Ax_0 - \sqrt{2}\alpha \right) \psi_\alpha = 0 \quad (3.1.113)$$

für alle x gilt, muss separat $A = 1/(2x_0^2)$, $B = \sqrt{2}\alpha/x_0$ sein. Damit ist

$$\begin{aligned} -Ax^2 + Bx + C &= -\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 + \sqrt{2}\alpha \frac{x}{x_0} - (Re(\alpha))^2 \\ &= \frac{(x - \sqrt{2}x_0 Re(\alpha))^2}{2x_0^2} + i\delta(x,t) \end{aligned} \quad (3.1.114)$$

mit $\delta(x,t) = \sqrt{2} \frac{x}{x_0} Im(\alpha(t))$. $C \in \mathbb{R}$ kann frei gewählt werden, da es einfach \mathcal{N}_α umdefiniert.

$$\Rightarrow \psi_\alpha(x,t) = \left(\frac{1}{\pi x_0^2} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{x - q_0 \cos(wt)}{x_0} \right]^2 - i \frac{x q_0}{x_0^2} \sin(wt) \right\} \quad (3.1.115)$$

$$\Rightarrow \rho_\alpha(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi} x_0} \exp \left\{ - \left[\frac{x - q_0 \cos(wt)}{x_0} \right]^2 \right\} \quad (3.1.116)$$

- Dies ist ein **nicht-dispersives**, um $x(t) = q_0 \cos(wt)$ zentriertes, **klassisch oszillierendes Gaußsches Wellenpaket**, dessen Breite durch die Oszillatorlänge $x_0 = \sqrt{\hbar/mw}$ gegeben ist.
- ψ_α gibt daher die klassische Oszillation optimal wieder.
- Kohärente Zustände bilden das Bindeglied zwischen klassischer (z.B. Elektrodynamik) und Quantenfeldtheorie. Z.B. Photonen \leftrightarrow Laserwelle.

Verteilung über n :

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n c_n |n\rangle \quad (3.1.117)$$

$$\Rightarrow |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \text{Poisson - Verteilung} \quad (3.1.118)$$

$$\begin{aligned}
(\Delta N)^2 &= e^{-|\alpha|^2} \sum_n n^2 |c_n|^2 - \langle \hat{N} \rangle_\alpha^2 \\
&= \langle \alpha | a^\dagger \underbrace{aa^\dagger}_{=a^\dagger a + [a, a^\dagger]} a | \alpha \rangle - \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle^2 \\
&= \langle \alpha | a^\dagger a^\dagger a a | \alpha \rangle + \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle - \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle^2 \\
&= |\alpha|^4 + |\alpha|^2 - (|\alpha|^2)^2 = |\alpha|^2 = \langle \hat{N} \rangle_\alpha
\end{aligned} \tag{3.1.119}$$

$$\Rightarrow \frac{\text{Schwankung}}{\text{Mittelwert}} = \frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}} = \frac{1}{|\alpha|} \tag{3.1.120}$$

wie bei einer Normalverteilung

3.2 Potentialstufen

Bislang war entweder

- $V(x) \equiv \text{konstant} (= 0)$, oder
- $V(x) \propto x^2$.

Nächster Schritt: $V(x)$ stückweise konstant, dazwischen Unstetigkeit.

3.2.1 Stückweise stetige Potentiale

innerhalb von Regionen I und II:

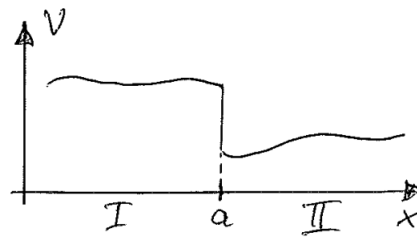


Abbildung 3.1: Stückweise stetige Potentialstufe

Wir betrachten die Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) \tag{3.2.1}$$

Was geschieht mit $\psi(x)$ bei $x = a$? Dazu machen wir folgende Annahme:

$$(i) \quad \begin{aligned} \psi(x) &\sim \Theta(x-a) \text{ in } \epsilon\text{-Umgebung von } a, \text{ also unstetig bei } a \\ &\Rightarrow \psi''(x) \sim \delta'(x-a) \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

$$(ii) \quad \begin{aligned} \psi'(x) &\sim \Theta(x-a) \text{ um } x = a \\ &\Rightarrow \psi''(x) \sim \delta(x-a) \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Beide führen zu Widersprüchen, da für sie nach der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\psi''(x) \sim \underbrace{V(x)}_{\text{endlicher Sprung} \sim \Theta(x-a)} \underbrace{\psi(x)}_{\text{endlicher Sprung oder Knick}} \quad (3.2.4)$$

gelten müsste. Daraus folgern wir: ψ und ψ' müssen stetig bei $x = a$ sein.

Anschlussbedingungen:

$$\begin{cases} \psi_I(a) = \psi_{II}(a) \\ \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a) \end{cases} \quad (3.2.5)$$

oder

$$\frac{\psi'_I(a)}{\psi_I(a)} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)} \leftrightarrow (\ln \psi_I)'_{x=a} = (\ln \psi_{II})'_{x=a} \quad (3.2.6)$$

Für $V(x) \sim \delta(x)$ verliert obige Argumentation ihre Gültigkeit.

3.2.2 Potentialstufe

Nun betrachten wir $V(x) = V_0 \Theta(x - x_0)$; $V_0 \geq 0$

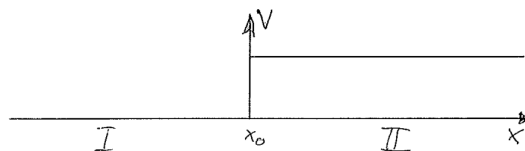


Abbildung 3.2: Potentialstufe

Der Einfachheit halber wählen wir $x_0 = 0$, damit erhalten wir die folgenden SGL:

$$I: \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi =: -k_I^2 \psi'' \quad ; x < 0 \quad (3.2.7)$$

$$II: \psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi =: -k_{II}^2 \psi'' \quad ; x > 0 \quad (3.2.8)$$

Nun müssen wir eine Fallunterscheidung durchführen:

Fall 1: $E > V_0 \Rightarrow k_{\text{II}} \in \mathbb{R}$:

Die Schrödingergleichung wird in I und II durch

$$e^{ikx}, e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k = \begin{cases} k_{\text{I}} & ; \quad x < 0 \\ k_{\text{II}} & ; \quad x > 0 \end{cases} \quad (3.2.9)$$

gelöst.

O.B.d.A. nehmen wir an, dass die Welle $e^{ik_{\text{I}}x}$ von links einfällt und teilweise reflektiert und teilweise transmittiert wird. Daraus folgt:

$$\Rightarrow \psi_{\text{I}} = e^{ik_{\text{I}}x} + Re^{ik_{\text{I}}x}, \quad x < 0 \quad (3.2.10)$$

$$\psi_{\text{II}} = Te^{ik_{\text{II}}x}, \quad x > 0 \quad (3.2.11)$$

$$\psi(x) = (1 - \Theta(x))\psi_{\text{I}}(x) + \Theta(x)\psi_{\text{II}}(x) \quad (3.2.12)$$

Aus den Anschlussbedingungen bei $x = 0$ erhalten wir:

$$\text{für } \psi : 1 + R = T \quad (3.2.13)$$

$$\text{für } \psi' : ik_{\text{I}}(1 - R) = ik_{\text{II}}T \quad (3.2.14)$$

Daraus erhalten wir nun:

$$R = \frac{k_{\text{I}} - k_{\text{II}}}{k_{\text{I}} + k_{\text{II}}} \quad T = \frac{2k_{\text{I}}}{k_{\text{I}} + k_{\text{II}}} \quad (3.2.15)$$

Die obigen Wellenlösungen sind nicht normiert und auch nicht normierbar über \mathbb{R} . Man könnte die ebenen Wellen z.B. mittels einer Gauß-Einhüllenden zu einer normierbaren Wellenfunktion machen. Das berechnete Verhalten bei $x = 0$ würde dann lokal weiterhin gelten.

Nun wollen wir die ebenen Wellen-Lösung interpretieren. Dazu betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichten:

$$\begin{aligned} j_{\text{I}}(x) &= \frac{\hbar}{2mi} [(e^{-ik_{\text{I}}x} + R^*e^{ik_{\text{I}}x})ik_{\text{I}}(e^{ik_{\text{I}}x} + Re^{-ik_{\text{I}}x}) - c.c.] \\ &= \frac{\hbar k_{\text{I}}}{m} (1 - |R|^2) = j_{\text{ein}} - j_{\text{reflektiert}} \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

$$j_{\text{II}}(x) = \frac{\hbar k_{\text{II}}}{m} |T|^2 = j_{\text{transmittiert}} \quad (3.2.17)$$

$$\text{Reflexionskoeffizient} \quad r = \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{ein}}} = |R|^2 \quad (3.2.18)$$

$$\text{Transmissionskoeffizient} \quad t = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}} = \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} |T|^2 \quad (3.2.19)$$

Klassisch gäbe es keine Reflexion, da im Limes $V_0 \rightarrow -\infty$ geht und somit $T \rightarrow 0$ und $|R| \rightarrow 1$ und dies klassisch nicht möglich ist. Quantenmechanisch erhalten wir ein Wellenphänomen ähnlich wie bei Licht beim Durchgang durch eine Grenzfläche zwischen Medien mit verschiedenen Brechungsindize.

$V_0 < 0$ entspräche dem Problem einer von rechts aus II einfallenden Welle. Allgemein können wir mit

Hilfe von Superposition dieser Wellen und den oben beschriebene Lösungen, Wellen konstruieren, welche auf beiden Seiten ein- und auslaufende Komponenten haben.

Als nächstes betrachten wir den **Grenzfall** $E \rightarrow \infty$, ($E \gg |V_0|$):

$$\Rightarrow k_{II} \rightarrow k_I \quad (3.2.20)$$

$$\Rightarrow R \rightarrow 0, \quad T \rightarrow 1 \quad (3.2.21)$$

Wegen der scharfen Stufe wird der klassische Grenzfall gemäß Ehrenfest-Theorem erst für $E \rightarrow \infty$ erreicht. (Dabei findet ein stetiger Übergang von V über die Distanz d statt: Teilchen mit $k \gg d$ werden nicht reflektiert.)

Als nächstes beschäftigen wir uns mit der Teilchenzahlerhaltung. Aus den Lösungen für R,T folgt:

$$k_I (1 - |R|^2) = k_{II} |T|^2 \quad (3.2.22)$$

$$\Rightarrow j_I = j_{II} \Rightarrow j_{\text{ein}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{trans}} \quad (3.2.23)$$

Dies entspricht der Kontinuitätsgleichung, da $\dot{\rho} \equiv 0$.

Als nächste wollen wir die Phasen- und Amplitudenbeziehungen betrachten. Diese sind leicht grafisch aus:

$$\psi|_{x=a} = \text{stetig} \quad \psi'|_{x=a} = \text{stetig} \quad (3.2.24)$$

abzulesen:

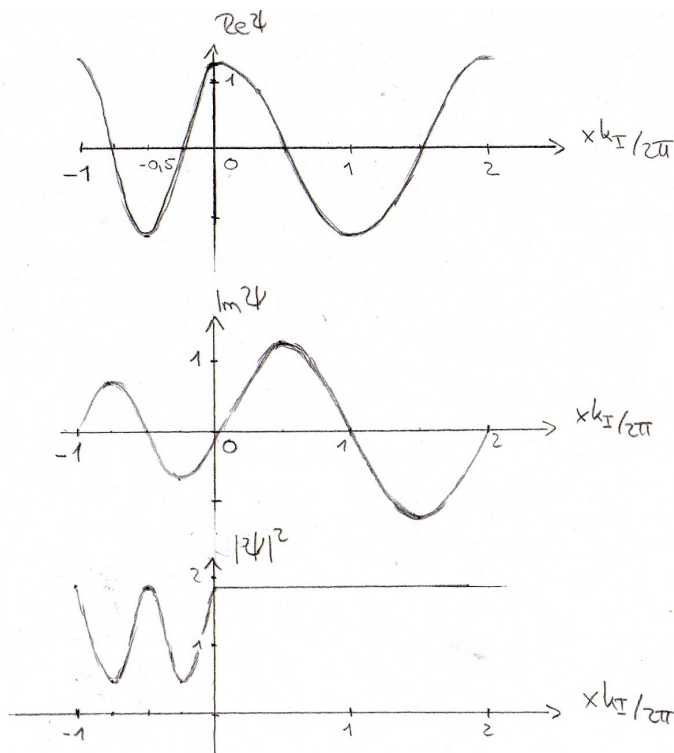


Abbildung 3.3: Der Realteil und der Imaginärteil von $\psi(x)$ und die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ gegen $xk_I/(2\pi)$, für Einfallenergie $E = 4V_0/3$, d.h. $k_{II}/k_I = 1/2$

Fall 2: $E < V_0 \Rightarrow k_{II} \in i\mathbb{R}$

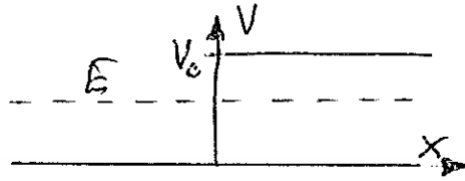


Abbildung 3.4: Potentialstufe

$$\Rightarrow \psi_{II}(x) = T e^{-\kappa_{II} x} \quad , \quad \kappa_{II} = -i k_{II} \in \mathbb{R} \quad (3.2.25)$$

Mit der gleichen Argumentation wie zuvor (ψ, ψ' stetig) erhalten wir:

$$R = \frac{k_I - i\kappa_{II}}{k_I + i\kappa_{II}} \in \mathbb{C} \quad ; \quad T = \frac{2k_I}{k_I + i\kappa_{II}} \quad (3.2.26)$$

$$\text{aber} \Rightarrow |R|^2 = 1 \rightarrow \text{vollständige Reflexion} \quad (3.2.27)$$

Wegen $T \neq 0$ erhalten wir eine Eindringtiefe bis $x \sim \kappa_{II}^{-1}$:

$$\psi(x) = \left[\left(\cos(k_I x) - \frac{\kappa_{II}}{k_I} \sin(k_I x) \right) (1 - \Theta(x)) + e^{-\kappa_{II} x} \Theta(x) \right] \frac{2}{1 + i\kappa_{II}/k_I} \quad (3.2.28)$$

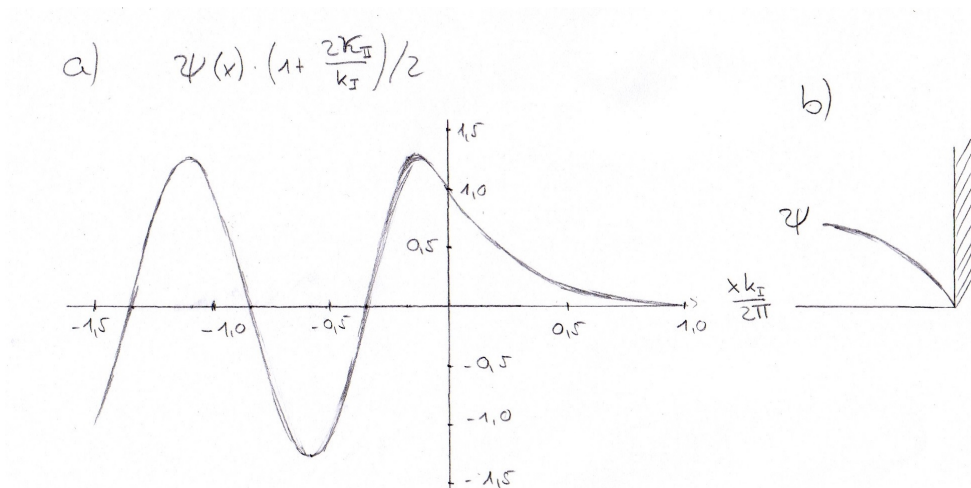


Abbildung 3.5: (a) Die Wellenfunktion für $\kappa_{II}/k_I = 3/4$. (b) Wellenfunktion an einer Unendlichkeitsstelle.

Fall 3: Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow \kappa_{II} \rightarrow \infty \quad \Rightarrow T \rightarrow 0, \quad R \rightarrow -1 \quad (3.2.29)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \cos(k_1 x) (1 - \Theta(x)) \quad (3.2.30)$$

Insbesondere:

$$\psi(x) \Big|_{x=\text{Schwellenpos.}} = 0. \quad (\text{Dirichlet - Randbedingung}) \quad (3.2.31)$$

$\psi'(x) \Big|_{\text{Schwelle}} = -k_1$ ist durch V_0 links der Schwelle, sowie den Eigenwerten E festgelegt. (Ohne Randbedingung bei $x \rightarrow -\infty$ ist $E > V_0$ beliebig wählbar.)

3.3 Potentialbarriere und Tunneffekt

Für den Prototyp einer Potentialbarriere verwenden wir:

$$V(x) = V_0 \Theta(a - |x|) \quad (3.3.1)$$

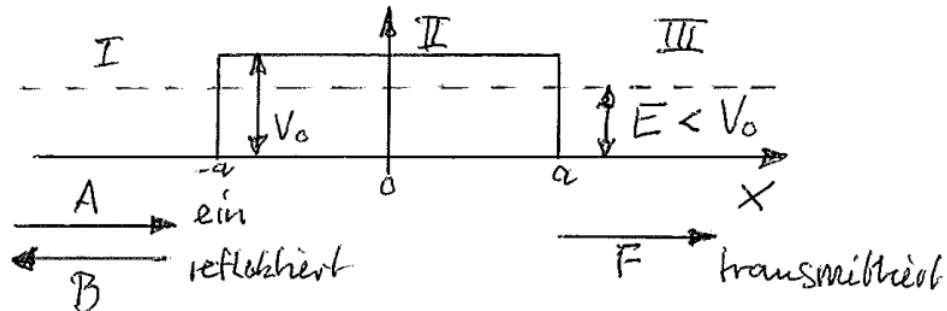


Abbildung 3.6: Potentialbarriere

O.B.d.A. können wir wieder von einer von links einfallenden Welle ausgehen. Wir betrachten aber nun die allgemeine Lösung für

$$k_I = k_{III} \equiv k, \quad -ik_{II} = \kappa_{II} = \kappa \quad (3.3.2)$$

Damit setzen wir an:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \Theta(-a-x) [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] \\ &+ \Theta(a-|x|) [Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}] \\ &+ \Theta(x-a) [Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}] \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

Die Anschlussbedingungen für ψ und ψ' bei $\pm a$ liefern 4 Gleichungen für 6 Unbekannte, welche es erlauben, z.B. A, B, C, D durch F, G auszudrücken. Z.B. (Übungen):

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (3.3.4)$$

mit

$$\alpha = \left(\cosh(2\kappa a) + \frac{i}{2}\epsilon \sinh(2\kappa a) \right) e^{2ika} \quad (3.3.5)$$

$$\beta = \frac{i}{2}\eta \sinh(2\kappa a) \quad (3.3.6)$$

$$\text{wobei} \quad \epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \quad (3.3.7)$$

Nun betrachten wir den Spezialfall eines von links einlaufenden Teilchens: $G = 0$ (siehe Bild).

$$\Rightarrow A = \alpha F, \quad B = \beta^* F \quad (3.3.8)$$

Definition 3.9. *Transmissionsamplitude:*

$$S(E) = \frac{F}{A} = \alpha^{-1} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\kappa a) + i(\epsilon/2) \sinh(2\kappa a)} \quad (3.3.9)$$

Definition 3.10. *Durchlässigkeitskoeffizient:*

$$|S(E)|^2 = \left[1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right) \sinh^2(2\kappa a) \right]^{-1} \\ \stackrel{\wedge}{=} \text{Transmissions - WSK} \quad (3.3.10)$$

Wir untersuchen nun den Durchlässigkeitskoeffizienten für den Grenzfall hoher Barrieren, d.h. die Barriere ist sehr hoch/breit und damit $\kappa a \gg 1$:

$$|S(E)|^2 \cong \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right)^{-1} 4e^{-4\kappa a} \\ = \frac{16(\kappa k)^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a} \\ = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-4\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}} \quad (3.3.11)$$

$$\Rightarrow |S(E)|^2 = \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} + \ln \left[16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \right] \right\} \\ \cong \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right\} \quad (3.3.12)$$

$$|S(E)|^2 = \exp \left\{ -2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} \right\} \quad (3.3.13)$$

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:

- α Zerfall von Kernen
- Niedertemperatur-Emission von e^- aus Festkörpern. (Metallen)

Die Riemann-Zerlegung erlaubt die Verallgemeinerung des obigen Ansatzes und so können wir auch kontinuierliche Potentialberge beschreiben. Für den Grenzfall hoher Barrieren gilt (3.3.13) dann im Rahmen der WKB-Näherung. (Siehe Kapitel 6)

3.4 Potentialtopf

3.4.1 Gebundene Zustände des Potentialtopfs

Wir betrachten zunächst die ungebundenen Zustände des Potentialtopfs:

$$V(x) = -V_0 \Theta(a - |x|) \quad ; \quad V_0 > 0 \quad (3.4.1)$$

(Die ist das Prototyp-Potential für gebundene Zustände in Atomen, Kernen, e.m. Atomfallen etc.)

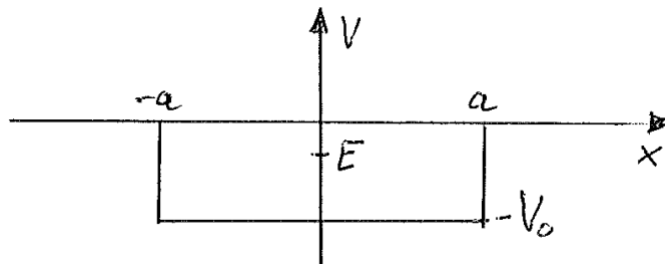


Abbildung 3.7: Potentialtopf

Gebundene Zustände haben $-V_0 \leq E < 0$. Die Schrödinger Gleichung wird für $|x| > a$ durch:

$$\psi(x) = e^{\mp \kappa x} \quad , \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \quad (3.4.2)$$

gelöst. Aus Gründen der Normierbarkeit für $x \rightarrow \pm\infty$ kommt nur $\psi(x) = e^{-\kappa|x|}$ in Frage.

Wegen der Spiegelsymmetrie $P : x \rightarrow -x$ von $V(x)$ ist es sinnvoll zwischen P-symmetrischen und -antisymmetrischen Wellenfunktionen zu unterscheiden:

$$\psi^{(+)}(x) = \Theta(a - |x|) A \cos(kx) + \Theta(|x| - a) B e^{-\kappa|x|} \quad (3.4.3)$$

$$\psi^{(-)}(x) = \Theta(a - |x|) A \sin(kx) + \Theta(|x| - a) \operatorname{sgn}(x) B e^{-\kappa|x|} \quad (3.4.4)$$

$$\text{mit} \quad k = \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (3.4.5)$$

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} +1 & x \geq 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases} \quad (3.4.6)$$

Aus den Anschlussbedingungen für ψ, ψ' bei $x = \pm a$ erhalten wir: (Übungen)

(i) **Gerade Funktion $\psi^{(+)}$:**

$$\tan(ka) = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\left(\frac{\xi}{ka}\right)^2 - 1} \quad (3.4.7)$$

$$\text{worin } \xi = \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \quad (3.4.8)$$

Aus $-V_0 \leq E \leq 0$ erhalten wir:

$$0 \leq ka \leq \xi \quad (3.4.9)$$

Die Lösung lässt sich graphisch bestimmen. Für die Anzahl der Schnittpunkte gilt:

$$n_b^{(+)} = \left[\frac{\xi}{\pi} \right] \equiv \text{nächst größere natürliche Zahl zu } \alpha \quad (3.4.10)$$

Damit gibt es mindestens einen gebundenen P-geraden Zustand.

$$\left(E_0 \cong -\frac{2ma^2V_0^2}{\hbar^2} \quad \text{für } V_0 \rightarrow 0 \right)$$

(ii) **Ungerade Funktion $\psi^{(-)}$:**

$$-\cot(ka) = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\left(\frac{\xi}{ka}\right)^2 - 1} \quad (3.4.11)$$

Auch hierfür lässt sich wieder eine graphische Lösung finden. Für:

$$\frac{\pi}{2} (2n_b^{(-)} - 1) < \xi < \frac{\pi}{2} (2n_b^{(-)} + 1) \quad (3.4.12)$$

hat (3.4.11) genau $n_b^{(-)}$ Lösungen. Erst für

$$\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2} \quad (3.4.13)$$

gibt es ungerade Lösungen mit $n_b^{(-)}$ Knoten.

3.4.2 Unendlich tiefer Potentialtopf

Wir betrachten den Grenzfall:

$$V_0 \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \xi \rightarrow \infty \quad (3.4.14)$$

Wir erhalten nun für die Lösungen der transzendenten Gleichungen (3.4.7) und (3.4.11) bei den Asymptoten $\tan(ka) \rightarrow \infty, \cot(ka) \rightarrow \infty$.

- Gerade Zustände

$$\varphi_q^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \Theta(a - |x|) \cos(qx)$$

mit $qa = (s + 1/2)\pi, s \in \mathbb{N}_0$ (3.4.15)

- Ungerade Zustände

$$\varphi_q^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \Theta(a - |x|) \sin(qx)$$

mit $qa = s\pi, s \in \mathbb{N}$

(3.4.16)

Dies lässt sich nun zu:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \Theta(a - |x|) \sin[(x + a)k_n]$$

mit $k_n = (n + 1) \frac{\pi}{2a}, n \in \mathbb{N}_0$

(3.4.17)

vereinheitlichen. Für die Energie gilt dann:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n + 1)^2}{8ma^2}$$
(3.4.18)

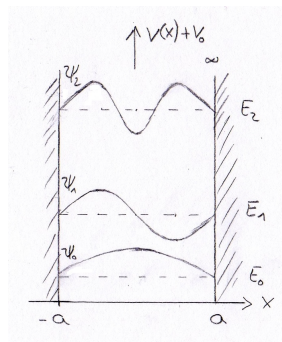


Abbildung 3.8: Unendlich tiefer Potentialtopf

3.4.3 Resonanzen

Zum Abschluss wollen wir uns noch mit den Zuständen des Potentialtopfs für $E > 0$ beschäftigen. Erinnerung:

$$-V_0 < E < 0 : \text{Bindungszustände} \quad (3.4.19)$$

$$\text{jetzt: } E \geq 0 : \text{Streuzustände} \quad (3.4.20)$$

Dies erhält man leicht aus den Zuständen der Potentialbarriere in dem man $V_0 \rightarrow -V_0$ ersetzt: (Siehe 3.3)

- Außenraum $|x| > a$:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \in \mathbb{R} \quad (3.4.21)$$

- Potentialinneres $|x| < a$: (ersetze $\kappa \rightarrow \kappa = iq$)

$$q = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \in \mathbb{R} \quad (3.4.22)$$

Wir wählen nun den folgenden Ansatz:

o.B.d.A.: Einfall nur von links, $G = 0$.

Als Lösung erhalten wir dann wegen

$$\cosh(ika) = \cos(qa) \quad , \quad \sinh(ika) = i \sin(qa) : \quad (3.4.23)$$

$$\Rightarrow S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2qa) - \frac{i}{2}\epsilon \sin(2qa)} \quad (3.4.24)$$

$$\text{mit} \quad \epsilon = \frac{q}{k} + \frac{k}{q} \quad (3.4.25)$$

Daraus erhalten wir für den Transmissionskoeffizient:

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\epsilon^2 - 1) \sin^2(2qa)} \quad (3.4.26)$$

$$\text{mit} \quad \epsilon^2 - 1 = \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 = \frac{V_0^2}{E(E + V_0)} \quad (3.4.27)$$

Analytische Eigenschaften von $|S(E)|^2$

- Für den Wertebereich erhalten wir:

$$0 \leq |S(E)|^2 \leq 1 \quad (3.4.28)$$

- Insbesondere gilt:

$$|S(E)|^2 = 1 \quad \text{für} \quad 2qa = n\pi, \quad (3.4.29)$$

entsprechend gilt

$$E = E_R^{(n)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2} - V_0 \quad (3.4.30)$$

für $n \in \mathbb{N}$, $n > [8ma^2 V_0]^{1/2} / (\hbar\pi)$, so dass $E_R^{(n)} \geq 0$.

- Wir erhalten also ein Transmissionsmaxima, d.h. V ist voll durchlässig.
- Die Transmissionsminima liegen ungefähr bei $2qa = (n + \frac{1}{2})\pi$.

Bemerkungen:

- Die Maxima fallen mit den Energien (3.4.18) des unendlich tiefen Potentialtopfs zusammen.
- Für $\xi \gg 1$, $E \ll V_0$, erhalten wir gut ausgeprägte Transmissions-**Resonanzen**.
→ Je größer $\xi = \sqrt{2mV_0}a/\hbar$ wird, desto schmaler (schärfer) werden die Resonanzen.

Eigenschaften von $S(E)$ in der komplexen Energieebene

Wir finden Pole bei $\{q(E), k(E)\}$, für die der Nenner verschwindet:

$$\cos(2qa) = \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right) \sin(2qa) \quad (3.4.31)$$

Mit $\cot(2x) = (\cot(x) - \tan(x))/2$ folgt:

$$\underbrace{\cot(qa)}_f - \underbrace{\tan(qa)}_{f^{-1}} = \underbrace{\frac{ik}{q}}_g - \underbrace{\frac{q}{ik}}_{g^{-1}} \quad (3.4.32)$$

$$\Rightarrow f - f^{-1} = g - g^{-1} \quad (3.4.33)$$

Wir erhalten also eine Quadratische Gleichung in f oder g . Als Mögliche Lösungen erhalten wir: $f = g$ oder $f = -g^{-1}$:

$$\Rightarrow \tan(qa) = -i\frac{k}{q} \quad \text{oder} \quad \cot(qa) = i\frac{k}{q} \quad (+, -) \quad (3.4.34)$$

- $-V_0 \leq E < 0$ (Bindungszustände):

$$\Rightarrow k = i\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \in i\mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R} \quad (3.4.35)$$

Lösen die Gleichungen (3.4.34) und entsprechen den geraden/ungeraden Bindungszuständen im Potentialtopf (siehe 3.4.1).

- $E < -V_0$:

$$k \in i\mathbb{R}, q \in i\mathbb{R} \quad (3.4.36)$$

\Rightarrow keine Lösungen möglich.

- $E > 0$:

$$k \in \mathbb{R}, q \in \mathbb{R} \quad (3.4.37)$$

\Rightarrow ebenfalls keine $E \in \mathbb{R}$ möglich.

Diskussion der Pole

(a) Wir erinnern uns:

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{\text{Amplitude der nach rechts auslaufenden Welle}}{\text{Amplitude der nach links einlaufenden Welle}} \quad (3.4.38)$$

Wegen $E < 0$ muss $A = 0$ sein, da sonst ψ für $x \rightarrow \infty$ ins unendliche anwachsen würde. F und B 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.

Nun wollen wir $S(E)$ bei den Resonanzen ($E \cong E_R$) betrachten:

$$S(E) e^{2ika} = \frac{1}{\cos(2qa)} \frac{1}{1 - \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa)} \quad (3.4.39)$$

Bei E_R gilt: $2qa = n\pi$. Damit folgt:

$$\Rightarrow \cos(2qa)|_{E_R} = (-1)^n, \quad \tan(2qa)|_{E_R} = 0 \quad (3.4.40)$$

Wir entwickeln nun um $E = E_R$ nach Taylor:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) = \frac{2}{\Gamma} (E - E_R) + \dots \quad (3.4.41)$$

$$\text{wobei} \quad \frac{2}{\Gamma} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \frac{d(2qa)}{dE} \right]_{E=E_R} \quad (3.4.42)$$

Einsetzen von $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ ergibt:

$$\frac{2}{\Gamma} = \frac{\sqrt{2ma}}{2\hbar} \frac{2E_R + V_0}{\sqrt{E_R}(E_R + V_0)} \quad (3.4.43)$$

und für einen tiefen Potentialtopf ($V_0 \gg E_R$) erhalten wir:

$$\frac{2}{\Gamma} \cong \frac{\sqrt{2mV_0}a}{2\hbar} \frac{1}{\sqrt{V_0E_R}} = \frac{a}{v_R\hbar} = \frac{\xi}{2\sqrt{V_0E_R}} \quad (3.4.44)$$

wobei $v_R = \sqrt{2E_R/m}$ die klassische Einfallsgeschwindigkeit entsprechend E_R ist. Wir erhalten damit den Ausdruck:

$$S(E) e^{2ika} = (-1)^n \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2} \quad (3.4.45)$$

in der Nähe der Resonanzen. Daraus folgt, dass $S(E)$ Pole bei

$$E = E_R - i\frac{\Gamma}{2} \quad (3.4.46)$$

in der komplexen Energieebene hat. In der Nähe dieser Pole gilt:

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (3.4.47)$$

Lorentz- bzw. Breit-Wigner-Funktion

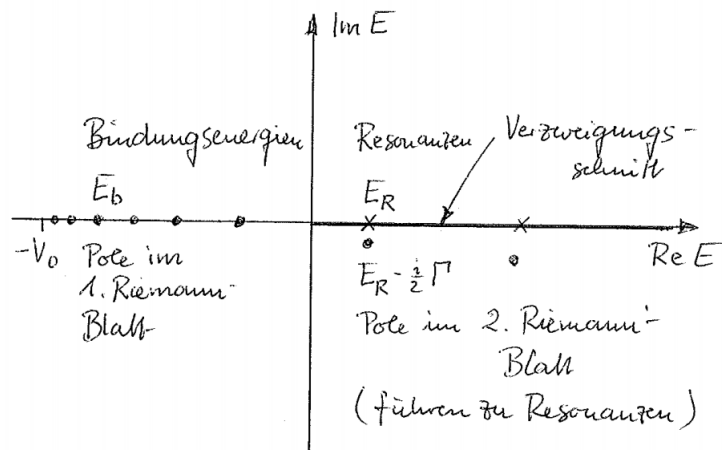


Abbildung 3.9: Pole von $S(E)$ in der komplexen Energieebene.

Bemerkungen:

- Pole bei $E = E_b$ im 1. Blatt sind die Bindungsenergien
- Pole bei $E = E_R - i\Gamma/2$ im 2. Blatt führen zu Resonanzen bei $E = E_R$.
- Die Breite einer Resonanz bei E_R wird durch $\Gamma = \Gamma(E_R)$ bestimmt.
- Schreibt man $S(E)$ mittels einer Phase,

$$S(E) = |S(E)| e^{i(\delta(E) - 2ka)}$$

$$\text{mit } \tan(\delta(E)) = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) \cong \frac{2}{\Gamma} (E - E_R) \quad (3.4.48)$$

in Resonanznähe, so findet man die Phasenverschiebung

$$\delta(E) = \arctan\left(\frac{2}{\Gamma} (E - E_R)\right) \quad (3.4.49)$$

zwischen durchgehender und einlaufender Welle:

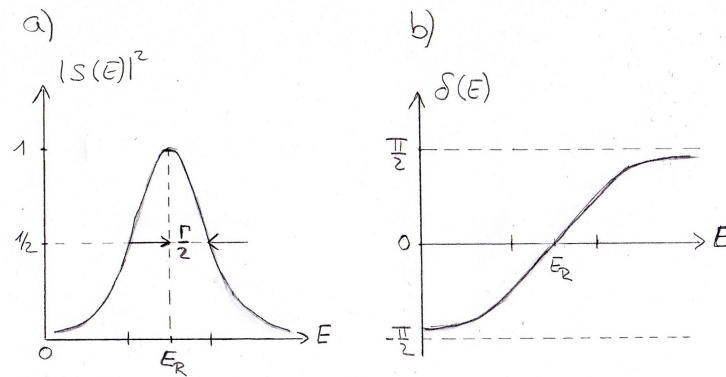


Abbildung 3.10: a) Breit-Wigner-Funktion, b) Phasenverschiebung

Dies entspricht dem typischen Resonanzverhalten wie es bereits aus der Mechanik und der E-Dynamik bekannt ist.

- Für $\xi \gg 1$, $|E_R| \ll V_0$ kann $\Gamma \ll E_R$ werden, was zu scharfen Resonanzen führt.
- Der Verzweigungsschnitt von \sqrt{E} ist hier willkürlich auf die positive Re E-Achse gelegt.

$$\Rightarrow \sqrt{E} = |E|^{1/2}, \quad \sqrt{E} e^{2\pi i} = -|E|^{1/2} \quad (3.4.50)$$

Damit liegen die Resonanzpole bei $E_R - i\Gamma/2$ im 2. Blatt, denn für sie soll im Limes $\Gamma \rightarrow 0$ gelten:

$$\sqrt{E_R - i\Gamma/2} \rightarrow +|E_R|^{1/2}. \quad (3.4.51)$$

4. Bewegung im Zentralpotential

Wir nähern uns den historisch gesehen ersten Höhepunkten der Quantenmechanik: Der Beschreibung der Eigenschaften des Wasserstoffatoms, insbesondere dessen spektralen Eigenheiten und deren Verhalten in äußeren elektromagnetischen Feldern.

4.1 Rotationen und Lie-Theorie

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. Dazu benötigen wir zunächst eine Formulierung der Drehungen als Operationen auf Zuständen.

Erinnerung:

$$\text{Observable} \quad \leftrightarrow \quad \text{Generator einer Transformation} \quad (4.1.1)$$

$$\hat{\mathbf{p}} \quad \leftrightarrow \quad \text{Translationen} \quad T = \exp(-i\Delta\mathbf{x}\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}) \quad (4.1.2)$$

$$H \quad \leftrightarrow \quad \text{Zeitentwicklung} \quad \hat{U} = \exp(-itH/\hbar). \quad (4.1.3)$$

Ebenso nähern wir uns dem *Drehimpuls* über Rotationen im \mathbb{R}^3 :

$$\begin{aligned} \text{Rotation } R : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ \mathbf{v} &\mapsto R\mathbf{v} \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

mit $RR^T = \mathbb{1} = R^T R$, so dass $\det R = 1$.

Die R bilden die Gruppe $SO(3)$ der Drehungen, bzgl. Multiplikation:

$$SO(3) = \{R \in \mathbb{R}^{3,3} : RR^T = \mathbb{1} \quad \text{mit} \quad \det R = 1\}. \quad (4.1.5)$$

Die konkrete Matrixdarstellung der $SO(3)$ ist:

$$\begin{aligned} R_x(\phi) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \\ R_y(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}, \\ R_z(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

Diese beschreiben aktive Drehungen, bei denen die Koordinatenachsen invariant bleiben. Eine allgemeine Drehung wird durch 3 Parameter beschrieben, denn $R^T R = \mathbb{1}$ stellt 6 Bedingungen an 9 Matrixelemente. Üblich sind

- über die drei Euler-Winkel, $R = R_z(\gamma)R_y(\beta)R_z(\alpha)$ mit $0 \leq \alpha, \beta, \gamma < 2\pi$,
- Drehung um Winkel α um vorgegebene Achse $\mathbf{n} = \boldsymbol{\alpha}/\alpha$. Beachte dabei, dass die Drehung um \mathbf{n} um Winkel α und die Drehung um $-\mathbf{n}$ um Winkel $2\pi - \alpha$ identisch sind. Deshalb können wir α gemäß $0 \leq \alpha \leq \pi$ einschränken, müssen aber für $\alpha = \pi$ die Drehung um \mathbf{n} und $-\mathbf{n}$ identifizieren.

Bemerkung: Da die Gruppe $SO(3)$ *kontinuierlich* von 3 reellen Parametern abhängt, bildet sie ein Beispiel einer *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.

Konkret bedeutet dies:

Sei $g_\beta \in G$ das Gruppenelement zu Parameter β . Dann ist

$$g_{\beta_1} g_{\beta_2} = g_{\beta_3} \in G. \quad (4.1.7)$$

mit einer glatten¹ Funktion

$$\beta_3 = f(\beta_1, \beta_2). \quad (4.1.8)$$

Die glatte Funktion $f(\beta_1, \beta_2)$ muss nun verträglich sein mit

- dem Assoziativgesetz, d.h.

$$\begin{aligned} (g_{\beta_1} g_{\beta_2}) g_{\beta_3} &= g_{\beta_1} (g_{\beta_2} g_{\beta_3}), \\ g_{f(\beta_1, \beta_2)} g_{\beta_3} &= g_{\beta_1} g_{f(\beta_2, \beta_3)}, \\ \Rightarrow f(f(\beta_1, \beta_2), \beta_3) &= f(\beta_1, f(\beta_2, \beta_3)); \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

- der Existenz der Eins: Wenn $\beta = 0$ dem Element $g_{\beta=0} = \mathbb{1}$ entspricht, ist

$$f(\beta, 0) = f(0, \beta) = \beta; \quad (4.1.10)$$

- der Existenz des Inversen:

$$(g_\beta)^{-1} =: g_{\beta^{-1}} \quad \text{mit} \quad f(\beta^{-1}, \beta) = 0. \quad (4.1.11)$$

Beachte:

- Rotationen um verschiedene Achsen kommutieren nicht, z.B.

$$R_x(\alpha) R_y(\beta) \neq R_y(\beta) R_x(\alpha). \quad (4.1.12)$$

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

$$R_{\mathbf{n}}(\phi) \quad \text{mit} \quad R_{\mathbf{n}}(\phi_1) R_{\mathbf{n}}(\phi_2) = R_{\mathbf{n}}(\phi_1 + \phi_2). \quad (4.1.13)$$

Aus der Glattheit von f folgt:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} g_\beta = \mathbb{1}. \quad (4.1.14)$$

Wir betrachten wieder infinitesimale Transformationen in der Nähe der $\mathbb{1}$:

$$R = \mathbb{1} + d\Omega + \mathcal{O}(d\Omega^2), \quad (4.1.15)$$

wobei $R^T R = \mathbb{1}$ erfordert, dass $d\Omega^T = -d\Omega$.

Für die $SO(3)$ Drehungen ergibt sich

$$R_j = \mathbb{1} - i\delta\phi_j F_j, \quad j = x, y, z \quad (4.1.16)$$

mit

$$F_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad F_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.17)$$

F_i ist hermitesch, also gilt $F_i^\dagger = F_i$.

Die F_i bezeichnet man als *Erzeugende* von $SO(3)$. Die Hintereinanderausführung der Gruppenmultiplikation für infinitesimale Transformationen entspricht in erster Ordnung der Addition der Erzeugenden:

$$R_i(\delta\alpha)R_j(\delta\beta) = (\mathbb{1} - i\delta\alpha F_i)(\mathbb{1} - i\delta\beta F_j) \quad (4.1.18)$$

$$= \mathbb{1} - i(\delta\alpha F_i + \delta\beta F_j) + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (4.1.19)$$

Das bedeutet, dass die Erzeugenden F_i einen Vektorraum bezüglich der Addition bilden. Die nicht-abelsche Struktur der Gruppe ist erst in 2. Ordnung sichtbar und führt unweigerlich zum Kommutator zweier Erzeugender

$$R_i(\delta\alpha)R_j(\delta\beta) = R_j(\delta\beta)R_i(\delta\alpha) - \delta\alpha\delta\beta [F_i, F_j] + \mathcal{O}(\delta\phi^3). \quad (4.1.20)$$

Der Kommutator zweier Erzeugender ist wieder Erzeugende, das Produkt jedoch nicht, da für $M, N \in \mathfrak{g}$ gilt:

$$(i[M, N])^\dagger = i[M, N] \quad \text{aber} \quad (MN)^\dagger \neq (MN). \quad (4.1.21)$$

Die Erzeugenden der Lie-Gruppe G bilden eine sogenannte *Lie-Algebra* \mathfrak{g} bzgl. der Verknüpfung $i[\ , \]$.

Definition 4.2. Eine Lie-Algebra \mathfrak{g} ist ein Vektorraum mit einer bilinearen Verknüpfung

$$\cdot : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}, \quad (4.1.22)$$

mit den Eigenschaften

- $A \cdot B = -B \cdot A$,
- $A \cdot (B \cdot C) + B \cdot (C \cdot A) + C \cdot (A \cdot B) = 0$.

$i[\ , \]$ erfüllt diese Eigenschaften.

¹Glatt = unendlich oft differenzierbar

Definition 4.3. Eine endlich-dimensionale Lie-Algebra ist definiert durch die Strukturkonstanten f_{ab}^c in

$$F_a \cdot F_b = f_{ab}^c F_c. \quad (4.1.23)$$

für eine Basis $\{F_a\}$ des Vektorraums, $a = 1, \dots, N$

Die f_{ab}^c erfüllen

- $f_{AB}^C = -f_{BA}^C$,
- $f_{AB}^D f_{CD}^E + f_{CA}^D f_{BD}^E + f_{BC}^D f_{AD}^E = 0$ (Jacobi-Identität).

Bemerkung: Für $\mathfrak{g} = \mathfrak{so}(3)$, die Lie-Algebra der Lie-Gruppe $SO(3)$, finden wir:

$$i[F_i, F_j] = -\epsilon_{ijk} F_k \quad (4.1.24)$$

(oder, wie üblicherweise geschrieben wird: $[F_i, F_j] = i\epsilon_{ijk} F_k$).

Die Strukturkonstanten der $\mathfrak{so}(3)$ sind also $f_{jk}^i = -\epsilon_{ijk}$.

4.2 Drehimpuls und Darstellungen der $\mathfrak{so}(3)$

Wir betrachten wieder infinitesimale Drehungen um eine Achse \mathbf{n} mit Winkel $\delta\phi$:

$$R_{\mathbf{n}}(\delta\phi) = \mathbb{1} - i \delta\phi \mathbf{G} \mathbf{n} \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}^\dagger = \mathbf{G}. \quad (4.2.1)$$

Klassisch erzeugt der Drehimpuls Drehungen, so dass wir für den *Rotationsoperator*, welcher entsprechend eines quantenmechanischen *Zustandsvektors* transformiert, wieder die Äquivalenz

$$\hat{\mathbf{J}} = \hbar \mathbf{G} \quad (4.2.2)$$

postulieren, welche sich wieder im entsprechenden Heisenbergbild überprüfen lässt:

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{J}}, \quad (4.2.3)$$

bzw. für endliche Drehungen:

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \hat{\mathbf{J}}}. \quad (4.2.4)$$

Lie-Struktur des Bahndrehimpulses

Analog zur klassischen Physik ($\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$) gilt quantenmechanisch:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (4.2.5)$$

In Komponenten: $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$

Aus $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ findet man leicht: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

$\hat{\mathbf{L}}$ ist eine mögliche Darstellung der Drehimpulsalgebra $\mathfrak{so}(3)$. Als eine weitere werden wir später den *Spin* kennenlernen.

Konzept der Darstellungen einer Gruppe bzw. Algebra

Wie transformiert sich ein gegebener Zustand $|\alpha\rangle$ aus dem Hilbertraum unter $R \in SO(3)$?

$$R: |\alpha\rangle \rightarrow |R\alpha\rangle = \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle \quad (4.2.6)$$

Beispiel: Ortseigenzustand $|\mathbf{x}\rangle$, $|R\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$, mit $\mathbf{x}' = R\mathbf{x}$, wobei R hier auch die kanonische Darstellung mittels Drehmatrizen auf dem \mathbb{R}^3 bezeichnet.

Konzept:

- Gegeben sei abstrakte Gruppe G , z.B. Lie-Gruppe $SO(3)$
- Gegeben sei abstrakter VR V z.B. Hilbertraum der $|\alpha\rangle$

Zu jedem $g \in G$, z.B. $R \in SO(3)$, definieren wir einen linearen Operator

$$\mathcal{D}(g): V \rightarrow V, \quad (4.2.7)$$

der die Transformation g auf V realisiert und der Gruppenstruktur genügt:

$$\mathcal{D}(g_1 \circ g_2) = \mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2) \quad (4.2.8)$$

Insbesondere muss \mathcal{D} invertierbar sein und

$$\mathcal{D}(g^{-1}) = \mathcal{D}^{-1}(g).$$

$\mathcal{D}(G)$ heißt dann *Darstellung von G auf dem Darstellungsraum V* .

Beispiel:

- Die Drehmatrizen R_i (4.1.6) bilden eine Darstellung der $SO(3)$ auf dem \mathbb{R}^3
- Die Generatormatrizen F_i (4.1.17) bilden eine Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$ auf dem \mathbb{R}^3 .

Die *Darstellungstheorie* 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).

Bemerkung:

- Aus der Normerhaltung unter R folgt: $\mathcal{D}(R)^\dagger = \mathcal{D}(R)^{-1}$, wie sich für $\mathcal{D}(R_n) = \hat{R}_n$ (4.2.3) leicht zeigen lässt.
- Allgemein gilt (ohne Beweis): Jede Darstellung einer kompakten² Lie Gruppe kann unitär gewählt werden.
- Jede Darstellung der Lie-Algebra muss deren Struktur genügen (Strukturkonstanten, Jacobi, etc.)
- \hat{L} ergibt die Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$, welche die Rotation $R: |\mathbf{x}\rangle \rightarrow |R\mathbf{x}\rangle$ generiert.

4.3 Eigenwerte und Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses

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 $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, stellen wir fest, dass gilt

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0 \quad \forall k = 1, 2, 3, \quad (4.3.1)$$

Beweis (im Folgenden ist der Hut auf \hat{J}_i wieder weggelassen):

$$\begin{aligned} [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_x, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y = 0. \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Wir definieren die gemeinsame Eigenbasis von \mathbf{J}^2 und J_z :

$$\begin{aligned} J^2|a, b\rangle &= a|a, b\rangle, \\ J_z|a, b\rangle &= b|a, b\rangle. \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

Um die möglichen Werte für a, b zu bestimmen, definieren wir die Operatoren

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y \quad (4.3.4)$$

Aus der Definition folgt:

$$J_+^\dagger = J_-, \quad (4.3.5)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad (4.3.6)$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \quad (4.3.7)$$

$$[\mathbf{J}^2, J_\pm] = 0. \quad (4.3.8)$$

Beobachtung: (4.3.7) ist analog zum harmonischen Oszillator:

$$[N, a] = -a \quad \text{und} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (4.3.9)$$

Analog zur Vorgehensweise beim harmonischen Oszillator findet man:

$$J_z J_\pm |a, b\rangle = ([J_z, J_\pm] + J_\pm J_z)|a, b\rangle = (\pm\hbar + b)J_\pm |a, b\rangle \quad (4.3.10)$$

Damit stellen J_\pm die Leiteroperatoren dar, da J_+ den Eigenwert von J_z erhöht und J_- den Eigenwert erniedrigt.

Aus (4.3.8) folgt:

$$\mathbf{J}^2 J_\pm |a, b\rangle = J_\pm \mathbf{J}^2 |a, b\rangle = a J_\pm |a, b\rangle. \quad (4.3.11)$$

Daraus folgern wir:

$$J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle, \quad J_- |a, b\rangle = c_- |a, b - \hbar\rangle. \quad (4.3.12)$$

Um a, b zu finden, gehen wir ähnlich vor wie beim harmonischen Oszillator. Zunächst schreiben wir

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_z^2 + J_y^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2. \quad (4.3.13)$$

Der Operator $\mathbf{J}^2 - J_z^2$ positiv-semidefinit ist, denn $\forall |\psi\rangle$:

$$\langle \psi | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | J_+ J_- + J_- J_+ | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\|J_- |\psi\rangle\|^2 + \|J_+ |\psi\rangle\|^2) \geq 0. \quad (4.3.14)$$

Also gilt:

$$\langle a, b | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | a, b \rangle = (a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle \geq 0, \quad (4.3.15)$$

Daraus folgt:

$$a \geq b^2 \quad (4.3.16)$$

Da jedoch $J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle$, muss es einen Wert b_{\max} geben so dass $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$, damit $b^2 \leq a$ nicht verletzt wird. Damit gilt auch: $J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$.

Das Produkt $J_{\mp}J_{\pm}$ lässt sich leicht berechnen:

$$J_{\mp}J_{\pm} = (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 \pm i(J_yJ_x - J_xJ_y) = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z. \quad (4.3.17)$$

Daraus folgern wir:

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|a, b_{\max}\rangle &= 0, \\ \Rightarrow (a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max})|a, b_{\max}\rangle &= 0 \\ \Rightarrow a &= b_{\max}(b_{\max} + \hbar). \end{aligned} \quad (4.3.18)$$

Analog muss es einen Wert b_{\min} geben, so dass

$$J_-|a, b_{\min}\rangle = 0 \quad (4.3.19)$$

Daraus folgt wieder analog:

$$\begin{aligned} 0 = J_+J_-|a, b_{\min}\rangle &= (\mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|a, b_{\min}\rangle \\ &= (a - b_{\min}^2 + \hbar b_{\min})|a, b_{\min}\rangle \\ \Rightarrow a &= b_{\min}(b_{\min} - \hbar) \end{aligned} \quad (4.3.20)$$

Aus (4.3.18) und (4.3.20) folgt dann:

$$b_{\max} = -b_{\min} \quad \text{mit } b_{\max} \geq 0. \quad (4.3.21)$$

Dies lässt sich auch schreiben als

$$b_{\max} \geq b \geq -b_{\max}. \quad (4.3.22)$$

Beginnen wir nun also mit dem Zustand $|a, b_{\max}\rangle$. Wir haben gerade gesehen, 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:

$$J_-^n|a, b_{\max}\rangle = c|a, b_0\rangle, \quad \text{mit } J_-^n|a, b_0\rangle = 0. \quad (4.3.23)$$

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 $b_0 = b_{\min}$. Weiter folgt daraus

$$\begin{aligned} b_{\max} - n\hbar &= b_{\min} = -b_{\max} \\ b_{\max} &= \frac{1}{2}n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

Wir führen nun eine neue Notation ein und definieren $j = \frac{n}{2}$. In dieser Notation finden wir

$$a = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{und} \quad b = \hbar m, \quad (4.3.25)$$

wobei $m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\}$.

Bemerkung:

$$j \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow m \in \mathbb{Z} \quad \text{oder} \quad j \in \frac{2\mathbb{N}_0 + 1}{2} \Rightarrow m \in \frac{2\mathbb{Z} + 1}{2}. \quad (4.3.26)$$

Zusammenfassung: Eigenzustände von \mathbf{J}^2 und J_z

$$\mathbf{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \quad (4.3.27)$$

$$J_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle, \quad (4.3.28)$$

mit $m \in \{j, (j-1), \dots, (-j+1), -j\}$ und $j \in \mathbb{Z}$ oder $j \in \frac{2\mathbb{Z}+1}{2}$.

Wir wollen nun noch die Zustände $|j, m\rangle$ bestimmen, insbesondere die Koeffizienten c_{jm}^\pm in $J_\pm|j, m\rangle = c_{jm}^\pm|j, m \pm 1\rangle$.

analog zum harmonischen Oszillator finden wir aus

$$\begin{aligned} \|J_\pm|j, m\rangle\|^2 &= |c_{jm}^\pm|^2 \langle j, m \pm 1|j, m \pm 1\rangle = |c_{jm}^\pm|^2 \\ &= \langle j, m|J_\pm^\dagger J_\pm|j, m\rangle = \langle j, m|J_- \mp J_+|j, m\rangle. \end{aligned} \quad (4.3.29)$$

Verwenden wir nun $J_- J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ so können wir die Gleichungskette (4.3.29) fortsetzen:

$$= \langle j, m|\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z|j, m\rangle = (j(j+1) - m^2 - m)\hbar^2. \quad (4.3.30)$$

Damit haben wir die Eigenwerte c_{jm}^\pm bis auf eine freie Phase ϕ_{jm}^\pm in $c_{jm}^\pm = |c_{jm}^\pm| \exp\{i\phi_{jm}^\pm\}$, die wir konstant 0 gewählt haben, bestimmt:

$$|c_{jm}^\pm|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m(m+1)) = \hbar^2[(j-m)(j+m+1)]. \quad (4.3.31)$$

Wir fassen unser Ergebnis zusammen als

$$J_\pm|j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar|j, m \pm 1\rangle. \quad (4.3.32)$$

Bemerkung:

- Die $(2j+1)$ Zustände $|j, m\rangle$, für gegebenes $j \geq 0$ sind orthogonal.
- 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":

$$\mathbf{J}^2 \mathcal{D}(R)|j, m\rangle = j(j+1)\mathcal{D}(R)|j, m\rangle. \quad (4.3.33)$$

- $\{|j, m\rangle\}$ besitzt keine invarianten Unterräume unter Drehungen $\mathcal{D}(R)$. Man nennt Darstellungen mit dieser Eigenschaft *irreduzibel*.

4.4 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Nun beschäftigen wir uns mit der Frage, welche dieser Darstellungen in der Natur realisiert sind.

Wir betrachten zunächst den Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ mit Ortsraumdarstellung

$$\langle \mathbf{x} | L_i | \alpha \rangle = L_i \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle = L_i \psi_\alpha(\mathbf{x}) \quad \text{für} \quad (4.4.1)$$

$$L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x). \quad (4.4.2)$$

Nach Übergang zu sphärischen Koordinaten

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \quad (4.4.3)$$

findet man

$$\begin{aligned} \partial_\phi &= \frac{\partial x}{\partial \phi} \partial_x + \frac{\partial y}{\partial \phi} \partial_y + \frac{\partial z}{\partial \phi} \partial_z \\ &= -r \sin \theta \sin \phi \partial_x + r \sin \theta \cos \phi \partial_y \\ &= -y \partial_x + x \partial_y \\ &= \frac{i}{\hbar} L_z. \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Damit ist

$$L_x = -i\hbar(-\sin \phi \partial_\theta - \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (4.4.5)$$

$$L_y = -i\hbar(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi), \quad (4.4.6)$$

$$L_z = -i\hbar \partial_\phi. \quad (4.4.7)$$

Daraus folgt:

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) \right]. \quad (4.4.8)$$

Wir suchen nun die Eigenfunktionen $\langle \mathbf{x} | l, m \rangle$ zu $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$. Da L_i unabhängig von r ist, genügt eine Darstellung in Kugelkoordinaten θ und ϕ :

$$Y_l^m(\theta, \phi) := \langle \theta, \phi | l, m \rangle \quad (4.4.9)$$

sind die entsprechenden *Kugelflächenfunktionen*.

Aus $L_z | l, m \rangle = m\hbar | l, m \rangle$ und $\mathbf{L}^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l+1) | l, m \rangle$ folgen die Differentialgleichungen

$$[\partial_\phi - im] Y_l^m(\theta, \phi) = 0, \quad (4.4.10)$$

$$\left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + l(l+1) \right] Y_l^m(\theta, \phi) = 0. \quad (4.4.11)$$

Diese lassen sich mit einem *Separationsansatz* lösen:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \Phi_m(\phi) \chi_{lm}(\theta). \quad (4.4.12)$$

Aus(4.4.10) ergibt sich:

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (4.4.13)$$

Eingesetzt in (4.4.11) ergibt dies

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_{\theta} (\sin \theta \partial_{\theta}) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] \chi_{lm}(\theta) = 0. \quad (4.4.14)$$

Unter räumlicher Drehung um 2π muss der Eigenzustand $|\mathbf{x}\rangle = |r, \theta, \phi\rangle$ invariant sein. Das bedeutet

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \quad \Rightarrow \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (4.4.15)$$

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 (4.4.14) mit der Variablensubstitution

$$\xi = \cos \theta \quad \Rightarrow \quad \partial_{\theta} = -\sin \theta \partial_{\xi} \quad (4.4.16)$$

und

$$\chi_{lm}(\theta) \rightarrow P_{lm}(\xi). \quad (4.4.17)$$

Damit erhalten wir die Differentialgleichung:

$$\left(\frac{d}{d\xi} (1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} + l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) P_{lm}(\xi) = 0. \quad (4.4.18)$$

Die Lösungen dieser Differentialgleichung sind die *assozierten Legendrepolynome*

$$P_{lm}(\xi) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \xi^2)^{m/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^{l+m} (\xi^2 - 1)^l, \quad m \geq 0, \quad (4.4.19)$$

welche sich mittels

$$P_{lm}(\xi) = (1 - \xi^2) \left(\frac{d}{d\xi} \right)^m P_l(\xi), \quad (4.4.20)$$

aus den *Legendre Polynomen* $P_l(\xi)$ ableiten lassen.

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^l (\xi^2 - 1)^l \quad (4.4.21)$$

Sie sind folgendermaßen normiert:

$$\int_{-1}^1 d\xi P_{lm}(\xi) P_{l'm}(\xi) = \delta_{ll'} \underbrace{\frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}}_{=: |N_{\chi}|^{-2}} \quad m \geq 0 \quad (4.4.22)$$

Einige Eigenschaften der (assozierten) Legendre-Polynomen

- 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 :

$$(l+1)P_{l+1} = (2l+1)\xi P_l - lP_{l-1}, \quad (4.4.23)$$

$$(1-\xi^2)d_\xi P_l = l(P_{l-1} - \xi P_l). \quad (4.4.24)$$

- Die niedrigsten Legendre Polynome lauten:

$$P_0 = 1, \quad P_1 = \xi, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1), \quad P_3 = \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi), \quad \dots \quad (4.4.25)$$

- Es gilt folgende Symmetrie:

$$P_{lm}(-\xi) = (-1)^{l+m} P_{lm}(\xi) \quad (4.4.26)$$

- Außerdem gilt:

$$P_{l0} = P_l, \quad P_{ll} = \underbrace{(2l-1)!!}_{\equiv (2l-1)(2l-3)\dots 1} (1-\xi^2)^{l/2} \quad (4.4.27)$$

Die Gesamtlösung für die Kugelflächenfunktionen lautet also:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} N_{lm} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (4.4.28)$$

$$\text{mit } N_{lm} = N_\phi N_\chi = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}. \quad (4.4.29)$$

Wählt man $m = 0$ so ergibt sich

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (4.4.30)$$

Dabei haben wir die Phase $(-1)^{(m+|m|)/2}$ so gewählt, dass

$$(L_-)^m Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^0(\theta, \phi). \quad (4.4.31)$$

Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen:

$$\text{Symmetrie} \quad Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*, \quad (4.4.32)$$

$$\text{Orthogonalität} \quad \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (4.4.33)$$

$$\text{Vollständigkeit} \quad \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^{m*}(\theta', \phi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta}, \quad (4.4.34)$$

$$\text{Additionstheorem} \quad \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^{m*}(\theta', \phi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta). \quad (4.4.35)$$

Wie wirkt der Paritätsoperator $P: \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ auf die Kugelflächenfunktionen?

$$\begin{aligned} P: \mathbf{x} &\rightarrow -\mathbf{x} \\ \Rightarrow P\psi(\mathbf{x}) &= \psi(-\mathbf{x}) = \psi(\pi - \theta, \phi + \pi) \\ \Rightarrow PY_l^m(\theta, \phi) &= Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) \\ &\stackrel{(4.4.26)}{=} e^{im\pi} (-1)^{l+|m|} Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (4.4.36)$$

Zur Verdeutlichung geben wir die Kugelflächenfunktionen für die ersten Werte an:

- $l = 0$: = s-Orbital: $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
- $l = 1$: = p-Orbital: $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$, $Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
- $l = 2$: = d-Orbital: $Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \dots$

4.5 Bewegung im Zentralpotential

Wir betrachten ein Teilchen im radialsymmetrischen Potential $V(\mathbf{x}) = V(r)$. Der zugehörige Hamilton-Operator ist dann

$$H = \frac{1}{2M} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{r}) \quad M = \text{Masse des Teilchens} \quad (4.5.1)$$

Aufgrund allgemeiner Prinzipien stellen wir fest:

- H, \mathbf{L}^2, L_z sind gemeinsam diagonalisierbar. Der Grund dafür ist, dass \mathbf{L} Drehungen generiert und Operatoren \hat{A} transformieren wie

$$\hat{A} \rightarrow (e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}})^\dagger \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \quad (4.5.2)$$

beziehungsweise infinitesimal

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \delta \phi \mathbf{n} \cdot [\hat{A}, \mathbf{L}]. \quad (4.5.3)$$

Damit impliziert die Invarianz unter Drehungen also

$$[H, L_i] = 0 = [H, \mathbf{L}^2]. \quad (4.5.4)$$

- Die Energieeigenwerte sind entartet bezüglich der L_z -Quantenzahl m : Betrachte den Energieeigenzustand $|E_{l,m}, l, m\rangle$ mit $H|E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m}|E_{l,m}, l, m\rangle$. Wegen $[H, L_{\pm}] = 0$ ist

$$HL_{\pm}|E_{l,m}, l, m\rangle = L_{\pm}H|E_{l,m}, l, m\rangle = E_{l,m}L_{\pm}|E_{l,m}, l, m\rangle. \quad (4.5.5)$$

Wir haben aber bereits gesehen, dass L_{\pm} die Quantenzahl m erhöht / erniedrigt. Deshalb müssen die Energieeigenwerte unabhängig von m sein. Umgekehrt ausgedrückt lautet dieses Argument, dass die Entartung der Energieeigenwerte bezüglich m eine weitere Erhaltungsgröße jenseits von L_z - hier L_{\pm} bzw. \mathbf{L} - impliziert.

Betrachten wir nun die Darstellung von H in Kugelkoordinaten. Dazu schreiben wir zunächst den Impulsoperator als

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \text{ mit } \nabla = \mathbf{e}_r\partial_r + \mathbf{e}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta + \mathbf{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi. \quad (4.5.6)$$

Die explizite Auswertung von $\Delta = \nabla^2$ ergibt:

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 + \frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)\right]. \quad (4.5.7)$$

Ein Vergleich mit dem Operator \mathbf{L}^2 in Gleichung (4.4.8) führt uns sofort zu

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2\hbar^2}\mathbf{L}^2. \quad (4.5.8)$$

Damit können wir H schreiben als

$$H = \frac{p_r^2}{2M} + \frac{\mathbf{L}^2}{2Mr^2} + V(r), \quad (4.5.9)$$

wobei

$$p_r = -i\hbar\left(\partial_r + \frac{1}{r}\right) \quad (4.5.10)$$

der Radialimpuls ist.

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 $\mathbf{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2l(l+1)|l, m\rangle$ folgt die radiale Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\partial_r + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{\hbar^2l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r). \quad (4.5.11)$$

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 eindimensionalen Form vereinfacht:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r). \quad (4.5.12)$$

Wir führen ein effektives Potential ein:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2l(l+1)}{2Mr^2}}_{\text{abstoßendes Zentrifugalpotential } V_{\text{Zentr.}}} \quad (4.5.13)$$

Beispiel: $V(r) \propto -1/r$ (Coulombpotential)

Abhängig von der relativen Stärke von V und $V_{\text{Zentr.}}$ existieren einer oder mehrere Bindungszustände. Von den entsprechenden Lösungen erwarten wir

- Normierbarkeit:

$$\int d^3x |\psi(x)|^2 = \int d\Omega |Y_l^m|^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty, \quad (4.5.14)$$

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 $r \rightarrow 0$:

$$\Delta \left(\frac{u(r)}{r} \right) = \left(\Delta \frac{1}{r} \right) u(r) + \dots \text{ (Produktregel)}. \quad (4.5.15)$$

Es gilt $\Delta \frac{1}{r} = 4\pi\delta(r)$. Das bedeutet, dass wenn $V(r) \approx \delta(r)$, $u(0) = 0$ gelten muss.

Wir bestimmen die Form der asymptotischen Lösungen für

- $r \rightarrow 0$

Unter der Annahme, dass $V_{\text{zentr}} \cong 1/r^2$ bei $r \rightarrow 0$ dominiert (wie für das Coulomb-Potential $\propto -1/r$ der Fall), ergibt sich asymptotisch für $r \rightarrow 0$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right] u(r) = 0. \quad (4.5.16)$$

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

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \quad (4.5.17)$$

aber $u(0) = 0$ erzwingt $B = 0$.

- $r \rightarrow \infty$

Unter der Annahme $V_{\text{eff}}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = Eu(r). \quad (4.5.18)$$

Für geeignete V_{eff} der Form existieren Bindungszustände mit $E < 0$, also

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = |E|u(r) \quad \Rightarrow \quad u(r) = e^{\pm\kappa r} \text{ mit } \kappa = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar}. \quad (4.5.19)$$

Die Normierbarkeit der Wellenfunktion schränkt die Lösung ein auf $u(r) = Ce^{-\kappa r}$.

4.6 Das Coulombpotential

Das Potential für ein Elektron der Ladung $-e_0$ in Wechselwirkung mit einem Atomkern der Ladung Ze_0 lautet

$$V(r) \stackrel{SI}{=} -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} \stackrel{cgs}{=} -\frac{e_0^2 Z}{r} \quad (4.6.1)$$

mit $e_0 \stackrel{cgs}{=} 4.8 \cdot 10^{-10} esu$, $q \stackrel{SI}{=} 1.602 \cdot 10^{-19} C$, und $Z = \text{Kernladungszahl}$.

Wir führen die einheitenlose Kombination $\rho = \kappa r$ mit $\kappa = \frac{\sqrt{2M|e|}}{\hbar}$ ein. Damit können wir für die Bindungszustände ($E < 0$) schreiben:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u(\rho) = 0 \quad \text{mit } \rho_0 = e_0^2 Z \frac{\kappa}{|E|}. \quad (4.6.2)$$

Nun machen wir einen Ansatz für $u(\rho)$, welches dem asymptotischen Verhalten für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$ entspricht

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho). \quad (4.6.3)$$

Eingesetzt in die Gleichung (4.6.2) ergibt sich

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dw}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))w(\rho) = 0. \quad (4.6.4)$$

Dies ist die Laguerresche Differentialgleichung, wenn ρ_0 eine gerade ganze Zahl ist. Um die Bedingungen an ρ_0 zu bestimmen, wählen wir einen Potenzreihenansatz

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (4.6.5)$$

($k < 0$ ist kann aufgrund der Regularität bei $\rho \rightarrow 0$ ausgeschlossen werden.) Wir erhalten mit diesem Ansatz die Gleichung

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + (\rho_0 - 2(l+1))\rho^k] = 0. \quad (4.6.6)$$

Da die Gleichung für alle ρ gelten muss, müssen die Koeffizienten aller Ordnungen von ρ^k separat verschwinden. Das bedeutet

$$a_{k+1}((k+1)k + 2(l+1)(k+1)) + a_k(-2k + \rho_0 - 2(l+1)) = 0. \quad (4.6.7)$$

Dies entspricht der Rekursionsrelation

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k. \quad (4.6.8)$$

Wir stellen uns nun die Frage, ob die Lösung normierbar ist. Betrachten wir das asymptotische Verhalten der Reihe, welches durch $a_k, k \rightarrow \infty$ bestimmt wird. In diesem Limes gilt

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2}{k}. \quad (4.6.9)$$

Daher beschränkt die Funktion $e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} 2^k \rho^k$ die Funktion w für $\rho \rightarrow \infty$ nach oben, wobei w für $\rho \rightarrow \infty$ gegen $e^{2\rho}$ konvergiert. $w \exp(-\rho) \rho^{l+1} \sim \rho^{l+1} \exp(\rho)$ ist damit nicht normierbar. Aus der Forderung nach der Normierbarkeit der Wellenfunktion folgt nun die Bedingung, dass die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ abbricht, d.h.

$$\exists N : a_k = 0 \quad \forall k \geq N+1, \quad N \in \mathbb{N}_0. \quad (4.6.10)$$

Aus der Rekursionsformel folgt damit

$$2(N + l + 1) - \rho_0 = 0. \quad (4.6.11)$$

Wir definieren nun die *Hauptquantenzahl* $n := N + l + 1$ und finden damit die *Quantisierungsbedingung* an ρ_0 und damit die Eigenenergien E :

$$\rho_0 \equiv e_0^2 Z \frac{\kappa}{|E|} = 2n \text{ mit } \kappa = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar}. \quad (4.6.12)$$

Die resultierenden *Energieeigenwerte* sind

$$E_n = \frac{-MZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{(Ze_0)^2}{2an^2} = -\frac{1}{2}mc^2 \left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2$$

$$a = \frac{\hbar^2}{Mc_0^2} = 0.529\text{\AA} \text{ (Bohr-Radius)} \quad Mc^2 = 0.511\text{MeV} \text{ (Ruhemasse des } e^-)$$

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \text{ Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante} \quad (4.6.13)$$

Das Energiespektrum ist entartet:

- Für gegebenes n sind alle Werte $l = 0, 1, \dots, n - 1$ möglich
- Für alle diese l ist $m = l, l - 1, \dots, -l$ möglich

Das bedeutet, dass es zu jedem E_n

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (4.6.14)$$

Eigenzustände gibt.

Das bedeutet der *Entartungsgrad* 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 $V(r) = -\frac{1}{r}$ und deutet auf eine Symmetrie über $SO(3)$ hinaus hin.

Die $SO(3)$ Quantenzahlen sind l, m offenbar nicht ausreichend zur Spezifizierung des Eigenwertes von H . Folglich gibt es einen weiteren Operator \hat{O} mit

$$[H, \hat{O}] = 0 \quad (4.6.15)$$

Für $V(r) = \frac{e_0^2}{r}$ ist dies der

Lenz-Runge-Vektor

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2M}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e_0^2}{r} \hat{\mathbf{r}}. \quad (4.6.16)$$

Für ihn kann man zeigen, dass gilt

$$[\hat{\mathbf{A}}, H] = 0. \quad (4.6.17)$$

Klassisch bedeutet die Erhaltung des Lenz-Runge-Vektors, dass die Hauptachse der elliptischen Bahn feststeht, sowie deren Exzentrizität. Abweichungen vom $1/r$ -Potential brechen diese Erhaltung und führen in erster Ordnung zur Periheldrehung (z.B. Mehrkörpersysteme oder Einstein-Gravitation).

Aus

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k, \quad (4.6.18)$$

(Beweis: Übungen) folgt, dass \mathbf{A} als Vektor transformiert und A_z die Entartung der Energieeigenwerte aufhebt. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass

$$\hat{J}_i^\pm = \frac{1}{2}(\hat{L}_i \pm c\hat{A}_i) \quad (4.6.19)$$

eine $so(3) \times so(3)$ Algebra bilden, welche eine algebraische Lösung des Coulomb-Problems ermöglicht. Man findet die Kommutatorrelation

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{2}{Me_0^4} \hat{H} \hat{L}_k, \quad (4.6.20)$$

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

$$\hat{j}_i^\pm = \frac{1}{2} \left(\hat{L}_i \pm \sqrt{-\frac{Me_0^4}{2E}} \hat{A}_i \right), \quad (4.6.21)$$

welche beide jeweils eine Generatorbasis der $so(3)$ Lie-Algebra bilden:

$$[J_i^\pm, J_j^\pm] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k^\pm, \quad [J_i^\pm, J_j^\mp] = 0. \quad (4.6.22)$$

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

$$(\mathbf{J}^\pm)^2 |E, j_\pm\rangle = \hbar^2 j_\pm(j_\pm + 1) |E, j_\pm\rangle \quad (4.6.23)$$

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

$$[2((\mathbf{J}^+)^2 + (\mathbf{J}^-)^2) + \hbar^2] |E, j_\pm\rangle = \hbar^2 [4j_+(j_+ + 1) + 1] |E, j_\pm\rangle = -\frac{Me_0^4}{2E} |E, j_\pm\rangle \quad (4.6.24)$$

Damit ergibt sich für die Energieeigenwerte

$$E = -\frac{Me_0^4}{2(2j_+ + 1)^2 \hbar^2}, \quad (4.6.25)$$

wobei die $j_+ \in \mathbb{N}_0/2$ sind (halb- oder ganzzahlig, entsprechend der $SO(3)$). Dies entspricht der zuvor abgeleiteten Lösung.

Nun besprechen wir noch die expliziten Lösungen der Laguerreschen DGL, d.h. die Radialwellenfunktion des Coulombproblems: Mit $\rho_0 = 2n$ kann die DGL für $w(p)$ in die Form der *Laguerre-DGL* gebracht werden:

Laguerresche Differentialgleichung:

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (s+1-x) \frac{d}{dx} + (r-s) \right] L_r^s(x) = 0, \quad (4.6.26)$$

wobei wir $x = 2\rho$, $s = 2l+1$ und $r = n+l$ gesetzt haben. Die Lösung dieser DGL sind die *assozierten Laguerre Polynome*

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x) \quad (4.6.27)$$

mit den Laguerre Polynomen

$$L_r(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r. \quad (4.6.28)$$

Explizit lauten die assoziierten Laguerre-Polynome:

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k \quad (4.6.29)$$

mit Normierungsrelation

$$\int_0^\infty dx x^{s+1} e^{-x} [L_r^s(x)]^2 = (2r-s+1) \frac{(r!)^3}{(r-s)!} \quad (4.6.30)$$

Laguerre-Polynome lassen sich erzeugen durch

$$\frac{1}{1-s} e^{-x} x^{-\frac{s}{1-s}} = \sum_{r=0}^{\infty} L_r(x) \frac{s^r}{r!}. \quad (4.6.31)$$

Die daraus konstruierte endgültige Lösung des Coulombproblems lautet

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.6.32)$$

mit

$$R_{nl}(r) = \frac{u(r)}{r} = -N(2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{(2l+1)}(2\kappa r), \quad (4.6.33)$$

und

$$N = \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3}}, \quad \kappa = \frac{MZe_0^2}{\hbar^2 n} = \frac{Z}{na}, \quad \text{und } a = \frac{\hbar^2}{Me_0^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

Die Energieeigenwerte sind

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2}\alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (4.6.34)$$

und $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.037}$ (Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante).

Für das Wasserstoffatom erhalten wir mit $Z = 1$

$$E_1 = -13.6 \text{ eV} = -1 \text{ Ry}. \quad (4.6.35)$$

Die Übergangsfrequenz zwischen zwei Energieniveaus berechnet sich somit zu

$$\hbar\omega_{nm} = E_m - E_n = 1 \text{ Ry} \left(-\frac{1}{m^2} + \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.6.36)$$

Bemerkungen zur Radialen Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsdichten:³

- Mittelwerte und Unschärfen

$$\langle r \rangle_{n,l} = \int d^3x \psi_{nlm}^* r \psi_{nlm} = \frac{a}{2Z} (3n^2 - l(l+1)) \quad (4.6.37)$$

$$\text{Speziell für } l = n-1 \quad \langle r \rangle_{n,n-1} = \frac{a}{Z} n \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.6.38)$$

$$\langle r^2 \rangle_{n,n-1} = \frac{a^2}{Z^2} n^2 (n+1) \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.6.39)$$

$$\Rightarrow (\Delta r)_{n,n-1,m}^2 = \frac{a^2 n^2}{2Z^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.6.40)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} \right)_{n,n-1,m} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \quad (4.6.41)$$

- Zustände zu $l = 0$:

$$\psi_{n00} \propto e^{-kr} L_n^1(2kr) \quad (4.6.42)$$

Diese haben $n-1$ Knoten, sind endlich bei $r = 0$ und kugelsymmetrisch. Klassisch verläuft die Bahn durch $r = 0$.

³für Bilder siehe Schwabl: Quantenmechanik, 7. Auflage, Seite 132

- Zustände zu $l = n - 1$ (l maximal):

$$R_{n,n-1}(r) = \frac{(2k)^{\frac{3}{2}}}{(2n)!} (2kr)^{n-1} e^{-kr} \quad (4.6.43)$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte dazu beträgt:

$$p(r) = \int d\Omega r^2 |\psi_{n,n-1,m}|^2 = Cr^{2n} e^{-2kr} \quad (4.6.44)$$

Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte ($p'(r) = \propto r^{2n} e^{-2kr} (2n/r - 2k)$) ist bei $r_0 = n/k = n^2 a/Z$, 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:

$$\langle L_x^2 \rangle_{l,m} = \langle L_y^2 \rangle_{l,m} = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2] \quad (4.6.45)$$

Für $l = |m|$ werden diese minimal: $\Delta L_{x,y}|_{l,\pm l} = \hbar\sqrt{l/2}$. Für große l gilt: $\Delta L_x / \langle L_x^2 \rangle^{1/2} \propto l^{-1/2}$

5. Bewegung im elektromagnetischen Feld

5.1 Spin

5.1.1 Phänomenologie des Spins

Bevor nun die Lie-Theorie wieder etwas in den Hintergrund tritt, behandelt wir noch den Spin. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden wir noch eingehend die Kopplung einer quantenmechanischen Wellenfunktion an das elektromagnetische Feld beschreiben. Dabei wird im konstanten \mathbf{B} -Feld der Potentialterm

$$U = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} \quad (5.1.1)$$

mit μ für das magnetische Moment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2Mc} \mathbf{L} \quad (q \text{ Ladung, } M \text{ Masse}) \quad (5.1.2)$$

und mit e =Ladung, M =Masse, \mathbf{L} =Bahndrehimpuls auftreten. Die Wirkung dieses Terms kann mittels des Versuchsaufbaus von *Stern und Gerlach* (1922) gemessen werden:

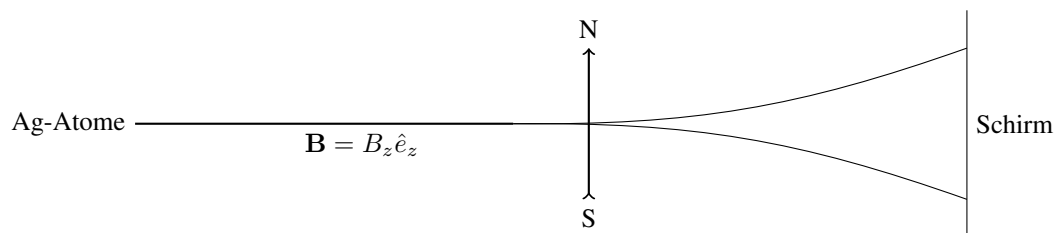


Abbildung 5.1: Stern-Gerlach-Experiment

In diesem Experiment wurde dies für Silberatome überprüft, die durch ein \mathbf{B} -Feld $\mathbf{B} = B z e_z$ geschickt wurden.

Die klassische Kraft, die auf ein solches Silberatom wirkt, berechnet sich zu

$$\mathbf{F} = -\nabla U = \frac{qB}{2Mc} L_z \mathbf{e}_z. \quad (5.1.3)$$

In der Quantenmechanik erwarten wir für Teilchen (Elektron im Atom) mit Drehimpulszustand $|l, m\rangle$ die Kraft

$$F_z = \frac{qB}{2Mc} m\hbar \quad (5.1.4)$$

und somit eine $(2l + 1)$ -fache Aufspaltung des Strahls.

Die Valenzelektronen von Silber liegen in der 5s-Schale, d.h. $l = 0$. Daraus folgt, dass der Strahl ungehindert passieren sollte. Tatsächlich gefunden wurde eine 2-fache Aufspaltung des Strahls, wie man für einen halbzahligen Drehimpuls erwarten würde. Man interpretiert dieses Ergebnis wie folgt:

- Das 5s-Elektron besitzt einen Anteil am Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} , der nichts mit dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} zu tun hat.
- Wir nennen diesen halbzahligen Drehimpuls \mathbf{S} . Dieser wird beschrieben durch die Quantenzahlen:

$$|s, s_z\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle. \quad (5.1.5)$$

Offenbar sind also die halbzahligen Darstellungen der Drehimpulsalgebra in der Natur realisiert in der Form eines „inneren Drehimpulses“.

Der Spinoperator \mathbf{S} erfüllt alle Eigenschaften eines Drehimpulses; die $so(3)$ -Algebra ist realisiert in der $j = 1/2$ Darstellung:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}, \quad (5.1.6)$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k, \quad (5.1.7)$$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad (5.1.8)$$

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm\hbar S_{\pm}, \quad (5.1.9)$$

$$[S_+, S_-] = 2\hbar S_z. \quad (5.1.10)$$

Eine mögliche Darstellung und die zugehörigen Wirkungen des Spinoperators und seiner Komponenten sind gegeben durch

$$|s, s_z = +1/2\rangle = |1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle, \quad (5.1.11)$$

$$|s, s_z = -1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle \quad (5.1.12)$$

und

$$\mathbf{S}^2|\uparrow\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}|\uparrow\rangle, \quad \mathbf{S}^2|\downarrow\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}|\downarrow\rangle \quad (5.1.13)$$

$$S_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \quad S_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \quad (5.1.14)$$

$$S_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle, \quad S_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle. \quad (5.1.15)$$

Die Operatoren S_+ , S_- , S_z können in der $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle)$ Basis durch 2×2 -Matrizen dargestellt werden:

$$\sigma_i = \frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix}. \quad (5.1.16)$$

Wir erhalten daraus die Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.17)$$

Wir führen nun die Pauli-2-Komponenten-Notation ein:

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.1.18)$$

und

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i. \quad (5.1.19)$$

Damit können wir z.B. schreiben

$$S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.20)$$

Definition 5.1. Die $s = 1/2$ Darstellung heißt *Spin*darstellung. Ein Element des $s = 1/2$ Darstellungsraums heißt *Spinor*.

Mathematische Ergänzung: SO(3) versus SU(2)

Erinnerung: $g \in SO(3)$ charakterisiert durch 3 Parameter, z.B. Achse \hat{n} und Winkel $0 \leq \alpha \leq 2\pi$, wobei $(\hat{n}, \alpha = 2\pi)$ und $(-\hat{n}, \alpha = 0)$ identifiziert werden. Wir betrachten nun $s = 1/2$ in Spinordarstellung:

$$\mathcal{D}(g) = U_{\mathbf{n}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{n} \cdot \mathbf{S}} = e^{-i \frac{\alpha}{2} \hat{n} \cdot \sigma} \quad (5.1.21)$$

Explizit ergibt sich ($\hat{n} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}| = \mathbf{n}\alpha^{-1}$)

$$U_{\mathbf{n}} = \mathbb{1}_2 \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i(\hat{n} \cdot \sigma) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (5.1.22)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\hat{n}_3 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -i(\hat{n}_1 - i\hat{n}_2) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ -i(\hat{n}_1 + i\hat{n}_2) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + i\hat{n}_3 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (5.1.23)$$

Check: $U_{\mathbf{n}}^\dagger \cdot U_{\mathbf{n}} = \mathbb{1}_2$ (unitär), $\det U_{\mathbf{n}} = 1$ ✓

Wir bemerken Seltsames:

$$U_{\hat{n}, \pi} \cdot U_{\hat{n}, \pi} = U_{\text{hatn}, 2\pi} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.1.24)$$

Eine Rotation im \mathbb{R}_3 um 2π sollte dem Einselement der $SO(3)$ entsprechen. $U_{\hat{n}, 2\pi}$ ist jedoch keine Darstellung der $\mathbb{1}_{SO(3)}$. **Erklärung:** Obige Konstruktion beruht auf den Eigenschaften der Lie-Algebra von $SO(3)$, einer Darstellung für *infinitesimale* Drehungen. Die $s = (2\mathbb{Z} + 1)/2$, also halbzahligen Darstellungen, liefern „hoch integriert“ aber keine Darstellungen der *Lie-Gruppe* $SO(3)$. Vielmehr parametrisiert $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ die Lie-Gruppe $SU(2)$:

$$SU(2) = \left\{ U \in \mathbb{C}^{2,2} \mid U^\dagger U = \mathbb{1}, \det U = 1 \right\} \quad (5.1.25)$$

→ Die Pauli-Matrizen sind Generatoren der $SU(2)$, nicht der $SO(3)$!

→ $\mathfrak{so}(3)$ und $\mathfrak{su}(2)$ haben dieselben Strukturkonstanten und sind daher isomorph zueinander.

→ Für endliche Drehungen gilt:

$$\begin{aligned} \forall g \in SO(3) \exists 2 \text{ Elemente } U, -U \in SU(2) \\ \Rightarrow SU(2) = 2\text{-fache Überdeckung der } SO(3) \end{aligned}$$

Topologische Äquivalenzen:

Da folgendes gilt:

$$SU(2) = \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbb{C} : |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} \quad (5.1.26)$$

ist $SU(3) \simeq S^3$, einer 3-Sphäre im \mathbb{R}^4 topologisch äquivalent, da

$$S^3 = \{(w, x, y, z) \in \mathbb{R}^4 \mid w^2 + x^2 + y^2 + z^2 = 1\}, \quad (5.1.27)$$

z.B. mit $w = \Re a, x = \Im a, y = \Re b, z = \Im b$. In dieser Darstellung ist $(1, 0, 0, 0)$ das 1-Element der $SO(3)$ und der $SU(3)$, $(-1, 0, 0, 0)$ entspricht einer 2π -Drehung in der $SU(3)$, die Paritätstransformation, welche $P \notin SO(3)$ ist. Der „Südpol“ ist also ausgenommen in der entsprechenden Darstellung der $SO(3)$. Es gilt:

$$SO(3) \simeq S^3/Z_2 \quad (5.1.28)$$

mit der $Z_2 = \{1, -1\}$. Damit gilt auch:

$$SO(3) = SU(3)/Z_2 \quad (5.1.29)$$

$SO(3)$ ist die *Faktorgruppe* der $SU(3)$ bezüglich der Z_2 .

- ⇒ Ein Spinor muss um $\alpha = 4\pi$ gedreht werden um zu sich selbst zurückzukehren
- ⇒ Physikalische Folge: Zum Beispiel *Berry-Phasen*

Alternative Darstellung der $SO(3)$ durch $K_3 = \{\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3 \mid |\mathbf{n}| \leq 2\pi\}$ der Drehachsen $\mathbf{n} = \hat{n}\alpha, 0 \leq \alpha \leq 2\pi$.

Die Südhalbkugel ist in dieser Darstellung identisch zur Nordhalbkugel für die $SO(3)$, nicht aber für die $SU(3)$.

Abschließende Bemerkungen:

- Der Spin wird in der nichtrelativistischen Quantenmechanik ad hoc eingeführt. Ihm liegen Symmetrien zugrunde, die in der relativistischen Physik ganz natürlich vorhanden sind. Dirac fand, dass der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens:

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (5.1.30)$$

sich aus Bahndrehimpuls und einem weiteren Anteil mit den Eigenschaften des Spins zusammensetzen muss, damit die an die Stelle der Schrödingergleichung tretende Gleichung für die Energie eines Systems relativistisch invariant ist. Energie und Impuls müssen beide linear dain vorkommen. Die resultierende Gleichung für ein sich z.B. nahe Lichtgeschwindigkeit bewegendes Teilchen ist die *Diracgleichung*¹

- Markus Fierz (1939) und Wolfgang Pauli (1940) fanden theoretische Begründungen 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 genügen²:

BE: $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$,

FD: $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$

Dies führt z.B. zu folgenden Eigenschaften:

BE: Identische Zustände: $\psi(x_1, x_2) = \phi(x_1)\phi(x_2)$,

FD: *Pauli-Prinzip*: $\psi(x_2, x_1) = 0$

¹P.A.M. Dirac, The Quantum Theory of the e^- , Proceedings of the Royal Society of London. Series A Volume 117, No. 778 (1928), S. 610-624.

²

– Markus Fierz: ber die relativistische Theorie krftefreier Teilchen mit beliebigem Spin, Helv. Phys. Acta 12, 3-17 (1939)
 – Wolfgang Pauli: The Connection Between Spin and Statistics, Phys. Rev. 58, 716722 (1940)
 – Ray F. Streater und Arthur S. Wightman: PCT, Spin & Statistics, and All That

5.1.2 Ontologie des Spins & Gesamtdrehimpuls

Spin und Bahndrehimpuls stellen zwei unterschiedliche Darstellungen der Drehgruppe $SO(3)$ dar.

Zur Erinnerung: Gegeben sei $g \in SO(3)$. Dazu sei $R(g) = R(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ eine Drehmatrix-Darstellung. Allgemein ist der Drehimpuls der Generator infinitesimaler Drehungen. Seine Eigenzustände bilden in der QM $(2j+1)$ -dimensionale invariante Unterräume.

Beispiele

$$1) \text{ Bahndrehimpuls } L_i = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m, m'=0}^l |l, m\rangle L_{lmm'}^{(i)} \langle l, m'|$$

Mit $l = 1$ ergibt sich zum Beispiel:

$$L_{1mm'}^{(z)} = \hbar m \delta_{mm'}, L_1^{(z)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.1.31)$$

$$L_{1mm'}^{(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (|m| - |m'|), L_1^{(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.32)$$

$$L_{1mm'}^{(y)} = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} (m - m'), L_1^{(y)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.33)$$

$$2) \text{ Spin } 1/2: S_i = \sum_{s_z, s'_z = \pm 1/2} | \frac{1}{2} s_z \rangle S_{s_z s'_z}^{(i)} \langle \frac{1}{2} s'_z |$$

$$S^{(x)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S^{(y)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S^{(z)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.34)$$

Die Pauli-Matrizen.

Bemerkung: Die Lie-Algebra der zunächst schiefssymmetrischen Erzeugenden iF_i der $SO(3)$ mit den ϵ_{ijk} als Strukturkonstanten, welche die Nichtvertauschbarkeit von Drehungen um unterschiedliche Achsen charakterisieren, ist ein mathematisches Spezifikum, welches schon in der klassischen Mechanik zur Anwendung kommt. Analog zum quantenmechanischen Bahndrehimpuls übernehmen die Poissonklammern in der Hamilton-Jacobi-Mechanik die Rolle des Lie-Produkts der Generatoren.

Erst die Frage nach (gemeinsamen) Eigenzuständen von \hat{L}_i (und \hat{L}^2) führte uns in die QM, in der wir regelmäßig nach Basisdarstellungen von Operatoren suchen, welche durch den vollständigen Satz ihrer Eigenzustände gegeben sind. Der entscheidende Quantisierungsschritt war hierbei die Identifikation von

$$\mathbf{F} = \mathbf{J}/\hbar \quad (5.1.35)$$

der aus den schiefssymmetrischen, reellen Generatoren $i\mathbf{F}$ der $SO(3)$ gewonnenen hermiteschen Operatoren \mathbf{F} mit dem quantenmechanischen Drehimpuls \mathbf{J} . Diesen Schritt hätte man jedoch nicht machen müssen, sondern einfach bei der mathematisch-geometrischen Frage des Transformationsverhaltens von Abbildungen, etwa auf dem \mathbb{R}^3 bleiben können.

Betrachten wir z.B. die durch eine skalare Funktion, z.B. die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ gegebene Abbildung:

$$\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} : \mathbf{x} \mapsto \psi(\mathbf{x}) \quad (5.1.36)$$

Diese transformiert unter Drehungen wie:

$$\psi(\mathbf{x}) \mapsto \psi'(\mathbf{x}) = T_g \psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (5.1.37)$$

Tatsächlich ist für $R_g = e^{-i\phi \mathbf{nM}} = \mathbb{1} - i\phi \sum_i n_i M_i + \dots$ die Wirkung von R_g^{-1} infinitesimal gegeben als

$$R_g^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{x} - \phi \mathbf{n} \times \mathbf{x}. \quad (5.1.38)$$

Damit ergibt sich

$$T_g \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{n} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}) + \dots \quad (5.1.39)$$

$$= \psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x} \times \nabla) \cdot \mathbf{n} \psi(\mathbf{x}) + \dots \quad (5.1.40)$$

$$= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \right) \psi(\mathbf{x}) + \dots \quad (5.1.41)$$

Somit können wir schreiben

$$T_g \psi(\mathbf{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{nL}} \psi(\mathbf{x}). \quad (5.1.42)$$

Eine Abbildung $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, die unter Drehung transformiert wie $\psi \mapsto T_g \psi$, heißt skalare Funktion oder *Skalarfeld*. Der Bahndrehimpuls \mathbf{L} liefert eine Darstellung der Drehgruppe auf dem Raum $H(\mathbb{R}^3)$ der Skalarfelder.

In der Physik spielen allgemeinere Transformationsverhalten eine wichtige Rolle. Aus der klassischen Feldtheorie kennen wir beispielsweise den Begriff des *Vektorfeldes* als Abbildung

$$\mathbf{v} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{x} \mapsto \mathbf{v}(\mathbf{x}) \quad (5.1.43)$$

und dem Transformationsverhalten

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \mapsto \mathbf{v}'(\mathbf{x}) := R_g \mathbf{v}(R_g^{-1} \mathbf{x}), \quad R_g = e^{-i\phi \sum_i n_i M_i}. \quad (5.1.44)$$

Der Raum $V = \mathbb{R}^3$ kann interpretiert werden als der 3-dimensionale Darstellungsraum der Drehgruppe $SO(3)$, entsprechend der Quantenzahlen $j = 1$, $m_z = +1, 0, -1$. Die genaue Form der Darstellung werden wir in den Übungen behandeln. Dies bezeichnet man als die *fundamentale* oder *Vektordarstellung*.

Allgemeiner können wir ein Feld mit Werten im Darstellungsraum $V_{\mathcal{D}}$ der Darstellung \mathcal{D} der Drehalgebra betrachten. Das heißt, dass wir die Darstellung $\mathcal{D} : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ und das Feld

$$v : \mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}, \quad \mathbf{x} \mapsto v(\mathbf{x}) \in V_{\mathcal{D}}, \quad (5.1.45)$$

betrachten, welches wie

$$v(\mathbf{x}) \mapsto v'(\mathbf{x}) = \mathcal{D}_g v(R_g^{-1} \mathbf{x}) \quad (5.1.46)$$

unter Drehungen $\mathbf{x} \mapsto R_g \mathbf{x}$ transformiert. In diesem Sinne können wir identifizieren:

$$\text{Skalarfeld} \quad \leftrightarrow \quad \text{triviale Darstellung } \mathcal{D}_g = \mathbb{1} \quad \forall g. \quad (5.1.47)$$

$$\text{Vektorfeld} \quad \leftrightarrow \quad \text{fundamentale / 3-dimensionale Darstellung } \mathcal{D}_g = R_g (= R(\mathbf{n}, \phi)). \quad (5.1.48)$$

Insbesondere können wir Felder mit Werten im Darstellungsraum der $s = 1/2$ Darstellung betrachten, die *Spinorfelder* $\Psi(\mathbf{x})$. In Pauli-Notation bedeutet das

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.49)$$

Wenn $g \in SO(3)$ der Drehung $R_g = R(\mathbf{n}, \phi)$ entspricht, dann ist:

$$\mathcal{D}_g = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{nS}} = e^{-i\frac{\phi}{2} \mathbf{n}\sigma} \quad (5.1.50)$$

und insgesamt transformiert $\Psi(\mathbf{x})$ wie

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \mapsto e^{-i\frac{\phi}{2}\mathbf{n}\sigma} \begin{pmatrix} \psi_+(e^{i\phi\mathbf{n}\mathbf{M}^\dagger}\mathbf{x}) \\ \psi_-(e^{i\phi\mathbf{n}\mathbf{M}^\dagger}\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (5.1.51)$$

$$= e^{-i\frac{\phi}{2}\mathbf{n}\sigma} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{n}\mathbf{L}}\psi_+(\mathbf{x}) \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{n}\mathbf{L}}\psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.52)$$

Die genaue Form von $e^{-i\frac{\phi}{2}\mathbf{n}\sigma}$ werden wir gleich behandeln.

Kehren wir aber zunächst zurück zur allgemeinen Darstellung $V_{\mathcal{D}}$: Der Raum $H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$ der Abbildungen $\mathbb{R}^3 \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ kann als *Tensorprodukt* aufgefasst werden:

$$H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}}) = V_{\mathcal{D}} \otimes H(\mathbb{R}^3). \quad (5.1.53)$$

Wir erinnern an dieser Stelle an das Tensorprodukt. Gegeben seien 2 Vektorräume V, W mit Basis $\{e_i, i = 1, \dots, \dim V\}$ und $\{\tilde{e}_i, i = 1, \dots, \dim W\}$. Dann ist das *Tensorprodukt* $V \otimes W$ der Vektorraum mit $\dim(V \otimes W) = \dim V \dim W$ und Basis $e_i \otimes \tilde{e}_j$, so dass für $v = \sum_i v_i e_i$, $w = \sum_j w_j \tilde{e}_j$

$$V \otimes W \ni v \otimes w = \sum_{i,j} v_i w_j e_i \otimes \tilde{e}_j. \quad (5.1.54)$$

Für eine genauere Definition verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur zur linearen Algebra.

Insbesondere, wenn $A : V \rightarrow V$ und $B : W \rightarrow W$ lineare Operatoren sind, agiert

$$A \otimes B : V \otimes W \rightarrow V \otimes W, \quad (A \otimes B)(v \otimes w) = Av \otimes Bw \quad (5.1.55)$$

und das Skalarprodukt auf V und W induziert ein Skalarprodukt auf $V \otimes W$,

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle_v \cdot \langle w_1 | w_2 \rangle_w. \quad (5.1.56)$$

Man kann sich leicht überzeugen, dass $H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}}) = V_{\mathcal{D}} \otimes H(\mathbb{R}^3)$. Beispielsweise kann man ein Spinorfeld

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (5.1.57)$$

schreiben als

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \psi_+(\mathbf{x}) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \psi_-(\mathbf{x}), \quad (5.1.58)$$

wo $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ den 2-dimensionalen Darstellungsraum zu $s = 1/2$ aufspannen. Ein Feld $v(\mathbf{x}) \in H(\mathbb{R}^3, V_{\mathcal{D}})$ transformiert damit wie

$$U_g : v(\mathbf{x}) \mapsto U_g v(\mathbf{x}), \quad (5.1.59)$$

wobei

$$U_g = \mathcal{D}_g \otimes T_g \quad (5.1.60)$$

mit $\mathcal{D}_g : V_{\mathcal{D}} \rightarrow V_{\mathcal{D}}$ und $T_g : H(\mathbb{R}^3) \rightarrow H(\mathbb{R}^3)$. Das bedeutet

$$U_g v(\mathbf{x}) = \mathcal{D}_g v(R_g^{-1}\mathbf{x}). \quad (5.1.61)$$

Nun können wir beantworten, was Spin ist: Der Spinoperator \mathbf{S} ist definiert als Generator von \mathcal{D}_g . Infinitesimal gilt:

$$U_g \cong (\mathbb{1}_{V_D} - \frac{i}{\hbar}\phi \mathbf{nS}) \otimes (\mathbb{1}_{H(\mathbb{R}^3)} - \frac{i}{\hbar}\phi \mathbf{nL}) \quad (5.1.62)$$

$$= \mathbb{1}_{V \otimes H} - \frac{i}{\hbar}\phi(\mathbf{nS} \otimes \mathbb{1}_H) - \frac{i}{\hbar}\phi(\mathbb{1}_V \otimes \mathbf{nL}) \quad (5.1.63)$$

$$\cong \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\phi \mathbf{nJ} \quad (5.1.64)$$

mit dem Gesamtdrehimpulsoperator

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H + \mathbb{1}_V \otimes \mathbf{L} \equiv \mathbf{S} + \mathbf{L}. \quad (5.1.65)$$

Die Notation $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ist gängig, aber ungenau. Da \mathbf{S} und \mathbf{L} auf unterschiedlichen Räumen wirken, ist

$$[\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \mathbf{L}] = 0 \text{ und } [\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \dot{\mathbf{x}}] = 0 = [\mathbf{S} \otimes \mathbb{1}_H, \mathbb{1}_V \otimes \dot{\mathbf{p}}] \text{ sowie} \quad (5.1.66)$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \text{ und } [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (5.1.67)$$

Die S^2 -Quantenzahl s wird als *Spin des Feldes* bezeichnet. Man unterscheidet

Bosonische Felder	Fermionische Felder
$s \in \mathbb{Z}$	$s \in (2\mathbb{Z} + 1)/2$
$s = 0$: Skalarfeld	$s = 1/2$: Spinorfeld
$s = 1$: Vektorfeld	
⋮	⋮

Was ist also Spin?

Spin bedeutet, dass ein Feld ein nichttriviales Transformationsverhalten bezüglich der SO_d im obigen Sinne aufweist. Solche Felder haben kein klassisches Analogon – auf den ersten Blick. Es kann jedoch gezeigt werden³, dass das Spin-Statistik-Theorem zwar lokale Poincar-Invarianz benötigt, wie durch die spezielle Relativitätstheorie gegeben, jedoch nicht notwendigerweise QM. Für ein klassisches Spinorfeld benötigt man Grassmann-Variablen, d.h. antikommutierende Größen wie sie zur Beschreibung bestimmter Kink-Lösungen nichtlinearer Wellengleichungen dienen können.

Exkurs:

Im Standardmodell der Teilchenphysik wird die Materie (Elektronen, Myonen, Tauonen, Neutrinos, Quarks (u, d, c, s, t, b)) durch $s = 1/2$ -Fermionen beschrieben. Die Austauschteilchen der Wechselwirkungen sind (Photonen sowie W^\pm , Z und Gluonen) sind ($s = 1$)-Bosonen (Vektorbosonen). Am LHC wurde im vergangenen Jahr letztlich auch das Higgsfeld, ein ($s = 0$)-Skalar gefunden.

5.1.3 Rechnen mit Tensorprodukten für Spin-1/2-Felder

- Als Basis unseres Zustandsraumes wählen wir

$$|\mathbf{x}, \uparrow\rangle \equiv |\mathbf{x}\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\mathbf{x}, \downarrow\rangle \equiv |\mathbf{x}\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (5.1.68)$$

³Siehe z.B. D Finkelstein & J. Rubinstein 'Connection between Spin, Statistics & Kinks, J.Math.Phys 9 1762(68); oder J.A.Morgan, Spin & Statistics in classical Mechanics, Am. J. Phys 72, 1408 (04), physics/040/070.

- Damit können wir die Gesamtwellenfunktion schreiben als

$$\Psi(\mathbf{x}) = \underbrace{\langle \mathbf{x}, \uparrow | \alpha \rangle}_{=: \psi_+(\mathbf{x})} | \uparrow \rangle + \underbrace{\langle \mathbf{x}, \downarrow | \alpha \rangle}_{\psi_-(\mathbf{x})} | \downarrow \rangle \quad (5.1.69)$$

$$= \psi_+(\mathbf{x}) | \uparrow \rangle + \psi_-(\mathbf{x}) | \downarrow \rangle \quad (5.1.70)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (5.1.71)$$

- Die Normierung der Wellenfunktion erhalten wir aus

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int d^3x |\psi_+(\mathbf{x})|^2 + \int d^3x |\psi_-(\mathbf{x})|^2, \quad (5.1.72)$$

wobei $\int d^3x |\psi_{\pm}(\mathbf{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen mit $s_z = \pm 1/2\hbar$ im Volumen V zu finden.

5.2 Addition von Drehimpulsen

Der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens mit Spin \mathbf{S} und Bahndrehimpuls \mathbf{L} ist

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{L} \equiv \mathbf{S} + \mathbf{L}, \quad (5.2.1)$$

wobei die Tensorproduktschreibweise daran erinnert, dass \mathbf{S} und \mathbf{L} auf unabhängige Freiheitsgrade wirken. Insbesondere kommutieren sie deshalb als Operatoren,

$$[\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0. \quad (5.2.2)$$

Als Basis für allgemeine Zustände bietet sich die Eigenbasis von $\{\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, L_z, S_z\}$ an:

$$\{|l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle\} \equiv \{|l, s, m, s_z\rangle\}. \quad (5.2.3)$$

Alternativ charakterisieren wir einen Zustand durch die Quantenzahlen bezüglich des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Beachte dabei, dass \mathbf{J} wegen $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ alle Eigenschaften eines Drehimpulses besitzt. Insbesondere erfüllen

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{S}\mathbf{L} \quad \text{und} \quad (5.2.4)$$

$$J_z = L_z + S_z \quad (5.2.5)$$

die su(2)-Kommutatorrelation

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0. \quad (5.2.6)$$

Wir benötigen zusätzlich zu \mathbf{J}^2 und J_z 2 weitere kommutierende Operatoren zur Charakterisierung eines Zustandes. L_z und S_z sind wegen

$$[\mathbf{J}^2, L_z] \neq 0 \neq [\mathbf{J}^2, S_z] \quad (5.2.7)$$

nicht geeignet, aber

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2] = 0 = [\mathbf{J}^2, \mathbf{S}^2], \quad (5.2.8)$$

was wir leicht durch explizites Nachrechnen prüfen können. Wir können damit jeden Zustand alternativ auch durch seine Eigenwerte bezüglich des vollständigen Sets

$$\{\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2\} \quad (5.2.9)$$

an kommutierenden Operatoren charakterisieren. Die Eigenzustände erfüllen die folgenden Relationen

$$\mathbf{J}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(j+1)j |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.10)$$

$$J_z |j, j_z, l, s\rangle = \hbar j_z |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.11)$$

$$\mathbf{S}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(s+1)s |j, j_z, l, s\rangle, \quad (5.2.12)$$

$$\mathbf{L}^2 |j, j_z, l, s\rangle = \hbar^2(l+1)l |j, j_z, l, s\rangle. \quad (5.2.13)$$

Betrachten wir nun allgemeiner 2 unabhängige Drehimpulsoperatoren $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ wirkend auf unabhängige Freiheitsgrade. Ein Beispiel hierfür wären zwei verschiedene Teilchen mit ihrem jeweiligen Spin:

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{S}_1 \text{ und } \mathbf{J}_2 = \mathbf{S}_2. \quad (5.2.14)$$

Der Gesamtdrehimpuls dieses Systems ist nun

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{J}_2, \quad (5.2.15)$$

wobei \mathbf{J}_1 (\mathbf{J}_2) auf Teilchen 1 (2) wirkt. Es gibt nun 2 verschiedene Basen für die zugänglichen Zustände:

- 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 nun einen expliziten Basiswechsel zwischen den beiden Eigenbasen zu finden. D.h. wir drücken $|j, m, j_1, j_2\rangle$ durch $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ aus und umgekehrt. Insbesondere stellen wir uns die Frage, welche Werte sich bei gegebenen j_1, j_2 für j und m ergeben. Allgemein muss gelten

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle. \quad (5.2.16)$$

Die Koeffizienten

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle \quad (5.2.17)$$

nennt man *Clebsch-Gordan-Koeffizienten*.

Wir stellen folgende zwei Behauptungen auf:

- In obiger Entwicklung (5.2.16) treten nur Terme auf, die

$$m = m_1 + m_2 \quad (5.2.18)$$

genügen.

- Der Gesamtdrehimpuls zu j_1 und j_2 kann die Werte

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2| \quad (5.2.19)$$

annehmen.

Beweisen wir zunächst die erste Aussage:

Wegen $J_z = J_{z1} + J_{z2}$ gilt:

$$\langle jmj_1j_2 | J_z | j_1j_2m_1m_2 \rangle = (m_1 + m_2) \langle jmj_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle = m \langle jmj_1j_2 | j_1j_2m_1m_2 \rangle. \quad (5.2.20)$$

Das bedeutet, dass $m = m_1 + m_2$ gilt falls $C_{m_1m_2}^{jm} \neq 0$.

Beweisen wir nun die zweite Aussage.

Seien j_1, j_2 fest vorgegeben. Dann gibt es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, da m_1 und m_2 die Werte $j_1 \geq m_1 \geq -j_1$ bzw. $j_2 \geq m_2 \geq -j_2$ annehmen können. Ferner haben wir gerade gesehen, dass die Gesamt- J_z Quantenzahl eines Zustandes $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ gegeben ist durch $m = m_1 + m_2$.

Aber da $[J^2, J_{iz}] \neq 0$ kann $|j_1m_1\rangle \otimes |j_2m_2\rangle$ zu verschiedenen Werten von j beitragen. Anders ausgedrückt: In der Entwicklung von $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ in die Basis $|jmj_1j_2\rangle$ werden mehrere Werte für j auftreten. Diese ergeben dann die möglichen Werte für den Gesamtdrehimpuls.

Bestimmen wir zunächst die möglichen Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, die der Gesamt- J_z Quantenzahl $m = m_1 + m_2$ entsprechen (o.B.d.A. sei $j_1 \geq j_2$):

$m = m_1 + m_2$	Zustand	Anzahl
$j_1 + j_2$	$ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$	1
$j_1 + j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$	2
$j_1 + j_2 - 2$	$ j_1, j_1 - 2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 2\rangle$	3
\vdots	\vdots	\vdots
$j_1 - j_2$	$ j_1, j_1 - 2j_2\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 1$	$ j_1, j_1 - 2j_2 - 1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 2$	\dots	$2j_2 + 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$j_2 - j_1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2 + 1$
$j_2 - j_1 - 1$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, j_2 - 1\rangle$ \dots $ j_1, 2j_2 - j_1 - 1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	$2j_2$
\vdots	\vdots	\vdots
$-j_1 - j_2$	$ j_1, -j_1\rangle \otimes j_2, -j_2\rangle$	1

Hieraus können wir die möglichen Werte für j bestimmen, indem wir fordern, dass das Set der Zustände $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ volle Multiplets $|jm, j_1, j_2\rangle$ ergeben muss, wobei m insbesondere zu jedem auftretenden j die $2j + 1$ Werte $j \geq m \geq -m$ annimmt.

Der maximale Wert für j ist deshalb $j_1 + j_2$, was dem maximalen Wert von m entspricht. Das bedeutet, dass wir insgesamt $2(j_1 + j_2) + 1$ Zustände der Form

$$|j, m, j_1, j_2\rangle \quad (5.2.21)$$

haben mit $j = j_1 + j_2$ und $j \geq m \geq -j$.

Betrachten wir nun den Wert $m = j_1 + j_2 - 1$. Hierzu gibt es 2 Zustände. Eine Linearkombination dieser Zustände gehört ins Multiplet gehörig zu $j = j_1 + j_2$. Die andere muss also dem Wert $(j_1 + j_2 - 1)$ für j entsprechen. Andernfalls wäre dies im Widerspruch dazu, dass sich alle $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ in volle Multiplets $|j, m, j_1, j_2\rangle$ umgruppieren lassen. Der nächste mögliche Wert für j ist also $(j_1 + j_2 - 1)$. Dies geht so weiter bis $j = j_1 - j_2$. Ab diesem Wert nimmt die Anzahl der Zustände in der Tabelle nicht weiter zu. D.h. für $m = j_1 - j_2 - 1$ sind alle Zustände bereits in Multiplets mit $j \geq j_1 - j_2$ enthalten. Deshalb sind keine niedrigeren Werte für j sind möglich. Das bedeutet

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|. \quad (5.2.22)$$

Führen wir noch einen Konsistenzcheck durch um unsere Rechnung zu bestätigen:

- Die Anzahl der Zustände $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ ist $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.
- Die Anzahl der Zustände $|j m j_1 j_2\rangle$ ist

$$\begin{aligned} \# &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \sum_{k=0}^{2j_2} 2(j_1 - j_2 + k) + 1 \\ &= (2j_2 + 1)(2(j_1 - j_2) + 1) + (2j_2 + 1)2j_2 \\ &= (2j_2 + 1)(2j_1 + 1). \quad \checkmark \end{aligned} \quad (5.2.23)$$

Nun da wir die Werte für j bestimmt haben, welche auf der rechten Seite der Entwicklung (5.2.16) auftreten, lassen sich die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C_{m_1 m_2}^{j m}$ rekursiv bestimmen. Für eine allgemeine Behandlung verweisen wir an dieser Stelle auf die Literatur, beispielsweise Sakurai, Kapitel 3.7. Wir beschränken uns auf folgende Beispiele:

System aus zwei Spin-1/2 Zuständen

Betrachte 2 Teilchen mit Spin 1/2 und Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{S}_2 \equiv \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2. \quad (5.2.24)$$

Die Basis des Tensorproduktraumes ist dann

$$|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.2.25)$$

Für den Gesamtspin gibt es nun 2 Möglichkeiten:

- $s = 1/2 + 1/2 = 1$. Dies ist ein *Triplet* an Zuständen mit $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle$ und $|1, -1\rangle$.
- $s = 1/2 - 1/2 = 0$. Dies ist ein *Singlet* mit $|0, 0\rangle$.

Entwickeln wir nun die $|s, s_z\rangle$ in die $|\uparrow\downarrow\rangle$ -Basis:

- $|1, 1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$, weil $s_z = s_{1z} + s_{2z} = 1$.
- $|1, 0\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$.

Um a und b zu bestimmen, wirken wir mit $S_- = S_{1-} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_{2-}$ auf beide Seiten und erhalten mithilfe von (4.3.32)

$$S_-|1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle, \quad (5.2.26)$$

$$S_-|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1-} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (5.2.27)$$

Das bedeutet $|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$

- $|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$.
- $|0, 0\rangle = c|\uparrow\downarrow\rangle + d|\downarrow\uparrow\rangle$.

Aus der Orthogonalität der Zustände folgt

$$0 = \langle 0, 0 | 1, 1 \rangle \text{ und } 1 = \langle 1, 1 | 1, 1 \rangle. \quad (5.2.28)$$

Damit können wir $|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ folgern.

Spin-Bahn-Kopplung

Betrachte $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$. Dafür erhalten wir die folgenden beiden möglichen Werte von j und zugehörige Clebsch-Gordan-Entwicklung:⁴

- $j = l + 1/2$: Für $l + \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l + \frac{1}{2})$ gilt:

$$\begin{aligned} |l + 1/2, j_z\rangle &= \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle, \end{aligned} \quad (5.2.29)$$

- $j = l - 1/2$: Für $l - \frac{1}{2} \geq j_z \geq -(l - \frac{1}{2})$ gilt:

$$\begin{aligned} |l - 1/2, j_z\rangle &= -\sqrt{\frac{l - j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z - 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l + j_z + 1/2}{2l + 1}} |l, j_z + 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (5.2.30)$$

Die Koeffizienten für $|l + 1/2, j_z\rangle$ lassen sich, wie im vorigen Beispiel, durch iterative Anwendung von $J_- = L_- + S_-$ auf

$$|l + 1/2, l + 1/2\rangle = |l, l\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \quad (5.2.31)$$

berechnen. Die Koeffizienten für $|l - 1/2, j_z\rangle$ folgen aus der Orthonormalität der Zustände.

⁴Die Zustände auf der rechten Seite sind $|j, j_z, l, s\rangle \equiv |j, j_z\rangle$.

5.3 Kopplung an das elektromagnetische Feld

5.3.1 Schrödingergleichung, Pauli-Gleichung

Unser Ziel ist die Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung für ein quantenmechanisches Teilchen. Zunächst erinnern wir an die aus der klassischen Elektrodynamik bekannten Felder

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\partial_t\mathbf{A} - \nabla\phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (5.3.1)$$

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 ist

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.2)$$

Während wir \mathbf{p} als kanonischen Impuls bezeichnen, heißt

$$m\dot{\mathbf{x}} = m\partial_{\mathbf{p}}H \equiv \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (5.3.3)$$

kinetischer Impuls. Mit ihm können wir schreiben

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{\Pi}^2 + e\phi. \quad (5.3.4)$$

Quantenmechanisch werden \mathbf{x} und \mathbf{p} zu Operatoren erhoben. In der Ortsdarstellung ist $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ und es ergibt sich die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{2mc}(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.5)$$

Beachte dabei, dass wegen

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t)(\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)) + \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.6)$$

in der Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0$ folgt

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{mc}\mathbf{A}\nabla + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \right] \psi. \quad (5.3.7)$$

Betrachten wir nun als konkrete Anwendung das magnetische Moment. Dazu nehmen wir ein konstantes \mathbf{B} -Feld an, d.h. das Vektorpotential ist gegeben durch

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} \times \mathbf{B}), \quad (5.3.8)$$

so dass

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}. \quad (5.3.9)$$

Damit können wir den zweiten Term des obigen Hamilton-Operators schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar e}{mc}(\mathbf{A}\nabla)\psi &= \frac{i\hbar e}{mc} \left(-\frac{1}{2} \right) (\mathbf{x} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla\psi \\ &= \frac{i\hbar e}{2mc} (\mathbf{x} \times \nabla) \cdot \mathbf{B}\psi \\ &= -\frac{e}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}\psi \\ &\equiv -\mu_{\text{Bahn}} \cdot \mathbf{B}\psi. \end{aligned} \quad (5.3.10)$$

Damit haben wir gefunden, dass $\mu_{\text{Bahn}} = e/2mc\mathbf{L}$ das magnetische Moment für den Bahndrehimpuls darstellt. (Dies hatten wir bei der Diskussion des Stern-Gerlach-Experiment bereits vorweggenommen.) Man schreibt

$$\mu_{\text{Bahn}} = \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} : \text{Bohr'sches Magneton.} \quad (5.3.11)$$

Beachte:

- Für $\mathbf{B} = \mathbf{B}(z)$ ergeben sich höhere Korrekturen zum Term $-\mu_{\text{Bahn}} \cdot \mathbf{B}\psi$ entsprechend der Multipolentwicklung der Elektrodynamik.
- Der quadratische Term $e^2/2mc^2\mathbf{A}^2$ ist meistens, d.h. außer für sehr große Feldstärken, relativ zu $-\mu \cdot \mathbf{B}$ vernachlässigbar.
- $-\mu_B/\hbar\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ ist der Bahndrehimpuls-Beitrag zum Paramagnetismus, $e^2/2mc^2\mathbf{A}^2$ der Beitrag zum Diamagnetismus.

Unsere bisherige Betrachtung berücksichtigt nur die Orts- und Impulsfreiheitsgrade eines Teilchens. Wir haben allerdings festgestellt, dass Teilchen mit Spin noch weitere Freiheitsgrade besitzen. Diese Freiheitsgrade verhalten sich mathematisch wie die Freiheitsgrade eines inneren Drehimpulses. Dass diese auch physikalisch einen Drehimpuls darstellen, zeigt sich daran, dass der Spin eine weitere Quelle des magnetischen Moments liefert,

$$\mu = \mu_{\text{Bahn}} + \mu_{\text{Spin}} \quad \text{mit} \quad \mu_{\text{Spin}} = g\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{S}. \quad (5.3.12)$$

Dies zu fordern ist naheliegend und wird, wie eben im Stern-Gerlach-Experiment, auch experimentell verifiziert. In der nicht-relativistischen Quantenmechanik ist diese Forderung allerdings nicht mehr als ein plausibles Postulat, das nicht weiter a priori herzuleiten ist. Insbesondere muss der der sogenannte gyromagnetische oder Landé-Faktor g a priori nicht 1 sein und stellt in der nicht-relativistischen Quantenmechanik einen phänomenologischen Parameter dar. Experimentall beobachtet man für Elektronen $g \simeq 2$.

Die relativistisch-quantenmechanische Dirac-Theorie des Spin-1/2-Teilchens gestattet die Herleitung dieses Spin-magnetischen Moments für Elektronen aus der relativistischen Version der Schrödingergleichung, der Dirac-Gleichung. Dies ergibt zunächst $g = 2$, in Übereinstimmung mit dem Stern-Gerlach-Experiment. Die nicht-relativistische Schrödingergleichung für ein Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld ist die Pauligleichung

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}\mathbf{B} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \right] \mathbb{1} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} - \mu_B\sigma\mathbf{B} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (5.3.13)$$

wobei $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$.

Bemerkungen:

- In der Quantenelektrodynamik (QED) ergeben sich höhere Korrekturen zu g , welche sich perturbativ

als (asymptotische) Potenzreihe in α schreiben lassen:

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0.32 \dots \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^2 + 1.18 \dots \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^3 + \dots \right) \\ = 2.002319304718 \quad (5.3.14)$$

mit der Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c$. Experimentell ist $(g - 2)_{e^-}$ aktuell bis zur 12. Stelle hinter dem Komma berprft. Theoretisch wurden im arXiv:1205.5368 [hep-ph] QED-Vorhersagen bis zur Ordnung α^5 gegeben.

- Für das Proton ist das Magneton

$$\mu_p = \frac{e_0 \hbar}{2m_p c} (= \mu_k) \quad (5.3.15)$$

definiert, worin $m_p = 1.6726 \dots \times 10^{-27} \text{kg}$ die Protonenmasse ist. Daher ist

$$\mu_p \simeq 10^{-3} \mu_B \quad (5.3.16)$$

nur etwa 1/1000 des e^- -Magnetons. Das gyromagnetische Verhältnis des stark wechselwirkenden Protons ist

$$g_p \simeq 5.6 \quad (5.3.17)$$

- Für Neutronen ist

$$\mu_n \simeq -3.8 \mu_n \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (5.3.18)$$

mit dem Magneton $\mu_n = e_0 \hbar / 2m_n c$. Fr Deuterium ist $\mu_D = 0.86 \mu_k$, das heißt $\mu_D \simeq \mu_p + \mu_n$. 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 den Übungen behandelt.

5.3.2 Eichprinzip und kovariante Ableitung

Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass das \mathbf{E} - und \mathbf{B} -Feld invariant sind unter einer Eichtransformation

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla \Lambda(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.19)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi'(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c} \partial_t \Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.20)$$

Insbesondere ist die klassische Lorentzkraft

$$\mathbf{F} = \frac{e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + e\mathbf{E} \quad (5.3.21)$$

eichinvariant. In der Quantenmechanik hängt die Schrödingergleichung explizit von \mathbf{A} und ϕ ab:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.22)$$

Wir fordern, dass auch in der Quantenmechanik die Dynamik eichunabhängig ist. Dies erzwingt eine Transformation der Wellenfunktion unter (5.3.20)

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.23)$$

dergestalt, dass aus (5.3.22) folgt

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) \right)^2 + e\phi'(\mathbf{x}, t) \right] \psi'(\mathbf{x}, t) = i\hbar\partial_t\psi'(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.24)$$

D.h. wir fordern, dass (5.3.22) impliziert

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c}\nabla\Lambda(\mathbf{x}, t) \right)^2 \psi'(\mathbf{x}, t) = \left(i\hbar\partial_t - e\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda(\mathbf{x}, t) \right) \psi'(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.25)$$

für jede Wahl von $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$, $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$. Dies ist erfüllt genau dann wenn

$$i\hbar\partial_t\psi' + \frac{e}{c}(\partial_t\Lambda)\psi' = C i\hbar\partial_t\psi, \quad (5.3.26)$$

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c}\nabla\Lambda(\mathbf{x}, t) \right)^2 \psi' = C \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi, \quad \forall \mathbf{A}. \quad (5.3.27)$$

Die Lösung der ersten Gleichung ist

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.28)$$

denn

$$\left(i\hbar\partial_t + \frac{e}{c}\partial_t\Lambda \right) \psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)} i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.29)$$

Damit gilt auch

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\nabla\Lambda \right) \psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)} (-i\hbar\nabla)\psi, \quad (5.3.30)$$

und somit ist der zweite Punkt erfüllt. Das heißt, wir haben gezeigt, dass unter einer Eichtransformation

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.31)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi'(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.32)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.33)$$

die Schrödingergleichung invariant ist,

$$i\hbar\partial_t\psi = H(\mathbf{A}, \phi)\psi \Leftrightarrow i\hbar\partial_t\psi' = H(\mathbf{A}', \phi')\psi'. \quad (5.3.34)$$

Nun folgern wir mit der umgekehrten Logik: Wir werden zeigen, dass die Forderung nach einer Eichinvarianz der Schrödingergleichung automatisch zur korrekten Kopplung an das elektromagnetische Feld führt. Betrachten wir hierzu zunächst die freie Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.35)$$

Die freie Schrödingergleichung ist invariant unter einer *globalen* Phasentransformation

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i\lambda} \psi(\mathbf{x}, t), \quad \lambda \in \mathbb{R} \text{ konstant}, \quad (5.3.36)$$

also

$$i\hbar \partial_t \psi' = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)^2 \psi'. \quad (5.3.37)$$

Dies stellt eine $U(1)$ -Symmetrietransformation dar, wobei $U(1)$ die Lie-Gruppe der unitären 1×1 -Matrizen ist,

$$\begin{aligned} U(1) &= \{c \in \mathbb{C}^{1,1} \equiv \mathbb{C} \mid c^\dagger c = \mathbb{1}\} \\ &= \{c \in \mathbb{C} \mid |c| = 1\}. \end{aligned} \quad (5.3.38)$$

Da λ konstant ist, spricht man von einer *globalen Symmetrie*. Wir fragen uns, was passiert, wenn wir diese globale $U(1)$ -Symmetrie eichen, d.h. wenn wir fordern, dass die Dynamik invariant ist unter einer ortsabhängigen Phasentransformation

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \psi(\mathbf{x}, t), \quad g \in \mathbb{R}. \quad (5.3.39)$$

Im Falle eines ortsabhängigen $\Lambda \equiv \Lambda(\mathbf{x}, t)$ spricht man von einer *lokalen Symmetrie* oder auch einer *Eichsymmetrie*. Berechnen wir

$$\partial_t \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} (\partial_t + ig \partial_t \Lambda) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.40)$$

und

$$\nabla \psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} (\nabla + ig \nabla \Lambda(\mathbf{x}, t)) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.41)$$

Die Schrödingergleichung in ihrer ursprünglichen Form (5.3.35) ist also nicht invariant unter einer lokalen $U(1)$ -Symmetrie. Wir können allerdings eine invariante Schrödingergleichung konstruieren, indem wir - im einfachsten Fall - schlicht ∂_t und $\partial_{\mathbf{x}} \equiv \nabla$ ersetzen durch die Differentialoperatoren \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_t \psi(\mathbf{x}, t))' &= e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_t \psi(\mathbf{x}, t), \\ (\mathcal{D}_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t))' &= e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (5.3.42)$$

Beachte, dass aus der zweiten Gleichung insbesondere folgt, dass auch

$$(\mathcal{D}_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, t))' = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)} \mathcal{D}_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.43)$$

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 sich durch eine Eichtransformation ergebenden Faktor $e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}$ kürzen und erhalten somit eine invariante Gleichung.

Konstruieren wir zunächst \mathcal{D}_t . Aus (5.3.40) schließen wir, dass wir zu ∂_t eine Größe addieren müssen, die ihrerseits unter einer Eichtransformation transformiert. Das führt uns auf den Ansatz

$$\mathcal{D}_t = \partial_t + ig\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.44)$$

wobei unter $U(1)$ -Transformation gelten muss, dass

$$\alpha(\mathbf{x}, t) \rightarrow \alpha'(\mathbf{x}, t) = \alpha(\mathbf{x}, t) - \partial_t \Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.45)$$

Auf die gleiche Weise erhalten wir

$$\mathcal{D}_{\mathbf{x}} = \partial_{\mathbf{x}} - ig\beta(\mathbf{x}, t) \quad (5.3.46)$$

mit

$$\beta(\mathbf{x}, t) \rightarrow \beta'(\mathbf{x}, t) = \beta(\mathbf{x}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.47)$$

Die so definierten Differentialoperatoren erfüllen die Bedingung (5.3.42). Die eichinvariante Schrödingergleichung lautet deshalb

$$i\hbar\mathcal{D}_t\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\mathcal{D}_\mathbf{x})^2\psi(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.48)$$

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 (5.3.48) genau die Bewegung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld beschreibt, falls wir die folgende Identifikation durchführen,

$$g = \frac{e}{\hbar c}, \quad \alpha(\mathbf{x}, t) = c\phi(\mathbf{x}, t), \quad \beta(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t). \quad (5.3.49)$$

Fassen wir also zusammen:

- Die Kopplung an das elektromagnetische Feld *folgt* aus der Eichung der globalen $U(1)$ -Symmetrie der Schrödingergleichung. Elektromagnetismus ist eine $U(1)$ -Eichtheorie.
- Die Größen \mathcal{D}_t und $\mathcal{D}_\mathbf{x}$ heißen *kovariante Ableitungen*, weil $\mathcal{D}\psi$ so transformiert wie ψ .

Die Erkenntnis, dass die Eichung einer globalen Symmetrie zur Beschreibung einer Kraft führt, ist von überragender Bedeutung für die Formulierung der modernen Physik. Tatsächlich können alle vier Grundkräfte in der Natur aus diesem Eichprinzip gewonnen werden. Die Eichgruppen der übrigen drei Kräfte sind hierbei die folgenden Lie-Gruppen:

$$\begin{aligned} \text{schwache Kernkraft} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe } SU(2) \\ \text{starke Kernkraft} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe } SU(3) \\ \text{Gravitation} &\leftrightarrow \text{Eichgruppe } SL(2, \mathbb{C}) \end{aligned}$$

Insbesondere ist die Eichgruppe des Standardmodells der Teilchenphysik, welches den Elektromagnetismus sowie die schwache und starke Kraft beschreibt, $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$.

Abschließend möchten wir noch drei weiterführende Bemerkungen zu den Implikationen der $U(1)$ -Symmetrie des Elektromagnetismus machen:

- Die globale $U(1)$ -Symmetrie der freien Schrödingergleichung (5.3.35) impliziert über das Noethertheorem eine Erhaltungsgröße - die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{x}, t)$, die der Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t\rho = \nabla\mathbf{j} \quad (5.3.50)$$

genügt, bzw. die *Ladung* $e \int d^3x \rho(\mathbf{x}, t)$. Daher rührt auch der Name *Noether-Ladung* für die Erhaltungsgröße einer kontinuierlichen Symmetrie.

- 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} . Quantenmechanisch ist dies nicht so. Der berühmte *Aharonov-Bohm-Effekt* zeigt: Die fundamentalen physikalischen Größen in der Quantenmechanik sind nicht \mathbf{E} und \mathbf{B} sondern eichinvariante Kombinationen der Potentiale \mathbf{A} und ϕ , welche nicht mit den lokalen Feldstärken \mathbf{B} und \mathbf{E} im für die Wellenfunktion eines Teilchens zugänglichen Raumbereich übereinstimmen müssen. Wir werden diesen Effekt in den Übungen genau besprechen.

- Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass die elektromagnetischen Gleichungen eine deutlich symmetrischere Form annehmen, wenn in der Natur ein magnetischer Monopol existieren würde. Magnetische Monopole wurden bislang in der Natur aber nicht beobachtet. Falls sie jedoch existieren sollten, so folgt in der Quantenmechanik aus der Eichtransformation der Wellenfunktion die Quantisierung der elektrischen Elementarladung in Einheiten der magnetischen Monopolladung. Dieser Dirac-Monopol-Effekt wird z.B in Sakurai, Kapitel 2.6 besprochen.

6. Näherungsmethoden

6.1 Stationäre (Rayleigh-Schrödinger) Störungstheorie

6.1.1 Nicht entarteter 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. Das Beherrschen dieser Störungstheorie ist deshalb für konkrete Anwendungen entscheidend.

Betrachten wir einen Hamilton-Operator der Form

$$H = H_0 + \lambda H_1. \quad (6.1.1)$$

Dabei bezeichnet H_0 einen “ungestörten” Hamilton-Operator mit (bekannter) Eigenbasis

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^0\rangle \quad (6.1.2)$$

und λH_1 einen “kleinen” Störterm. Wir denken uns λ als einen freien Parameter in der Theorie, z.B. als eine Kopplungskonstante, die wir *behandeln*, als wäre sie eine freie tunebare Größe. Für kleine Werte von λ geht die Dynamik dann in die durch die ungestörte Schrödingergleichung beschriebene über. Ferner behandeln wir zunächst den Fall, dass H_0 ein nicht-entartetes Spektrum besitzt.

Wir sind nun daran interessiert, die Energieeigenwerte und die zugehörige Eigenbasis von H zu finden, also

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (6.1.3)$$

Dafür nutzen wir den folgenden Ansatz: Wir entwickeln $|n\rangle$ und E_n als *Störungsreihe in λ* um $E_n^{(0)}$ und $|n^0\rangle$,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} \quad (6.1.4)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |n^j\rangle \quad (6.1.5)$$

Dies ist nur möglich, falls sich $|n\rangle$ und $|n^0\rangle$ qualitativ nur wenig unterscheiden, denn wir behandeln λ ja als freien Parameter mit $\lim_{\lambda \rightarrow 0} H = H_0$. Ein solcher Ansatz ist z.B. nicht zulässig, wenn sich die ungestörten und gestörten Energielevels $E_n^{(0)}$ und $E_n^{(i)}$ kreuzen (Level-crossing). Weiterhin können Bindungszustände nicht perturbativ aus den ungebundenen Zuständen etwa der freien Schrödingergleichung

erhalten werden. Wir werden später sehen, dass ein Bindungszustand Beiträge zu allen Ordnungen in $\lambda H_1 = V$ hat. Im allgemeinen ist die Reihe nicht konvergent sondern asymptotisch:

$$f(\lambda) = \sum_{k=0}^m a_k \lambda^k + R_m(\lambda) \quad (6.1.6)$$

$$\text{mit } \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left(\frac{R_m(\lambda)}{\lambda^m} \right) = 0, \quad \lim_{m \rightarrow \infty} R_m(\lambda) = \infty. \quad (6.1.7)$$

Die ‘‘Kleinheit’’ von λH_1 ist nicht nur durch $\lambda \ll 1$, sondern durch die Struktur von H_1 gegeben.

Obiger Ansatz ergibt

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots). \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

Die Terme auf der linken und rechten Seite der Gleichung müssen nach unsere Logik nun in jeder Ordnung von λ separat übereinstimmen. Damit ergibt sich

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^0\rangle, \quad (6.1.9)$$

$$H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^1\rangle + E_n^{(1)} |n^0\rangle, \quad (6.1.10)$$

$$H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^{(0)} |n^2\rangle + E_n^{(1)} |n^1\rangle + E_n^{(2)} |n^0\rangle. \quad (6.1.11)$$

$$\dots \quad (6.1.12)$$

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

$$\langle n^0 | n^j \rangle = 0, \quad j = 1, 2, \dots \quad (6.1.14)$$

Wir wollen nun $E_n^{(j)}$ und $|n^{(j)}\rangle$ finden.

- Berechnung von $E_n^{(1)}$:

Multipliziere die Gleichung (6.1.10) mit $\langle n^0 |$. Damit folgt

$$\underbrace{\langle n^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{= E_n^{(0)} \langle n^0 | n^1 \rangle = 0} + \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^{(0)} \underbrace{\langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1}. \quad (6.1.15)$$

Damit erhalten wir

$$E_n^{(1)} = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle. \quad (6.1.16)$$

- 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 $\langle m^0 |$, erhalten wir

$$E_m^{(0)} \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^{(0)} \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{c_m} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle m^0 | n^0 \rangle}_{=\delta_{mn} \Rightarrow 0}. \quad (6.1.18)$$

Damit folgt

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})c_m = \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle, \quad (6.1.19)$$

$$c_m = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})}, \quad (6.1.20)$$

da für $n \neq m$ auch $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ gilt. Damit haben wir gefunden:

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} |m^0\rangle. \quad (6.1.21)$$

- Berechnung von $E_n^{(2)}$:

Multiplizieren wir nun Gleichung (6.1.11) mit $\langle n_0 |$ dann erhalten wir $E_n^{(2)} = \langle m^0 | H_1 | n^1 \rangle$, also

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})}. \quad (6.1.22)$$

Insbesondere ist $E_0^{(2)} < 0$ für den Grundzustand. Wenn alle Übergangselemente $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle$ vergleichbar sind, stammen die wichtigsten Beiträge von benachbarten Levels. Man sieht ferner, dass kein Level-crossing auftreten kann.

6.1.2 Entarteter Fall

Wir suchen 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 ∞ -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., sowie

$$\langle \psi^0 | \psi^n \rangle = 0. \quad (6.1.28)$$

Aus (6.1.26) folgt:

$|\psi^0\rangle$ ist Eigenvektor zu H_0 mit Eigenwert $E^{(0)}$. Sei jetzt

$$\mathbb{P}_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{d|n} |n_i^0\rangle\langle n_i^0|, \quad \langle n_i^0 | n_j^0 \rangle = \delta_{ij} \quad (6.1.29)$$

der Projektor auf den Unterraum der Eigenzustände von H_0 zum Eigenwert $E_n^{(0)}$. Multipliziert man (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,

$$\mathbb{P}_n^{(0)} (H_0 - E_n^{(0)}) |\psi^1\rangle = 0, \quad (6.1.30)$$

dann schließt man aus (6.1.27), dass

$$\mathbb{P}_n^{(0)} H_1 \mathbb{P}_n^{(0)} |\psi^0\rangle = E^{(1)} |\psi^0\rangle \quad (6.1.31)$$

gilt. Hierbei haben wir hinter H_1 eine $\mathbb{1} = \sum \mathbb{P}_n^{(0)}$ eingeschoben und verwandt, dass $|\psi^0\rangle = \mathbb{P}_n^{(0)} |\psi^0\rangle$ ist. $|\psi^0\rangle$ ist also Eigenvektor von $\mathbb{P}_n^{(0)} H_1 \mathbb{P}_n^{(0)}$ zum Eigenwert $E^{(1)}$. Multiplikation von (6.1.31) mit $\langle n_k^0 |$ ergibt die Matrixeigenwertgleichung

$$\sum_i \left(\langle n_k^0 | H_1 | n_j^0 \rangle - E^{(1)} \delta_{kj} \right) \langle n_j^0 | \psi^0 \rangle = 0. \quad (6.1.32)$$

Die $E_{n,i}^{(1)}, i = 1, \dots, d(n)$ resultieren als Eigenwerte dieses Problems der Diagonalisierung von H_1 auf dem Unterraum n , mit den entsprechenden Eigenzuständen $|\psi_n^0\rangle = \sum_j c_{n_j}^{(i)} |n_j^0\rangle$. Für die $c_{n_j}^{(i)}$ erhält man

$$c_{n_j}^{(i)} = \frac{1}{E_{n_j}^{(1)} - E_{n_i}^{(1)}} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n_j^0 | H_1 | m \rangle \langle m | H_1 | n_i^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.1.33)$$

Bemerkungen:

- In Ordnung $\mathcal{O}(\lambda)$ ist die störungstheoretische Korrektur wie im nichtentarteten Fall mit einer zusätzlichen Diagonalisierung im entarteten Unterraum bestimmbar.
- In höheren Ordnungen der entarteten Störungstheorie gibt es verschiedene Verfahren der Bestimmung der Terme, insbesondere die von Kato und Block, die auf unterschiedliche Anzahl von Termen kommen.

6.1.3 Ritzsches Variationsverfahren

Das Ritzsche Variationsprinzip ist eine Methode der Störungsrechnung, welche eine Abschätzung für die Änderung der Grundzustandsenergie durch eine Störung ermöglicht, sofern wir ein gutes qualitatives Verständnis für die Auswirkung der Störung auf die Grundzustandswellenfunktion besitzen. In den Übungen zeigen wir, dass die Grundzustandsenergie E_0 immer der Schranke

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (6.1.34)$$

genügt, wobei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand sei.

Das Ritzsche Variationsprinzip betrachtet nun einen Zustand $|\psi(\mu)\rangle$, der von einem Parameter μ abhängt, und die Größe

$$E(\mu) := \frac{\langle \psi(\mu) | H | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle}. \quad (6.1.35)$$

Minimierung von $E(\mu)$ liefert eine obere Schranke für E_0 .

Dies werden wir in der Übung zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des Helium-Atoms verwenden.

6.2 Relativistische Korrekturen zum Wasserstoffatomspektrum - Feinstruktur

Als Anwendung der allgemeinen stationären Störungstheorie wollen wir nun die Feinstruktur des Wasserstoffatoms betrachten.

Aus der nicht-relativistischen Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom mit Hamiltonian

$$H \equiv H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{r} \quad (6.2.1)$$

hatten wir unter Vernachlässigung des Elektronenspins die Energieeigenwerte und -eigenfunktionen wie folgt bestimmt:

$$H_0 |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle, \quad (6.2.2)$$

wobei die Energieeigenwerte gegeben sind durch

$$E_n = -\frac{Mc^2}{2} (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} = -1\text{Ry} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (6.2.3)$$

(n^2 -fache Entartung.) Die Kernladungszahl des Wasserstoffatoms ist $Z = 1$.

Wir erweitern unser Modell des Wasserstoffatoms nun um folgende Terme:

- Hinzunahme der Spin-Quantenzahlen des Elektrons erweitert die Energie-Eigenzustände von

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s_z\rangle. \quad (6.2.4)$$

Die Energieeigenwerte aufgrund von H_0 sind nun $2n^2$ -fach entartet.

- Aus der relativistischen Diracgleichung des Elektrons folgen 3 Korrekturterme zu H_0 , und wir schreiben

$$H = H_0 + H_{rKE} + H_D + H_{SpB} \quad (6.2.5)$$

mit den folgenden Beiträgen:

- H_{rKE} : beschreibt relativistische Korrekturen zur kinetischen Energie.
- H_D : beschreibt den sogenannten Darwin-Term aufgrund der relativistischen 'Zitterbewegung' des Elektrons.
- H_{SpB} : stellt die Spin-Bahn-Kopplung dar.

6.2.1 Relativistische Korrektur zur kinetischen Energie

Aus

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + M^2 c^4} = M c^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{1}{8} \frac{\mathbf{p}^4}{M^3 c^2} + \dots \quad (6.2.6)$$

erhalten wir

$$H_{rKE} = -\frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{M^3 c^2} + \dots \quad (6.2.7)$$

$$= -\frac{p^2}{2M} \left(\frac{p^2}{4M^2 c^2} \right) \cong -\frac{p^2}{2M} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2 M^2 c^2} \right) \cong \frac{p^2}{2M} (Z\alpha)^2 \quad (6.2.8)$$

$$= -\frac{1}{2M c^2} \left(H_0 + \frac{Z e^2}{r} \right)^2. \quad (6.2.9)$$

Daraus folgt, dass H_{rKE} proportional zu $(Z\alpha)^2$ für kleine Z unterdrückt ist.

Nun betrachten wir die 1. Ordnung der Störungstheorie:

$$\Delta E_{nlm} = \langle n l m | H_{rKE} | n l m \rangle \quad (6.2.10)$$

$$= -\frac{1}{2m c^2} \left(E_n^2 + \lambda E_n Z e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + (Z e^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right). \quad (6.2.11)$$

Aus dem Virialsatz (Übungen) erhalten wir:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \left\langle r \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{\langle r \frac{\partial V_C}{\partial r} \rangle}{Z e^2} = -\frac{2}{Z e^2} \langle H_0 \rangle, \quad (6.2.12)$$

da

$$2 \langle T \rangle = \langle r V'(r) \rangle = Z e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = 2 \left\langle H_0 + \frac{Z e^2}{r} \right\rangle. \quad (6.2.13)$$

Somit erhalten wir:

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{2Z^2}{(2l+1) a^2 n^3}, \quad (6.2.14)$$

und damit:

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{M c^2 (Z\alpha)^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) < 0 \quad (6.2.15)$$

für alle n, l .

Bemerkung:

- Die nicht entartete Störungstheorie ist in Ordnung, da

$$\langle n l m | H_{rKE} | n l' m' \rangle = 0 \quad (6.2.16)$$

für $l \neq l', m \neq m'$.

6.2.2 Spin-Bahn-Kopplung

$$H_{SpB} = \frac{e^2}{2M^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr} \mathbf{S} \mathbf{L} \quad \text{mit} \quad \phi(r) = -\frac{Z}{r}. \quad (6.2.17)$$

Heuristisch können wir diesen Term interpretieren als die Energie $H_{SpB} \sim -\frac{e}{mc} \mathbf{S} \mathbf{B}$ aufgrund des spinmagnetischen Moments des Elektrons im \mathbf{B} -Feld des Protons, welches im Ruhesystem des Elektrons um

dieses rotiert. Dieses \mathbf{B} -Feld berechnet sich klassisch zu $\mathbf{B} = -\mathbf{v} \times \frac{\mathbf{E}}{c}$, wobei $\mathbf{E} = -\nabla\phi = -\frac{\mathbf{x}}{r} \frac{d\phi(r)}{dr}$ das \mathbf{E} -Feld des Protons darstellt. Aus der klassischen Elektrodynamik erinnern wir uns allerdings daran, dass wir dieses naive Ergebnis noch mit 2 multiplizieren müssen, denn das Ruhesystem des Elektrons stellt kein Inertialsystem dar (Stichwort: Thomas-Präzession)¹. Natürlich ist diese Interpretation nur heuristisch, da das Konzept einer festen Trajektorie und somit eines Ruhesystems des Elektrons quantenmechanisch keinen Sinn machen. Das Ergebnis (6.2.17) folgt allerdings durch direkte Auswertung der relativistischen Dirac-Gleichung und ist deshalb korrekt.

Wir behandeln nun $H = H_0 + H_{SpB}$ im Rahmen der entarteten Störungstheorie. Zunächst fragen wir uns, ob $|n, l, m, s_z\rangle$ geeignet ist. Wegen

$$[H_{SpB}, L_z] \neq 0, \quad [H_{SpB}, S_z] \neq 0 \quad (6.2.18)$$

sind die $|n, l, m, s_z\rangle$ nicht diagonal unter H_{SpB} und deshalb nicht für die Störungsrechnung geeignet.

Wir müssen somit eine andere Basis der Eigenzustände von H_0 finden. Als weitere Möglichkeit kommen die Eigenzustände nicht von $\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z$, sondern von $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$ in Frage mit dem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Aus

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (6.2.19)$$

folgern wir, dass die Eigenbasis $|n, j, m, l, s\rangle$ diagonal unter H_{SpB} ist. Die j -Quantenzahl nimmt dabei die Werte $j = l \pm 1/2$ an. Weiterhin gilt für die Drehimpuls-Eigenzustände $|j, m, l, s\rangle$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} |l + 1/2, m, l, 1/2\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [(l + 1/2)(l + 3/2) - l(l + 1) - 3/4] |l + 1/2, m, l, 1/2\rangle \quad (6.2.20)$$

und somit insgesamt

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} |l + 1/2, m, l, 1/2\rangle = \frac{\hbar^2}{2} l |l + 1/2, m, l, 1/2\rangle, \quad (6.2.21)$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} |l - 1/2, m, l, 1/2\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (-l - 1) |l - 1/2, m, l, 1/2\rangle. \quad (6.2.22)$$

Wir berechnen nun die Energiekorrektur aufgrund von H_{SpB} in erster Ordnung Störungstheorie,

$$\Delta E_{SpB}(n, l \pm 1/2, m, l, 1/2) = \frac{Ze^2}{2M^2c^2} \underbrace{\left\langle \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \right\rangle}_{\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle_{(n, l \pm 1/2, m, l, 1/2)} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}} \quad (6.2.23)$$

Mithilfe von

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{M^3 c^3 \alpha^3 Z^3}{\hbar^3 n^3 l(l + 1/2)(l + 1)}, \quad (6.2.24)$$

was wir hier ohne Beweis nutzen, erhalten wir unter Verwendung von (6.2.21)

$$\Delta E_{SpB} = \frac{Mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3 l(l + 1/2)(l + 1)} \begin{cases} l & \text{für } j = l + 1/2 \\ -l - 1 & \text{für } j = l - 1/2 \end{cases}. \quad (6.2.25)$$

¹ Siehe z.B. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, Kapitel 11.8.

Zusammen mit der relativistischen Korrektur erhalten wir:

$$(\Delta E_{rKE} + \Delta E_{SpB})_{j=l\pm 1/2} = \frac{Mc^2}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^4 \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right\}. \quad (6.2.26)$$

Dies ähnelt der Form von ΔE_{rKE} jedoch mit $l \rightarrow j = l \pm 1/2$.

Bemerkung:

- Die Zustände mit $l = 0$ führen zu $\langle 1/r^3 \rangle \sim 1/l \sim \infty$. Für $l = 0$ kommt nur $j = 1/2$ in Frage. Für $j = 1/2$ ist $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle \propto l = 0$, so dass obige Divergenz aufgehoben ist. Für ein realistisches Kernpotential ist V bei $r = 0$ nicht mehr proportional zu $1/r$, so dass $\langle V'(r)/r \rangle$ nicht mehr gegen unendlich für $l = 0$ geht und damit $(\Delta E_{SpB})_{l=0} = 0$ ist und (6.2.26) gilt demnach nur für $l \geq 1$.

6.2.3 Darwin-Term

Wie zuletzt bemerkt ist $\Delta E_{SpB} = 0$ für $l = 0$. Diesen Part übernimmt dann der Darwin-Term

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8(Mc)^2} \nabla^2 V = -\frac{\hbar^2}{8M^2c^2} (4\pi e Q_{Kern}(\mathbf{x})) \quad (6.2.27)$$

$$= \frac{\pi \hbar^3 (Z\alpha)}{2M^2c} \delta^{(3)}(\mathbf{x}), \quad (6.2.28)$$

mit der Kernladungsdichte $Q_{Kern}(\mathbf{x})$.

Heuristisch: "Zitterbewegung" des e^- :

$$\langle V(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \rangle = V(\mathbf{x}) + \underbrace{\langle \delta\mathbf{x} \nabla V \rangle}_{=0} + \frac{1}{2} \langle (\delta\mathbf{x} \nabla)^2 V \rangle + \dots \quad (6.2.29)$$

$$= V(\mathbf{x}) + \frac{1}{6} \delta r^2 \nabla^2 V(\mathbf{x}). \quad (6.2.30)$$

Das in seiner Position ausgeschmierte e^- sieht innerhalb der Schwankung

$$\delta r = \lambda_c = \frac{\hbar}{Mc} \quad (6.2.31)$$

ein ausgeschmiertes Potential.

Insgesamt ergibt sich die **Feinstruktur**

$$\Delta E_{rKE} + \Delta E_D + \Delta E_{SpB} = Ry \frac{Z^2 (Z\alpha)^2}{n^2} \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right\} \quad (6.2.32)$$

$$\text{für } j = l \pm 1/2, \quad l \geq 0. \quad (6.2.33)$$

Bemerkung:

- Für $l = 0$ hat der Darwin-Term, der wegen der δ -Funktion nur für s-Zustände einen Betrag liefert, die Form

$$\langle \Delta E_D \rangle_{njl} = \frac{\pi \hbar^3 (Z\alpha)}{2M^2c} |\psi_{nl}(0)|^2 = \frac{Mc^2 (Z\alpha)^4}{2n^3} \delta_{l0} \quad (6.2.34)$$

und "stopft" die $l = 0$ Lücke von ΔE_{SpB} .

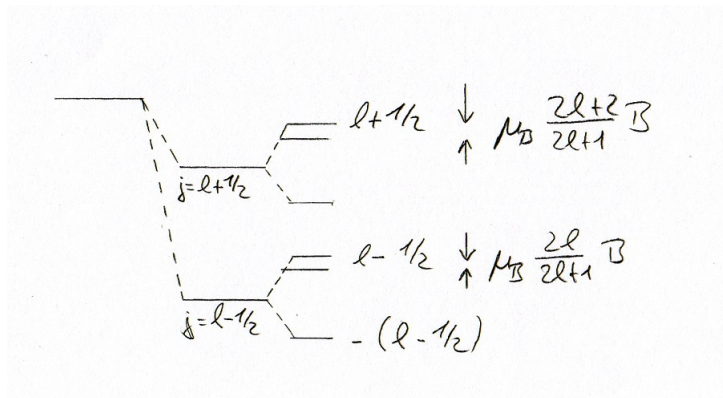


Abbildung 6.2: "Anormaler" Zeeman-Effekt. Die Niveaus $l \pm 1/2$ werden durch das Feld in $2l + 2$ und $2l$ Niveaus aufgespalten.

Bemerkung:

- Keine Matrixelemente zwischen $l = 0$ und $l = 1$, da H_z Paritätsgerade ist.

(b) Starkes Feld: Paschen - Back -Effekt

Wenn B so stark ist, dass $H_z \gg H_{rel}$ ist, wählen wir die gemeinsame Basis der $|n l m_l; 1/2 m_s\rangle, m_s = \pm 1/2$, von $H_{Coulomb}$ und H_z .

$$\Rightarrow \Delta E_z(n l m_l; m_s) = \mu_B B (m_l + m_s), \tag{6.3.5}$$

zu denen dann noch relativistische Korrekturen in 1. Ordnung Störungstheorie kommen.²

Insgesamt ergibt sich folgende B-Abhängigkeit der Zeemanaufspaltung, welche sich im Rahmen der entarteten Störungstheorie berechnen lässt:

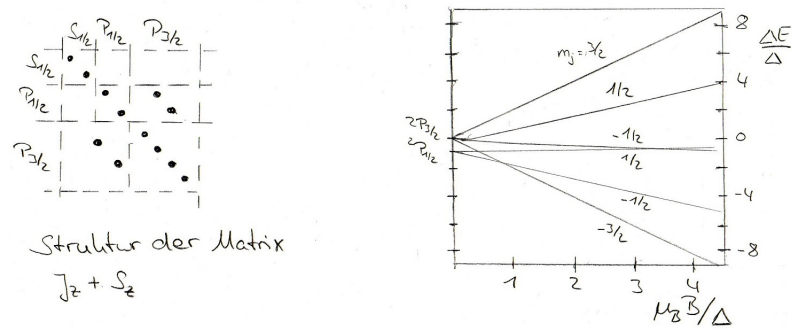


Abbildung 6.3: Relative Energieverschiebung $\Delta E/\Delta$ als Funktion des reduzierten Magnetfeld des $\mu_B B/\Delta$ für $n = 2$ und $P_{1/2}, P_{3/2}$.

²Siehe Schwabl, *Quantenmechanik*, Kapitel 14.1.2

Bemerkung:

- Für ein starkes B-Feld (Paschen-Back) präzedieren **L** und **S** unabhängig voneinander um **B**. Dann sind S, S_z, L, L_z und J_z gute Quantenzahlen, nicht aber J .

6.3.2 Stark-Effekt

Wir betrachten nun ein konstantes, homogenes **E**-Feld: $\mathbf{E} = \epsilon \mathbf{e}_z$ mit:

$$H_1 = -e \cdot \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} = -e\epsilon z. \quad (6.3.6)$$

Aus $[L_z, z] = 0$ erhalten wir:

$$0 = \langle n l m | [L_z, z] | n' l' m' \rangle = (m - m') \langle n l m | z | n' l' m' \rangle \quad (6.3.7)$$

$$\Rightarrow m = m'. \quad (6.3.8)$$

Aus der Parität erhalten wir:

$$P\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x} \quad \text{folgt} \quad l' = l \pm 1. \quad (6.3.9)$$

Wir erhalten also für die Stark-Verschiebung des Grundzustands:

$$1. \text{ Ordnung : } E_1^{(1)} = 0 \quad \text{wegen Parität} \quad (6.3.10)$$

$$2. \text{ Ordnung : } E_1^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} e^2 \epsilon^2 \frac{|\langle n, 1, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1 - E_n} \quad (6.3.11)$$

$$\text{Größenordnung: } E_1^{(2)} \cong -a^3 \epsilon^2$$

$$\text{Exakt: } E_1^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 \epsilon^2 = -\frac{1}{2} \alpha_p \epsilon^2$$

$$\Rightarrow \alpha_p = \frac{9}{2} a^3 \quad \text{Polarisierbarkeit von H.} \quad (6.3.12)$$

Bemerkung:

- \Rightarrow **Nur Stark-Effekt 2. Ordnung** im Grundzustand!
- Für angeregte Zustände: Aufspaltungen 1. Ordnung möglich.

6.4 Zeitabhängige Störungstheorie

6.4.1 Wechselwirkungsbild

Wir betrachten jetzt einen zeitabhängigen Störterm $V(t)$ zu einem t -unabhängigen H_0 :
Zum Zeitpunkt $t = t_0$ werde V "eingeschaltet":

$$H(t) = H_0 + V(t)\Theta(t - t_0) \quad (6.4.1)$$

$$\Rightarrow (i) \quad t < t_0 : \text{Eigenzustände } (H_0 - E_m) | m \rangle = 0 \quad \text{sind stationär :} \quad (6.4.2)$$

$$| m, t \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | m \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} | m \rangle \quad (6.4.3)$$

$$(ii) \quad t \geq t_0 : | m, t \rangle \quad \text{nicht mehr stationär,} \quad (6.4.4)$$

da $| m \rangle$ im Allgemeinen kein Eigenzustand zu H mehr ist.

Für kleine V wird sich eine störungstheoretische Behandlung in der Basis $\{|m\rangle\}$ von H_0 anbieten. Zunächst isolieren wir die freie Zeitentwicklung im **Wechselwirkungsbild = Dirac-Bild**:

Wir schreiben:

$$\mathcal{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}, \quad (6.4.5)$$

und definieren:

$$\underbrace{|\psi, t\rangle_I}_{\text{WW-Bild}} = \mathcal{U}_0^\dagger(t) \underbrace{|\psi, t\rangle}_{\text{Schrödinger-Bild}} \quad (6.4.6)$$

$$\Rightarrow i\hbar\partial_t|\psi, t\rangle_I = -H_0\mathcal{U}_0^\dagger(t)|\psi, t\rangle + \mathcal{U}_0^\dagger(t)[H_0 + V(t)]|\psi, t\rangle. \quad (6.4.7)$$

$$\Rightarrow i\hbar\partial_t|\psi, t\rangle_I = V_I(t)|\psi, t\rangle_I \quad (6.4.8)$$

$$\text{mit } V_I(t) = \mathcal{U}_0^\dagger(t)V(t)\mathcal{U}_0(t) \quad (6.4.9)$$

WW-Bild

Bemerkung:

- Vergleich zum Heisenberg-Bild:

$$\hat{O}_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t)\hat{O} \underbrace{\mathcal{U}(t)}_{\text{Voller Zeitentwicklungs-Operator}} \quad (6.4.10)$$

Wir erhalten die Lösung der SGL im Wechselwirkungsbild wieder durch eine **Dyson-Reihe**:

$$|\psi, t\rangle = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) \right] |\psi, t_0\rangle, \quad (6.4.11)$$

die im WW-Bild zur **von Neumann-Reihe** wird:

$$|\psi, t\rangle_I = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) \dots V_I(t_n) \right] |\psi, t_0\rangle_I. \quad (6.4.12)$$

In störungstheoretischer Näherung wird die Reihe bis zu endlicher Ordnung berechnet (hier ist t_0 der Anfangszeitpunkt der Entwicklung).

6.4.2 Sudden Approximation

(oder plötzliche Parameteränderung)

Betrachte: (hier: $t_0 \equiv 0$)

$$(i) \quad t \leq 0 : H = H_0 \quad (6.4.13)$$

$$(ii) \quad t \geq 0 : H = H_0 + V, \quad V \equiv \text{const.} \quad (6.4.14)$$

In der Praxis: "Schaltzeit" kürzer als charakteristische Zeiten der nachfolgenden Dynamik:

$$\tau_S \ll \tau \cong (\max \Delta E)^{-1} \quad (6.4.15)$$

$$\text{EZ von } H = H_0 : \{|n^0\rangle\} \quad (6.4.16)$$

$$\text{EZ von } H = H_0 + V : \{|n\rangle\} \quad (6.4.17)$$

$$\text{Zustand zu } t = 0 : |\psi, 0\rangle \quad (6.4.18)$$

⇒ Zeitentwicklung für $t \geq 0$ einfach:

$$|\psi, t\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \langle n | \psi, 0\rangle \quad (6.4.19)$$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{\psi \rightarrow n} = |\langle n | \psi, 0\rangle|^2 \quad (6.4.20)$$

Wir stoßen nun auf folgendes Problem:

Wertet man z.B. $P_{mn} = P_{n \rightarrow m}$ störungstheoretisch aus, so gilt

$$P_{mn} = \delta_{nm} + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | V | n^0\rangle|^2}{(E_n - E_m)^2} + \mathcal{O}(\langle V \rangle^3). \quad (6.4.21)$$

Für kontinuierliche Spektren kommt es zu Divergenzen (Pol bei $E_m = E_n$). Regularisierung ergibt Fermis Goldene Regel aus dem Polterm.

6.4.3 Übergänge 1. Ordnung & Goldene Regel

Wir suchen nun die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von $|m, t\rangle$ in

$$|n, t\rangle = \mathcal{U}_0(t) |n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle. \quad (6.4.22)$$

Es gilt allgemein:

$$P_{\psi(t) \rightarrow n(t)} = |\langle n, t | \psi, t\rangle|^2 \quad \text{mit} \quad (6.4.23)$$

$$\langle n, t | \psi, t\rangle = \langle n | \mathcal{U}_0^\dagger(t) | \psi, t\rangle = \langle n | \psi, t\rangle_I \quad (6.4.24)$$

1. Ordnung Störungstheorie:

$$|\psi, t\rangle_I^{(1)} = |\psi, t_0\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi, t_0\rangle_I \quad (6.4.25)$$

Für den Anfangszustand gilt:

$$|\psi, t_0\rangle = |m, t_0\rangle = \mathcal{U}(t_0) |m\rangle \quad (6.4.26)$$

$$\Rightarrow |\psi, t_0\rangle_I = |m\rangle \quad (6.4.27)$$

Damit erhalten wir:

$$\Rightarrow |\psi, t\rangle_I^{(1)} = \left[1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right] |m\rangle \quad (6.4.28)$$

$$\Rightarrow \langle n, t | \psi, t\rangle_I^{(1)} = \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | V(t') | m\rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t'} \quad (6.4.29)$$

$$P_{mn}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i w_{nm} t'} \langle n | V(t') | m \rangle \right|^2 \quad (6.4.30)$$

$$\text{für } n \neq m, \quad w_{nm} = \hbar^{-1} (E_n - E_m) \quad (6.4.31)$$

Anwendung: Übergang in kontinuierliches System:

(Dies war in der Sudden Approximation für $V(t) \equiv V$ im allgemeinen nicht behandelbar. Problem hier: nur endliche Ordnung Störungstheorie.)

Betrachten wir nun das Beispiel:

$$V(t) = V\Theta(t), \quad V = \text{const.} \quad (6.4.32)$$

$$\Rightarrow P_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i w_{mn} t} - 1}{w_{mn}} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.33)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\sin(w_{mn} t/2)}{w_{mn}/2} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.34)$$

$$\text{Von Interesse: Übergangsrate } \Gamma_{mn} = \frac{P_{mn}}{t}$$

$$\Gamma_{mn}(t) = \frac{\sin^2(w_{mn} t/2)}{\hbar^2 (w_{mn}/2)^2 t} |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.35)$$

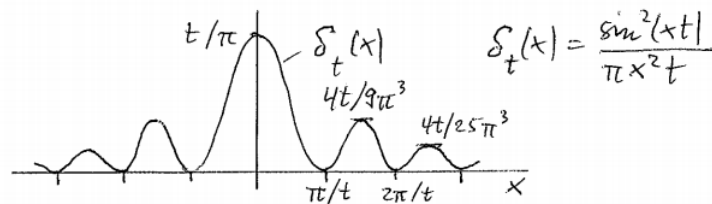


Abbildung 6.4: Testfunktion

Integration nach Multiplikation mit Testfunktion:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \delta_t(x) = \delta(x) \quad (6.4.36)$$

$$\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \Gamma_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n | V | m \rangle|^2 \quad (6.4.37)$$

wobei wir $\delta(sx) = |s|^{-1} \delta(x)$ verwendet haben. Man betrachte nun ein kontinuierliches Spektrum:

Sei

$$\rho(E_n) dE_n = \#(\text{Zustände}) \text{ in } (E_n, E_n + dE_n) \quad (6.4.38)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{mn} = \rho(E_m) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m | V | n \rangle|^2 \quad (6.4.39)$$

$$= \text{Übergangsrate } (|m\rangle \rightarrow \{|n\rangle\}) |E_m = E_n| \quad (6.4.40)$$

Fermis Goldene Regel

Hierbei wird angenommen, dass alle $|n\rangle$ im Zustandsbereich von $E_m = E_n$ die gleichen Übergangsmatrixelemente ($\langle n | V | m \rangle$) haben.

Bemerkung:

- Breite der Energieverteilung der Endzustände muss $\Delta E \gg 2\pi\hbar/t$ bei endlicher Zeit t sein.
- Viele Endzustände müssen innerhalb der regularisierten δ -Funktion f_t liegen für $t < \infty$.

$$\Rightarrow \frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \ll t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta\epsilon} \quad (6.4.41)$$

ist der Gültigkeitsbereich von Fermis Goldener Regel für:

$\delta\epsilon =$ Abstand der Endzustandsniveaus

$\Delta E =$ Breite der Verteilung der Niveaus

Verallgemeinerung auf periodische Störung:

$$V(t) = \Theta(t) [F e^{-i\omega t} + F^+ e^{i\omega t}] \quad (6.4.42)$$

$$\Rightarrow \Gamma_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) |\langle n | F | m \rangle|^2 \right] \quad (6.4.43)$$

$$+ \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m + \hbar\omega) |\langle n | F^+ | m \rangle|^2 \right]$$

Anwendungen: zum Beispiel Dipolübergänge im Strahlungsfeld.

6.4.4 Elektrische Dipolübergänge in Atomen

Als weitere Anwendung betrachten wir die Wechselwirkung von Atomen mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld. Atome mit mehreren e^- ,

$$H_0 = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + V(\mathbf{x}_i, t) + V_K(x_i) \right) \quad (6.4.44)$$

im Potential V_K des Kerns, ohne Spin, wechselwirken mit dem elektromagnetischen Feld über

$$V(\mathbf{x}_i, t) = -\frac{e}{2Mc} \{ \mathbf{p}_i, \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \} + \frac{e^2}{2Mc^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{x}_i, t) + e\Phi(\mathbf{x}_i, t). \quad (6.4.45)$$

Mit der Teilchen-Stromdichte

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{M}, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\}, \quad (6.4.46)$$

schreiben wir dies als

$$V(t) = \sum_i V(\mathbf{x}_i, t) = \frac{e}{c} \int d^3x \left[-\mathbf{j}(\mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}) \left(\frac{e}{2Mc} \mathbf{A}^2 + c\Phi \right)(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (6.4.47)$$

Freies Strahlungsfeld:

transversale oder Coulomb-Eichung:

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{A} &= 0. \quad \text{Keine Quellen : } \Phi = 0 \\ \Rightarrow \quad \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned} \quad (6.4.48)$$

\mathbf{A} genügt der Wellengleichung. Wir entwickeln nach Fourier:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (6.4.49)$$

Hamiltonian des Strahlungsfeldes: (V =Volumen)

$$H_{Str} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{V}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \left(c^{-2} |\dot{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}|^2 + |\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}|^2 \right) \quad (6.4.50)$$

Der Vergleich mit dem HO,

$$H_{HO} = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + \frac{mw^2}{2} q^2 \quad (6.4.51)$$

ergibt: $m \rightsquigarrow \frac{1}{4\pi c^2}$, $w \rightsquigarrow ck$. Damit entspricht der Leiteroperator-Darstellung des HO,

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} (\hat{a} e^{-iwt} + \hat{a}^\dagger e^{iwt}) \quad \text{mit } [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (6.4.52)$$

$$H_{HO} = \hbar w \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (6.4.53)$$

die Darstellung des Photonfeldes

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{kV}} \left(a_{\mathbf{k}, \lambda} \epsilon_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - w_{\mathbf{k}}t)} + h \cdot c \right), \quad (6.4.54)$$

wobei $\epsilon_{\mathbf{k}, \lambda}$ = Polarisationsvektor, $\lambda = 1, 2$ und $\epsilon_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{k} = 0$ ist wegen der Coulomb-Eichung.

Es gelten die Kommutatoren

$$[a_{\mathbf{k}, \lambda}, a_{\mathbf{k}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda, \lambda'}, \quad (6.4.55)$$

während alle anderen verschwinden. Obige Relationen **quantisieren das Strahlungsfeld (Fockraum-Quantisierung)** und führen zur Quantenfeldtheorie, der Quantenelektrodynamik.

$a_{\mathbf{k}, \lambda}^{(+)}$ = Vernichter (Erzeuger) eines Quants (Photons) mit der Wellenzahl \mathbf{k} und der Polarisierung λ .

$$\Rightarrow \quad H_{Str} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar w_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad w_{\mathbf{k}} = c |\mathbf{k}| \quad (6.4.56)$$

Zustände im **Fockraum** haben die Basis:

$$|\dots, n_{\mathbf{k},\lambda}, \dots\rangle = \prod_i \prod_{\lambda_i} |n_{\mathbf{k}_i, \lambda_i}\rangle \quad (6.4.57)$$

$$\text{mit } a_{\mathbf{k},\lambda} |\dots, n_{\mathbf{k},\lambda}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k},\lambda}} |\dots, n_{\mathbf{k},\lambda} - 1, \dots\rangle \quad (6.4.58)$$

usw.

Bemerkungen:

- $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ ist Operator im Wechselwirkungsbild bezüglich $H_0 + H_{Str}$.
- $(\rho(\mathbf{x}), \mathbf{j}(\mathbf{x}))$ ist in diesem WW-Bild $\left(H_0 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M}\right)$ durch:

$$(\rho_I(\mathbf{x}, t), \mathbf{j}_I(\mathbf{x}, t)) = e^{iH_0 t} (\rho(\mathbf{x}), \mathbf{j}(\mathbf{x})) e^{-iH_0 t} \quad (6.4.59)$$

zu ersetzen.

Wir betrachten spontane Emission:

$$\begin{cases} \text{Atomares } e^- : |m\rangle \rightarrow |n\rangle \\ \text{Strahlungsfeld} : |0\rangle \rightarrow a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |0\rangle = |\dots, 1_{\mathbf{k},\lambda}, \dots\rangle \end{cases} \quad (6.4.60)$$

Daraus folgt ein Störoperator von der Form $\sim \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ mit \mathbf{A} aus (6.4.54). Wegen $a_{\mathbf{k},\lambda} |0\rangle \equiv 0$ trägt in der Goldenen Regel für die Rate Γ_{mn} , siehe (6.4.43), nur der 2. Term bei:

$$\Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda}(t) = \frac{(2\pi e)^2}{kcV} \delta(E_m - E_n - \hbar ck) \left| \langle n | \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} | m \rangle \right|^2 \quad (6.4.61)$$

Für die Leistung dP_λ , welche im Raumwinkel $d\Omega$ abgestrahlt wird, gilt dann

$$dP_\lambda = \sum_{\mathbf{k} \in d\Omega} \hbar c k \Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda}. \quad (6.4.62)$$

Für die Dichte der Zustände gilt

$$\frac{dN}{d^3k} = \frac{V}{(2\pi)^3}. \quad (6.4.63)$$

Daraus folgt mit

$$d^3k = k^2 dk d\Omega \quad \text{und} \quad \mathbf{j}(\mathbf{k}) = \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} : \quad (6.4.64)$$

$$\Rightarrow dP_\lambda = d\Omega \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} V \hbar c k \Gamma_{mn,\mathbf{k},\lambda} \quad (6.4.65)$$

$$= d\Omega \int \frac{k^2 dk}{2\pi} \hbar e^2 |\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* | m \rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar ck) \quad (6.4.66)$$

$$\Rightarrow \frac{dP_\lambda}{d\Omega} = \frac{w^2 e^2}{2\pi c^3} |\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda}^* | m \rangle|^2 \Big|_{|\mathbf{k}|=w/c} \quad \text{mit } w=(E_m - E_n)/\hbar \quad (6.4.67)$$

Für Atome gilt

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \cong ka = \frac{a}{\lambda} \cong \alpha \ll 1. \quad (6.4.68)$$

Daher können wir entwickeln:

$$\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k}) | m \rangle = \langle n | \int d^3x \left(1 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \frac{1}{2} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})^2 + \dots \right) \mathbf{j}(\mathbf{x}) | m \rangle \quad (6.4.69)$$

$$= \langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) | m \rangle - i \int d^3x \langle n | (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{j}(\mathbf{x}) | m \rangle + \dots \quad (6.4.70)$$

Elektrische Dipolübergänge (E1)

Diese rühren vom führenden Term her:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) = \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \int d^3x \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{M}, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\} \quad (6.4.71)$$

$$= \frac{\mathbf{P}}{M} := \frac{1}{M} \sum_i \mathbf{p}_i \quad (6.4.72)$$

Für $\mathbf{X} = \sum_i i\mathbf{x}_i$ (Schwerpunktskoordinaten von Teilchen gleicher Masse) ist

$$\frac{\mathbf{P}}{M} = \frac{i}{\hbar} [H_0, \mathbf{X}], \quad (6.4.73)$$

so dass

$$\langle n | \mathbf{j}(\mathbf{k} = 0) | m \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle n | [H_0, \mathbf{X}] | m \rangle \quad (6.4.74)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n | \mathbf{X} | m \rangle. \quad (6.4.75)$$

Definition 6.1. *Dipolmoment:*

$$\mathbf{d}_{nm} = \langle n | \mathbf{X} | m \rangle \quad (6.4.76)$$

$$\Rightarrow \frac{dP_\lambda}{d\Omega} = \frac{w^4 e^2}{2\pi c^3} |\mathbf{d}_{nm} \cdot \epsilon_{\mathbf{k},\lambda}^*|^2 \quad (6.4.77)$$

Auswahlregeln:

bestimmen, welche Matrixelemente von $\mathbf{d}_{nm} \neq 0$ sind.

Der Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{L} = \sum_i (\mathbf{x}_i \times \mathbf{p}_i) \quad (6.4.78)$$

erfüllt:

$$[L_z, Z] = 0, \quad [L_z, X \pm iY] = \pm \hbar (X \pm iY). \quad (6.4.79)$$

Daraus folgt für Matrixelemente:

$$\langle l'm' | Z | l m \rangle (m' - m) = 0 \quad (6.4.80)$$

$$\langle l'm' | X \pm iY | l m \rangle (m' - m \mp 1) = 0 \quad (6.4.81)$$

Damit eines der obigen $ME \neq 0$ ist muss also

$$m' = \begin{cases} m \\ m \pm 1 \end{cases} \quad (6.4.82)$$

gelten. E1-Übergänge sind also nur möglich, wenn $|\Delta m| = |m' - m| \leq 1$ ist. Weiterhin folgt aus

$$[\mathbf{L}^2, [\mathbf{L}^2, \mathbf{X}]] = 2\hbar^2 \{\mathbf{X}, \mathbf{L}^2\}, \quad (6.4.83)$$

dass

$$\langle l'm' | \mathbf{X} | lm \rangle (l+l')(l+l'+2) [(l-l')^2 - 1] = 0 \quad (6.4.84)$$

und hieraus die l -Auswahlregel

$$l' = l \pm 1. \quad (6.4.85)$$

Da $l, l' \geq 0$ ist, kann der 1. Term nur für $l' = l = 0$ verschwinden. Hierfür ist jedoch $\langle 00 | \mathbf{X} | 00 \rangle = 0$ wegen der Paritätssymmetrie von \mathbf{X} .

Polarisation des ausgesandten Lichts:

- Für $m' = m \pm 1$ ist $\langle l'm' | X \mp iY | lm \rangle = 0$, $\langle l'm' | Z | lm \rangle = 0$, d.h.

$$\langle l'm' | X | lm \rangle = \pm i \langle l'm' | Y | lm \rangle \quad (6.4.86)$$

und somit

$$\mathbf{d} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.4.87)$$

- Für $m' = m$ ist $\langle l'm' | X \pm iY | lm \rangle = 0$, d.h.

$$\mathbf{d} \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.4.88)$$

- Da stets $\epsilon_{k,\lambda} \perp \mathbf{k}$ gilt, ist für $m' = m$ das Licht in der von $\mathbf{d} \sim \hat{e}_z$ und \mathbf{k} aufgespannten Ebene linear polarisiert. Für $\epsilon_{k,2}$ senkrecht zu dieser Ebene ist $\mathbf{d}\epsilon_{k,2} = 0$, die WSK $\Gamma_{mn,\mathbf{k},2}$ also gleich null. Auch in z-Richtung ist $\Gamma_{mn\mathbf{k}\hat{e}_z,\lambda} = 0$, da

$$\Gamma_{mn\mathbf{k},1} \propto |\mathbf{d}_{mn}\epsilon_{\mathbf{k},1}|^2 \propto \sin^2(\alpha). \quad (6.4.89)$$

- Entsprechend gilt für $m' = m \pm 1$ -Übergänge, dass $\mathbf{d} \propto \hat{e}_x \mp i\hat{e}_y$, so dass $\mathbf{d}(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y) = 0$ ist, also nur links (rechts)- zirkular polarisiertes Licht, $\epsilon_{k,\pm} \sim \hat{e}_x \pm i\hat{e}_y$, in z-Richtung ausgesandt wird, entsprechen dem Spin $\pm\hbar$ in z-Richtung (Drehimpulserhaltung!). Liegt \mathbf{k} 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.

Bemerkung:

- Einschränkungen durch Auswahlregeln z.B. Rydberg-Zustand:

$$|n, l = n - 1\rangle, \quad n \gg 1 \quad (6.4.90)$$

\Rightarrow Nur kaskadierender Zerfall über E1

$$|n, n - 1\rangle \rightarrow |n - 1, n - 2\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |n - m, n - m - 1\rangle \quad (6.4.91)$$

- Höhere Terme der Entwicklung von \mathbf{j} ergeben magnetische Dipol-(M1) und elektrische Quadrupol-Übergänge.

6.5 Die Feynmansche Pfadintegral-Darstellung

Wir wollen nun noch eine Formulierung der QM anreißen, welche Näherungen um die klassische Dynamik erlaubt.

Erinnerung: Zeitentwicklungsoperator:

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \tau e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t)} \quad (6.5.1)$$

Grundlegende Idee:

i Darstellung im Ortsraum:

$$\mathcal{U}(x_b t_b; x_a t_a) := \langle x_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle \quad (6.5.2)$$

ii Zerlege das Intervall $[t_a, t_b]$, $t_b > t_a$, in $n + 1$ ($\rightarrow \infty$) (infinitesimale) Zeitschritte

$$t_b \geq t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_1 \geq t_0 = t_a. \quad (6.5.3)$$

iii Nutze die Transitivität von $\mathcal{U}(t_3, t_1) = \mathcal{U}(t_3, t_2) \mathcal{U}(t_2, t_1)$ zur Faktorisierung

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \left(\prod_{i=1}^n \int dx_i \right) \prod_{i=1}^{n+1} \mathcal{U}(x_i t_i, x_{i-1} t_{i-1}) \quad (6.5.4)$$

mit $x_{n+1} = x_b$, $x_0 = x_a$, etc. für t_i .

iv Vereinfachende Annahme: H zerfalle in

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) = \underbrace{T(\mathbf{p}, t)}_{\text{kin. Energie}} + \underbrace{V(\mathbf{x}, t)}_{\text{Potential}}. \quad (6.5.5)$$

Weitere Vorgehensweise:

v Wende **Baker-Campell-Hausdorff-Formel**

$$e^{-i\epsilon(T+V)} = e^{-i\epsilon V} e^{-i\epsilon T} e^{-i\epsilon^2 X} \quad (6.5.6)$$

$$X = \frac{i}{2} [V, T] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (6.5.7)$$

zur Ordnung ϵ an,

$$\mathcal{U}(x_i t_i, x_{i-1} t_{i-1}) \cong \int dx \langle x_i | e^{-i\epsilon V} | x \rangle \langle x | e^{-i\epsilon T} | x_{i-1} \rangle \quad (6.5.8)$$

$$= \int dx \delta(x_i - x) e^{-i\epsilon V(x_i t_i)} \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_i (x - x_{i-1})} e^{-i\epsilon T(p_i t_i)} \quad (6.5.9)$$

$$= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{i \left[\frac{p_i}{\hbar} (x_i - x_{i-1}) - \epsilon (T(p_i t_i) + V(x_i t_i)) \right]} \quad (6.5.10)$$

worin $\hbar\epsilon = t_i - t_{i-1} = (t_b - t_a) / (n + 1)$ ist.

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) \cong \prod_{i=1}^n [dx_i] \prod_{i=1}^{n+1} \left[\frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right] e^{\frac{i}{\hbar} S^{(n)}} \tag{6.5.11}$$

$$S^{(n)} = \sum_{i=1}^{n+1} [p_i (x_i - x_{i-1}) - \hbar\epsilon H(p_i, x_i, t_i)] \tag{6.5.12}$$

Feynmans Pfadintegralformel

Bedingung: rechte Seite konvergiert für $n \rightarrow \infty$.

- Für $T = p^2/2m$ und $V \infty$ -oft differenzierbar, sind alle Terme in X Produkte von $p \propto \partial_x$ und somit nicht divergent. Damit verschwinden die X -Terme um ϵ schneller als ϵT und der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ ist wohldefiniert.
- Für $T = p^2/2m$ und $V(t) \equiv V$ kann man auch die

Trottersche Formel, $(t_b - t_a = (n + 1) \hbar\epsilon)$

$$e^{\frac{i}{\hbar}(T+V)(t_b-t_a)} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-i\epsilon V} e^{-i\epsilon T})^{n+1} \tag{6.5.13}$$

verwenden.

- Achtung: Für das Coulomb-Potential sind die obigen Annahmen nicht erfüllt!(Wasserstoff \rightarrow siehe Vorgehensweise nach Duru & Kleinert.)

Im **Kontinuums**limes $n \rightarrow \infty$ schreiben wir

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \int dx_i \prod_{j=1}^{n+1} \int dp_j \equiv \int_{(x_a t_a)}^{(x_b t_b)} \mathcal{D}' x \mathcal{D} p \tag{6.5.14}$$

(Strich an \mathcal{D}' : Über Punkte x_b, x_a wird nicht integriert!) und erhalten

$$S^{(n)} \rightarrow S[p, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt [p_t \dot{x}_t - H(p_t, x_t, t)]. \tag{6.5.15}$$

Dies entspricht der klassischen Wirkung.

Letzter Schritt:

Quadratische Ergänzung und Fresnel-Integral (Übung)

Mit dem Fresnel-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{iap^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{|a|}} e^{i\pi/4 \operatorname{sgn}(a)}, \tag{6.5.16}$$

$$S^{(n)} = \hbar \sum_{i=1}^{n+1} \left[-\frac{\epsilon}{2m} \left(p_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{\epsilon\hbar} m \right)^2 + \frac{m\epsilon}{2} \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\epsilon\hbar} \right)^2 - \epsilon V_i \right] \tag{6.5.17}$$

und

$$\int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{-i\frac{\epsilon}{2m}\left(p_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{\epsilon\hbar}m\right)^2} = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar^2\epsilon}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (6.5.18)$$

erhalten wir Feynmans ursprünglichen Ausdruck:

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) \cong \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar^2\epsilon}} \prod_{i=1}^n \left(\int \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi i\hbar^2\epsilon/m}} \right) e^{i\tilde{S}^{(n)}/\hbar} \quad (6.5.19)$$

mit

$$\tilde{S}^{(n)} = \hbar\epsilon \sum_{i=1}^{n+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\hbar\epsilon} \right)^2 - V(x_i t_i) \right], \quad (6.5.20)$$

bzw. im Kontinuumslimes:

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \int_{x_a}^{x_b} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x, \dot{x}]} \quad (6.5.21)$$

$$S[x, \dot{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(t) \quad (6.5.22)$$

$$L(t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) - V(x, t) \quad (6.5.23)$$

Pfadintegraldarstellung des Propagators

Bemerkung:

- $\mathcal{D}x$ ist hier anders als zuvor normiert. Letztendlich werden jedoch Normierungsfaktoren von Pfadintegralen in der Regel unendliche Konstanten sein, welche in physikalischen Ausdrücken herausfallen.
- Schematische Darstellung der Pfade:

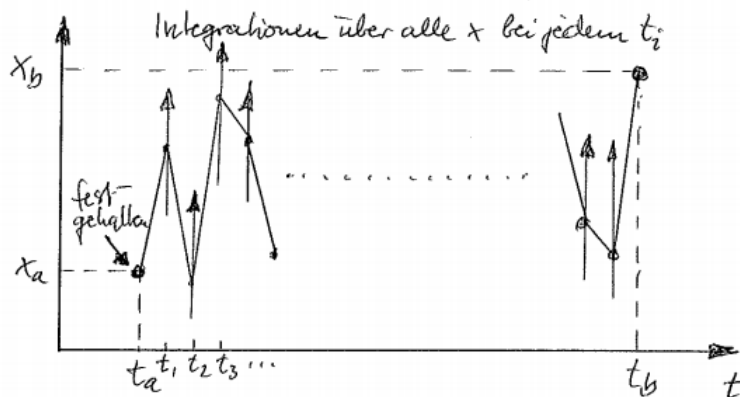


Abbildung 6.5: Feynman-Pfade

Zusatz zum Vorlesungsstoff

Bezug zur klassischen Mechanik: In der KM ergibt sich, für gegebene Randbedingungen, wie z.B. $x(t_a) = x_a, x(t_b) = x_b$, die klassische Raum-Zeit-Trajektorie aus dem Hamiltonschen Prinzip

$$\delta S = 0$$

angewandt auf die Wirkung

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt L \quad (6.5.24)$$

und somit aus den Euler-Lagrange-Gleichungen. Die Lösung entspricht einem Extremwert des Wirkungsintegrals S .

Das Feynmansche Pfadintegral superponiert (addiert) 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 entsprechenden unitären Zeitentwicklungsoperatoren gegenseitig wegheben).

Von all diesen Pfaden interferieren konstruktiv jedoch nur diejenigen, für die das Argument S/\hbar nicht wesentlich größer als S_{kl}/\hbar wird, wobei S_{kl} die klassische Wirkung am Extremum $\delta S_{kl} = 0$ ist.

Also: nur solche Pfade tragen bei, für die gilt

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = \frac{S - S_{kl}}{\hbar} \leq 2\pi. \quad (6.5.25)$$

Stärker abweichende Pfade entsprechen quantenmechanisch unterdrückten Fluktuationen, welche sich gegenseitig weg interferieren.

Merke: In der QM können jetzt nichtstetige Trajektorien, welche zwischen verschiedenen klassischen Trajektorien springen, erlaubt sein, da sie konstruktiv interferieren. Dies entspricht dem quantenmechanischen Tunneleffekt. Wir bemerken, dass \hbar als fundamentale Konstante auftritt, welche die Stärke der Phasenraum-Unschärfe quantifiziert.

Wir wollen obige Überlegungen noch mathematisch etwas genauer fassen in der

Sattelpunkts-Entwicklung des PI

Wir entwickeln hierzu das klassische Wirkungsintegral um die klassische Trajektorie

$$\delta S[x] \Big|_{x=\mathbf{x}} = 0. \quad (6.5.26)$$

= Funktional $\hat{=}$ Abb. vom Funktionenraum der $\mathbf{x}(t)$ in \mathbb{R}

Funktionale Taylorentwicklung:

$$S[x] = S[\mathbf{x}] + \int_{t_a}^{t_b} \frac{\delta S}{\delta x(t')} \Big|_{x=\mathbf{x}(t')} (x(t') - \mathbf{x}(t')) dt' \quad (6.5.27)$$

$$+ \frac{1}{2} \int dt' dt'' (x(t') - \mathbf{x}(t')) \frac{\delta^2 S}{\delta x_{t'} \delta x_{t''}} (x(t'') - \mathbf{x}(t'')) \quad (6.5.28)$$

$$+ \dots \quad (6.5.29)$$

Hier: Integral über Funktionalableitung entspricht Kontinuumsliches von

$$\int dt' \frac{\delta f}{\delta x(t')} \Big|_{\mathbf{x}} (x_{t'} - \mathbf{x}_{t'}) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\{ \sum_{i=0}^{n+1} \Delta t' \frac{\partial f}{\partial x_i} \Big|_{x_i=\mathbf{x}_i} (x_i - \mathbf{x}_i) \right\}, \quad (6.5.30)$$

wobei wie zuvor

$$x_i = x(t_i), \quad t_i = t_a + i\Delta t, \quad \Delta t = (t_b - t_a) / (n + 1) \quad (6.5.31)$$

gilt. Entsprechend ist die 2. Ordnung definiert.

Hamiltons Prinzip ergibt jetzt, dass der Term 1. Ordnung wegen $(\delta S/\delta x(t))_{x=\mathbf{x}} = 0$ verschwindet. Substituieren wir noch

$$\tilde{x}(t) = x(t) - \mathbf{x}(t), \quad (6.5.32)$$

so lässt sich das PI als

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}]} \int_{\tilde{x}_a=0}^{\tilde{x}_b=0} \mathcal{D}\tilde{x} e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt' dt'' \tilde{x}_{t'} \frac{\delta^2 S}{\delta x_t \delta x_{t'}} \tilde{x}_{t''}} \quad (6.5.33)$$

in Sattelpunktsnäherung schreiben. Die 2. Ableitung

$$S_{t',t}^{(2)} = \frac{\delta^2 S}{\delta x_{t'} \delta x_t} \quad (6.5.34)$$

ist eine ∞ -dimensionale Matrix in t, t' . Lässt sich diese diagonalisieren, so kann man das Integral als Gaussintegral ausführen.

Wir betrachten dazu wieder das in der Zeit diskretisierte PI und definieren die Matrix

$$S_{ij}^{(2)} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_{t_i} \partial x_{t_j}}, \quad (6.5.35)$$

welche wir, da im allgemeinen S hermitesch ist, durch eine unitäre Transformation diagonalisieren können,

$$\mathcal{U} : S^{(2)} \rightarrow \mathcal{U} S^{(2)} \mathcal{U}^\dagger = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_{n+1}) \quad (6.5.36)$$

worin die $\{\lambda_i\}$ die Eigenwerte der $(n+2)$ -dimensionalen Matrix $S^{(2)}$ sind. Weiterhin gilt $(\tilde{x}_{t_i} \equiv \tilde{x}_i)$

$$\tilde{x}_i S_{ij}^{(2)} \tilde{x}_j = \tilde{x}_i \mathcal{U}_{ik}^\dagger \mathcal{U}_{kl} S_{lm}^{(2)} \mathcal{U}_{mn}^\dagger \underbrace{\mathcal{U}_{n_j} \tilde{x}_j}_{\equiv \tilde{x}_n} \quad (6.5.37)$$

$$\equiv \tilde{x}_i (\delta_{ij} \lambda_j) \tilde{x}_j \quad (6.5.38)$$

$$= \tilde{x}_i \lambda_i \tilde{x}_i. \quad (6.5.39)$$

In das PI eingesetzt ergibt sich, da die Jacobi-Determinante der Transformation $\tilde{x}_i \rightarrow \tilde{\tilde{x}}_i$ gleich 1 ist,

$$\int \prod_{i=0}^{n+1} d\tilde{x}_i e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \tilde{x}_j S_{jk}^{(2)} \tilde{x}_k} = \int \prod_{i=0}^{n+1} d\tilde{\tilde{x}}_i e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_j \tilde{\tilde{x}}_j \lambda_j \tilde{\tilde{x}}_j} \quad (6.5.40)$$

$$= \prod_{i=0}^{n+1} \left\{ \int d\tilde{\tilde{x}}_i e^{\frac{i}{2\hbar} \tilde{\tilde{x}}_i \lambda_i \tilde{\tilde{x}}_i} \right\}. \quad (6.5.41)$$

Das Integral kann mit Hilfe der

Fresnelschen Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ia \frac{p^2}{2}} = \text{sgn}(a) \sqrt{\frac{2\pi}{|a|}} e^{i\frac{\pi}{4}} \quad (6.5.42)$$

ausgewertet werden und man erhält

$$(6.5.41) = \prod_j \left(\frac{2\pi\hbar}{|\lambda_j|} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{(2\pi\hbar)^{\frac{n+1}{2}}}{\left(\left| \prod_j \lambda_j \right| \right)^{\frac{1}{2}}} = \left[\det \left(\frac{S^{(2)}}{2\pi\hbar} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (6.5.43)$$

Wobei wir

$$\det S^{(2)} = \det \left(\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} S^{(2)} \right) = \det \left(\mathcal{U}^\dagger S^{(2)} \mathcal{U} \right) = \prod_j \lambda_j \quad (6.5.44)$$

verwendet haben. Aufgabe der Berechnung der quantenmechanischen Fluktuationen wird es dann im Allgemeinen sein, die Determinante des Propagators $S^{(2)}$ zu berechnen.

Beispiele:

Freies Teilchen:

$$S = \int dt \frac{1}{2} m \dot{x}_t^2 = -\frac{1}{2} \int dt x_t \ddot{x}_t m \quad (6.5.45)$$

$$\Rightarrow S_{tt'}^{(2)} = -m \partial_t^2 \delta(t - t') \quad (6.5.46)$$

Bemerkung:

Wir verwenden hier einfach die wichtigste Rechenregel für **funktionale Ableitungen**

Man betrachte eine Funktion

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : t \mapsto f(t), \quad (6.5.47)$$

sowie das **Funktional**

$$F : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{C} : f \in \mathcal{F} \mapsto F[f] \quad (6.5.48)$$

(Beispiel: $F[f] = \int_a^b dt f(t)$).

Dann ist die funktionale Ableitung von F bezüglich $f(t)$ definiert als

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(t)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(t') + \epsilon \delta(t - t')] - F[f(t')]}{\epsilon}. \quad (6.5.49)$$

Wir wählen den Spezialfall

$$F_t[f] = \int dt' f(t') \delta(t' - t) = f(t), \quad (6.5.50)$$

und erhalten aus der obigen Definition

$$\frac{\delta f(t)}{\delta f(t')} = \delta(t - t'). \quad (6.5.51)$$

Harmonischer Oszillator:

$$S[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt' \frac{m}{2} \left[\dot{x}^2(t') - w^2 x(t')^2 \right] \quad (6.5.52)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{m} \frac{\delta S}{\delta x_t} = \int dt' \left[\begin{array}{ccc} \dot{x}_{t'} & \underbrace{\frac{\delta \dot{x}_{t'}}{\delta x_t}}_{\partial_{t'} \delta(t-t') = -\partial_t \delta(t-t')} & -w^2 x_{t'} \delta(t-t') \end{array} \right] \quad (6.5.53)$$

$$= -(\ddot{x}_t + w^2 x_t) \quad (6.5.54)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{m} \frac{\delta^2 S}{\delta x_t \delta x_{t'}} = -(\partial_t^2 \delta(t-t') + w^2 \delta(t-t')) \quad (6.5.55)$$

$$= -(\partial_t^2 + w^2) \delta(t-t') \quad (6.5.56)$$

Es wird also darum gehen, diese Matrix zu diagonalisieren. Dies lässt sich z.B. für obige Fälle iterativ durch Diskretisierung der Zeit erreichen, mittels der Methode von Gelfand und Yalgon. Für das freie Teilchen erhält man (vgl. (6.5.19))

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar^2\epsilon}\right)^{n+1} \left(\det\left(\frac{S^{(2)}}{2\pi\hbar}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{2\pi i\hbar}{m}(t_b - t_a)\right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (6.5.57)$$

so dass sich insgesamt die Zeitentwicklungsmatrix

$$\mathcal{U}(x_b t_b, x_a t_a) = \left(\frac{2\pi i\hbar}{m}(t_b - t_a)\right)^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}} \quad (6.5.58)$$

ergibt. Dieser Ausdruck für den Propagator (vgl. Kapitel 2) lässt sich auch direkt mittels

$$\mathcal{U}_{ba} = \langle x_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | x_a \rangle \quad (6.5.59)$$

$$= \int dp \langle x_b | p \rangle \langle p | x_a \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)} \quad (6.5.60)$$

$$= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(x_b - x_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)} \quad (6.5.61)$$

$$\stackrel{\text{quadr. Erg.}}{=} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}} \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p'^2}{2m}(t_b - t_a)} \quad (6.5.62)$$

$$\stackrel{\text{Fresnel}}{=} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar}(t_b - t_a)\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)} \quad (6.5.63)$$

im Schrödingerbild berechnen.

Die Stärke des PI-Ansatzes wird sich erst für kompliziertere Potentiale und insbesondere für Eichtheorien ergeben. Strömungstheoretische Entwicklungen führen dann zu Feynmans diagrammatischer Methode, welche z.B. in der QED erfolgreich angewandt wurde.

Wirkungswellen

Dass die Wirkung S die Rolle eines Phasenwinkels mal \hbar erhält, ist eine wesentliche Taste der QM. Letztlich spiegelt sich darin wieder, dass Teilchen im Rahmen der QM auch als Wellen beschrieben werden 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

$$\frac{\partial S}{\partial t}(q_i, t) = -H\left(\frac{\delta S}{\delta q_i}(q_i, t), q_i, t\right). \quad (6.5.64)$$

Wir betrachten ein Teilchen, beschrieben durch die kanonischen Koordinaten (q_i, p_i) , welches sich in einem konservativen Kraftfeld bewegt, für welches gilt:

$$H = T + V = E = \text{const.} \quad (6.5.65)$$

Die Wirkung lässt sich dann schreiben als

$$S[q_i, t] = S_0[q_i] - Et. \quad (6.5.66)$$

Exkurs: Kleine Erinnerung an Hamilton-Jacobi:

Man betrachtet kanonische Transformationen der generalisierten Koordinaten \mathbf{q} und Impulse \mathbf{p} auf

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (6.5.67)$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen bleiben invariant,

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_k}, \quad \dot{P}_k = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_k} \quad (6.5.68)$$

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 $\mathbf{Q} = \text{konst.}$, $\mathbf{P} = \text{konst.}$ integrieren zu können.

Wir nehmen eine beliebige Funktion $F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$, die von \mathbf{q} , \mathbf{Q} und t abhängt und

$$\det \left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial Q_j} \right) \neq 0 \quad (6.5.69)$$

erfüllt, d.h., die Determinante der Krümmungsmatrix möge nicht verschwinden. Wir benutzen sie als Generator einer Transformation

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad (6.5.70)$$

welche sich als kanonisch erweist, da

$$dF_1 = \partial_t F_1 dt + \partial_{q_i} F_1 dq_i + \partial_{Q_i} F_1 dQ_i \quad (6.5.71)$$

$$= \partial_t F_1 dt + p_i dq_i - P_i dQ_i \quad (6.5.72)$$

$$= \partial_t F_1 dt + dS + H dt - P_i dQ_i, \quad (6.5.73)$$

$$\Rightarrow dS = P_i dQ_i - (H + \partial_t F_1) dt + dF_1. \quad (6.5.74)$$

Da sich dS und $d\tilde{S} = P_i dQ_i - \tilde{H} dt$ (überall Einstein- \sum -Konvention) nur um ein totales Differential dF und in $\tilde{H} = H + \partial_t F_1$ unterscheiden, sind die Bewegungsgleichungen unverändert. $\tilde{H} = 0$, wenn F_1 die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(\mathbf{q}, \partial_{\mathbf{q}} F_1, t) + \partial_t F_1 = 0 \quad (6.5.75)$$

erfüllt.

Alternativ können wir eine erzeugende Funktion $F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)$ wählen mit

$$p_i = \partial_{q_i} F_2, \quad Q_i = \partial_{P_i} F_2, \quad \left| \frac{\partial^2 F_2}{\partial q_i \partial p_j} \right| = 0, \quad (6.5.76)$$

so dass,

$$dS - dF_2 - d(Q_i P_i) = P_i dQ_i - (H + \partial_t F_2) dt \quad (6.5.77)$$

und

$$\tilde{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t) = H(\mathbf{q}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}), \mathbf{p}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}), t) + \partial_t F_2 \quad (6.5.78)$$

verschwindet, wenn F_2

$$H(\mathbf{q}, \partial_{\mathbf{q}} F_2, t) + \partial_t F_2 = 0 \quad (6.5.79)$$

erfüllt. Man findet

$$\frac{dF_2}{dt} = \partial_{\mathbf{q}} F_2 \dot{\mathbf{q}} + \partial_{\mathbf{P}} F_2 \dot{\mathbf{P}} + \partial_t F_2 \quad (6.5.80)$$

$$= p_i \dot{q}_i - H = L \quad \Rightarrow \quad F_2 = \int dt L = S. \quad (6.5.81)$$

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 (6.5.66) rechtfertigt, genauer:

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = W(\mathbf{q}, \mathbf{P}) - Et, \quad (6.5.82)$$

d.h. $H(\mathbf{q}, \delta W/\delta \mathbf{q}) = E$, mit der kanonischen 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 gennante **Wirkungswellen**. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist $\mathbf{u} \parallel \nabla_q S_0$ mit

$$u = |\mathbf{u}| = \frac{|E|}{|\nabla_q S_0|}, \quad (6.5.83)$$

da aus $dS = \nabla_q S_0 \cdot d\mathbf{q} - E dt = 0$ folgt, dass $E dt = (\nabla S_0 \cdot \mathbf{u}) dt$ und somit $\hat{\mathbf{u}}$ senkrecht zur Wellenfront ist. Weiterhin, da $\mathbf{p} = \partial F_2/\partial \mathbf{q} = \partial S/\partial \mathbf{q} = \nabla_q S_0$, folgt

$$u = \frac{|E|}{|\mathbf{p}|} = \frac{|E|}{|mv|}, \quad (6.5.84)$$

wobei wir ein einzelnes Teilchen mit Impuls \mathbf{p} und Geschwindigkeit \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

$$\frac{1}{2m} |\nabla_q S_0|^2 = E - V = \partial_t S - V, \quad (6.5.85)$$

und daraus

$$|\nabla_q S_0|^2 = |\nabla_q S_0|^2 = p^2 = \frac{|E|}{u^2} = \frac{1}{u^2} (\partial_t S)^2. \quad (6.5.86)$$

Diese Gleichung beschreibt eine Wellenausbreitung im Rahmen der klassischen Mechanik, der so genannten Wirkungswellen.

Eikonaltheorie der Optik

Lichtausbreitung beschreibt man durch

$$\nabla^2 \Phi = \frac{n^2}{c^2} \partial_t^2 \Phi. \quad (6.5.87)$$

Mit $\Phi = \text{skalares Potential}$, $n = \text{Brechungsindex}$, $u = c/n = \text{Lichtgeschwindigkeit im Medium}$. Lösung z.B. der ebenen Wellen

$$\Phi = \Phi_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - wt)} \quad (6.5.88)$$

mit $k = wn/c = 2\pi\nu/u = 2\pi/\lambda$, $w = 2\pi\nu$, $u = \nu\lambda$. Mit $\vec{k}_0 = k_0 e_z = \text{Wellenvektor im Vakuum}$ erhält man

$$\Phi = \Phi_0 e^{ik_0(nz - ct)}. \quad (6.5.89)$$

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

$$\Phi(\mathbf{r}) = e^{A(\mathbf{r}) + ik_0[L(\mathbf{r}) - ct]} \quad (6.5.90)$$

an mit $A = \ln(\Phi_0) = \text{const.}$ für $n = \text{const.}$

$L(\mathbf{r})$ heißt **Eikonal** (griech. $\epsilon\iota\kappa\tilde{\omega}\nu = \text{Bild, Abbild}$), welches in der geometrischen Optik die Strecke eines Lichtstrahls bezeichnet. Es gilt

$$\nabla^2 \Phi = \nabla \cdot ([\nabla \mathbf{A} + ik_0 \nabla L] \Phi) \quad (6.5.91)$$

$$= \Phi \left([\nabla(A + ik_0 L)]^2 + \nabla^2 [A + ik_0 L] \right) \quad (6.5.92)$$

$$= \Phi \left[(\nabla A)^2 - k_0^2 (\nabla L)^2 + 2ik_0 (\nabla A) (\nabla L) + \nabla^2 (A + ik_0 L) \right]. \quad (6.5.93)$$

Aus der Wellengleichung folgt dann:

$$(i) \quad \nabla^2 L + 2(\nabla A) (\nabla L) = 0 \quad (6.5.94)$$

$$(ii) \quad \nabla^2 A + (\nabla A)^2 + k_0^2 \left[n^2 - (\nabla L)^2 \right] = 0 \quad (6.5.95)$$

Für die geometrische Optik gelten die folgenden Näherungsannahmen:

- Aus der schwachen r -Abhängigkeit von A folgt, $\lambda_0 \ll A/|\nabla A|$
- Wegen $k_0^2 = (2\pi/\lambda_0)^2 \gg (\nabla A)^2/A^2$ dominiert dann der 3. Term in (6.5.95), was zur Eikonalgleichung der geometrischen Optik führt:

$$(\nabla L)^2 = n^2 = \frac{c^2}{u^2} \quad (6.5.96)$$

Die Lösungen definieren Flächen konstanter Phase, d.h. Wellenfronten ($L = \text{const.}$).

- Die Eikonalgleichung ist formal identisch mit der Wellengleichung in der klassischen Mechanik:

$$(\nabla L)^2 = \frac{c^2}{u^2} \leftrightarrow (\nabla W)^2 = \frac{E^2}{u^2} \quad (6.5.97)$$

Daraus folgt, dass die klassische Mechanik die selben Aussagen über S macht, wie die geometrische Optik über L .

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

$$k_0(L - ct) \sim S = W - Et \quad (6.5.98)$$

entsprechen. Daraus folgt:

$$E \sim ck_0 \sim \nu \quad (6.5.99)$$

Der Proportionalitätsfaktor muss die Einheit einer Wirkung haben. Er wird durch das Experiment festgelegt, das Ergebnis kennt man:

$$E = h\nu, \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Nms} \quad (6.5.100)$$

Weiter gilt: $u = \lambda\nu$.

$$\Rightarrow \quad \lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{E/p}{E/h} = \frac{h}{p}, \quad (6.5.101)$$

was wir als de Broglie Wellenlänge kennen. Aus der Wellengleichung folgt mit dem Ansatz $\psi \sim e^{-i\omega t}$ die t -unabhängige Wellengleichung

$$\nabla^2 \psi + \frac{\omega^2}{u^2} \psi = \nabla^2 \psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \psi \quad (6.5.102)$$

$$= \left[\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \right] \psi = 0 \quad (6.5.103)$$

und daraus

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = E\psi \quad (6.5.104)$$

mit dem Hamilton-Operator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$ aus der klassischen Hamiltonfunktion und der Zuordnung

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{r} \quad , \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (6.5.105)$$

Weiterhin ergibt $\psi \sim e^{-i\omega t}$

$$i\hbar \partial_t \psi = \hbar \omega \psi = \hbar \nu \psi = E\psi, \quad (6.5.106)$$

was die Identifikation $E \rightsquigarrow i\hbar \partial_t$ erlaubt und uns motiviert, die Schrödingergleichung für die Wellenmechanik aufzustellen:

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi \quad (6.5.107)$$

Umgekehrt geht man nun von der Schrödingergleichung aus und betrachtet die Eikonalnäherung im Rahmen der sogenannten

(wurde in der Vorlesung angesprochen)

6.6 Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Näherung

Wir setzen an:

$$\psi(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})| e^{iS(\mathbf{x})/\hbar} \quad (6.6.1)$$

Und finden aus der SGL entsprechend (6.5.94) und (6.5.95) die Gleichungen:

i

$$\nabla^2 S + 2(\nabla S)(\nabla \ln(|\psi|)) = 0 \quad (6.6.2)$$

ii

$$(\nabla S)^2 = 2m(E - V) + \frac{\hbar^2}{|\psi|} \nabla^2 |\psi| \quad (6.6.3)$$

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 mit

$$\frac{\nabla^2 |\psi|}{|\psi|} \ll \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \quad (6.6.4)$$

erhalten wir den geometrisch optimalen Limes, in dem der \hbar^2 -Term in (6.6.3) vernachlässigt werden kann. Dies wird auch als **WKB-Näherung** bezeichnet.

Wir betrachten den einfachen 1D Fall. Aus (6.6.2) folgt dann:

$$\partial_x \left(\frac{1}{2} \ln(\partial_x S) + \ln(|\psi|) \right) = 0, \quad (6.6.5)$$

d.h.

$$|\psi| = \frac{C}{\sqrt{\partial_x S}}, \quad (6.6.6)$$

In der WKB-Näherung folgt aus (6.6.3)

$$(\partial_x S)^2 = 2m(E - V(x)), \quad (6.6.7)$$

d.h.

$$S(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} \quad (6.6.8)$$

und

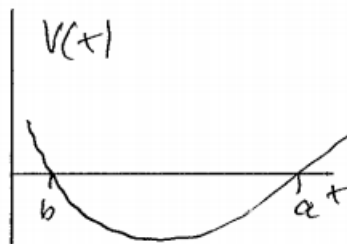
$$\psi(x) = \sum_{\pm} \frac{c_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x')} \quad (6.6.9)$$

mit

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (6.6.10)$$

dem lokalen Impuls des Teilchens.

Zusatz zur Vorlesung

*Bohr-Sommerfeld-Quantisierung*Zum Abschluss nutzen wir die WKB-Näherung um Bindungszustände im Potential $V(x)$ zu bestimmen.Abbildung 6.6: Potential $V(x)$

a und b seien klassische Umkehrpunkte für gegebene Energien.

Setze $V - E \rightarrow V$, $x - b \rightarrow x$ $\Rightarrow V$ in der Nähe von b:

$$V = V'x, \quad V' < 0 \quad (6.6.11)$$

Für die SGL bei b gilt dann:

$$\psi'' = -c^2 x \psi, \quad c = \frac{\sqrt{-2mV}}{\hbar} \quad (6.6.12)$$

Als Lösungen finden wir die so genannten Airy-Funktionen:

$$\psi_{\pm}(x) = \sqrt{x} J_{\pm 1/3} \left(\frac{2c}{3} x^{3/2} \right), \quad (6.6.13)$$

wobei die Bessel-Funktionen $J_n(z)$ die Lösungen der Besselschen DGL

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{n^2}{z^2} \right) \right] J_n(z) = 0 \quad (6.6.14)$$

sind. Am Umkehrpunkt erhalten wir die charakteristische Länge

$$l_0 = \left(\frac{3}{2c} \right)^{2/3} \cong \left(\frac{\hbar^2}{m|V'|} \right)^{1/3}. \quad (6.6.15)$$

Weit entfernt vom Umkehrpunkt gilt

$$\psi_1 \cong x^{-1/4} \cos \left(\frac{2c}{3} x^{3/2} \mp \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.6.16)$$

Für $x \rightarrow \infty$ ist

$$J_{\pm 1/3} \left(i|x|^{3/2} \dots \right) = Ae^{+f(x)} + Be^{-f(x)}, \quad f \geq 0. \quad (6.6.17)$$

Beide Lösungen ψ_{\pm} müssen also so kombiniert werden, dass ψ regulär bleibt. Da

$$\int^x \frac{dx' p(x')}{\hbar} = \frac{2}{3} cx^{3/2} \quad (6.6.18)$$

ist, kann man dann die Koeffizienten c_{\pm} bestimmen und erhält

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right) \quad (6.6.19)$$

und bei a

$$\psi(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' - \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right] \right). \quad (6.6.20)$$

Es muss nun gelten: (6.6.19) = 6.6.20, sowie $C' = \pm C$. Daraus folgt dann:

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx' p(x') = \frac{\pi}{2} + n\pi \quad (6.6.21)$$

bzw.

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx' p(x') = n + \frac{1}{2}. \quad (6.6.22)$$

Dies ist die **Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung**, welche für große n eine zutreffende Näherung darstellt. Die Bedingung für deren Gültigkeit lautet

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| \ll \frac{p^2}{\hbar} = 2\pi \frac{p}{\lambda}. \quad (6.6.23)$$