

QUANTENMECHANIK I

Wintersemester 2006/07

Matthias R. Gaberdiel

Institut für Theoretische Physik
ETH-Hönggerberg
CH-8093 Zürich

Email: gaberdiel@itp.phys.ethz.ch

Inhaltsverzeichnis

1	Historische Anfänge	5
1.1	Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)	5
1.2	Der Photoeffekt (1905) und Comptoneffekt (1923)	8
1.3	Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)	9
1.4	Bohr-Sommerfeld Quantisierung (1915)	11
1.5	Teilchen als Welle (de Broglie 1923)	13
2	Wellenmechanik	14
2.1	Die Schrödinger Gleichung	14
2.2	Wahrscheinlichkeitsstrom und die Kontinuitätsgleichung	16
2.3	Das Ehrenfest'sche Theorem	17
2.4	Realität der physikalischen Observablen	18
2.5	Zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung	19
2.6	Energie Eigenzustände	21
2.7	Energiemessung	22

3	Beispiele einfacher Systeme	26
3.1	Das Teilchen in der ‘Box’	26
3.2	Teilchen im Topf	29
3.3	Das Stufenpotential	32
3.4	Normierung und Wellenpakete	35
3.5	Das Delta-Funktionspotential	37
3.6	Resonanzen	38
4	Der Formalismus der Quantenmechanik	42
4.1	Der Hilbertraum	42
4.2	Der L^2 Raum	43
4.3	Separable Hilberträume	44
4.4	Operatoren und Observable	45
4.5	Messungen, Erwartungswerte und die Dirac Notation	47
4.6	Verallgemeinerung auf ∞ -dimensionale Hilberträume	49
4.7	Andere Darstellungen der Quantenmechanik	51
5	Die Heisenberg’sche Unschärferelation	53
5.1	Nicht-vertauschende Observable	53
5.2	Die Unschärfe einer Observablen	56
5.3	Die Heisenberg’sche Unschärferelation	58
6	Der harmonische Oszillator	61
6.1	Die Lösung	61
6.1.1	Die konventionelle Lösung	62
6.1.2	Die elegante Lösung	63
6.2	Klassischer Limes	66
7	Symmetrien in der Quantenmechanik	68
7.1	Unitäre Darstellungen	68
7.2	Die Drehgruppe $SO(3)$ und ihre Lie Algebra	69
7.3	Reduzible und irreduzible Darstellungen	71
7.4	Irreduzible Darstellungen von $so(3)$	72
7.5	$SO(3)$ vs. $SU(2)$	75
7.6	Projektive Darstellungen	78
7.7	Der Spin des Elektrons	79
7.8	Wigner’s Theorem	80
8	Das Wasserstoffatom	82
8.1	Relativkoordinaten	82
8.2	Coulomb-Potential	83
8.2.1	Das Verhalten bei $r = 0$	85
8.2.2	Das Verhalten bei $r \rightarrow \infty$	85
8.3	Dynamische Symmetrie	88

9	Drehimpulsaddition	91
9.1	Tensorprodukte	91
9.2	Addition von Drehimpulsen	92
9.3	Addition zweier $j = \frac{1}{2}$ Darstellungen	93
9.4	Die Clebsch-Gordon Reihe im allgemeinen Fall	96
9.5	Clebsch-Gordon Koeffizienten	97
9.5.1	Ein einfaches Beispiel	99
9.6	Physikalische Beispiele	100
9.6.1	Magnetisches Moment	100
9.7	Der anormale Zeeman Effekt	102
9.7.1	Spin-Bahn-Kopplung	103
10	Quantenmechanik und klassische Physik	106
10.1	Das EPR Paradox	106
10.2	Die Bell'sche Ungleichung	107
10.3	Quanten Teleportation	109
11	Störungstheorie	111
11.1	Nicht-entartete zeit-unabhängige Störungstheorie	111
11.1.1	Gestörter harmonischer Oszillator	114
11.2	Entartete zeit-unabhängige Störungstheorie	115
11.2.1	Aufhebung einer zwei-fachen Entartung zu erster Ordnung	115
11.2.2	Der allgemeine Fall	118
11.2.3	Aufhebung der Entartung zu zweiter Ordnung	119
11.2.4	Der Stark Effekt	120
11.3	Zeit-abhängige Störungstheorie	121
11.3.1	Der Propagator der Quantenmechanik	121
11.3.2	Das Heisenberg-Bild	124
11.3.3	Das Wechselwirkungsbild	125
11.3.4	Erste Ordnung Störungstheorie	126

Dieses Skript basiert zum Teil auf den Vorlesungsskripten von Gianni Blatter und Gian Michele Graf, denen ich für das Überlassen der L^AT_EX Quelltexte danke.

1 Historische Anfänge

Ende des 19. Jahrhunderts basierte das physikalische Weltbild auf dem, was wir heute die ‘klassische Physik’ nennen: die wesentlichen Grundpfeiler waren die klassische Mechanik (à la Newton), die Elektrodynamik (à la Maxwell) und die Thermodynamik (à la Boltzmann). Diese Vorstellung wurde zu Beginn des 20. Jahrhunderts durch eine Reihe von Experimenten in Frage gestellt, die wir im Folgenden kurz skizzieren wollen.

1.1 Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)

Nach klassischer Vorstellung ist ein Teilchen (z.B. ein Elektron oder ein Atom) durch Ort und Geschwindigkeit charakterisiert, deren Angabe beliebig genau sein kann; eine Welle hat eine bestimmte Frequenz und Wellenzahl, oder ist eine Superposition von solchen. Licht besteht aus elektromagnetischen Wellen und Materie aus Teilchen. Die beiden wechselwirken miteinander und gelangen, in einem verspiegelten Hohlraum eingeschlossen, zu einem thermischen Gleichgewicht, das Planck untersuchte.

Das zunächst freie elektromagnetische Feld genügt auf Grund der Maxwell-Gleichungen der Wellengleichung

$$\square \vec{E} = 0 \quad \text{mit} \quad \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (1.1.1)$$

und der Nebenbedingung

$$\text{div } \vec{E} = 0, \quad (1.1.2)$$

(analog für \vec{B}). Der Separationsansatz

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = f(t) \vec{E}(\vec{x})$$

führt auf

$$\frac{1}{c^2} \ddot{f}(t) \vec{E}(\vec{x}) = f(t) \Delta \vec{E}(\vec{x})$$

und weiter

$$\underbrace{\ddot{f} = -\omega^2 f}_{\text{harmonischer Oszillator}}, \quad \underbrace{-\Delta \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}}_{\text{Eigenwertgleichung für } -\Delta} \quad (1.1.3)$$

für eine Konstante $\omega^2 (\geq 0)$. Auf dem Rand des Hohlraums gelten die Randbedingungen

$$\vec{E}_{\parallel} = 0, \quad \frac{\partial \vec{E}_{\perp}}{\partial n} = 0.$$

Wählt man diesen Einfachheitshalber als den Würfel $0 \leq x_i \leq L$, ($i = 1, 2, 3$), so lauten die Eigenschwingungen

$$E_i(\vec{x}) = E_i \cos(k_i x_i) \sin(k_{i+1} x_{i+1}) \sin(k_{i+2} x_{i+2}) :$$

Die Randbedingungen ($E_i = 0$ für $x_j = 0, L$ ($j \neq i$); $\partial E_i / \partial x_i = 0$ für $x_i = 0, L$) sind erfüllt, falls

$$k_i = \frac{\pi}{L} n_i, \quad n_i \text{ ganz, } \geq 0, \text{ höchstens ein } n_i = 0. \quad (1.1.4)$$

Wegen der Nebenbedingung (1.1.2) muss weiterhin gelten $\vec{E} \cdot \vec{k} = 0$, wobei $\vec{E} = (E_1, E_2, E_3)$ und $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$. Zu jedem \vec{k} gibt es daher zwei linear unabhängige Eigenschwingungen mit Eigenfrequenzen $\omega = c \cdot |\vec{k}|$. Die Zahl der Eigenschwingungen $\leq \omega$ ist nach (1.1.4) asymptotisch

$$N(\omega) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \left(\frac{\omega L}{\pi c} \right)^3 = \frac{V}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{3}$$

für grosse ω , wobei $V = L^3$, bzw.

$$\frac{dN}{d\omega} = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (1.1.5)$$

[Der Faktor 2 beschreibt die beiden Lösungen und der Faktor $1/8$ tritt auf, da nur $n_i \geq 0$ beitragen. Schliesslich ist das Volumen der 3d Einheitskugel $4\pi r^3/3$, wobei der relevante Radius $r = \omega L / \pi c$ ist — es gilt $\vec{k}^2 = \omega^2 / c^2$ und $\vec{k} = \frac{\pi}{L} \vec{n}$.]

Planck stellte sich nun die Materie als aus Oszillatoren ('Resonatoren') aller Frequenzen ω_0 bestehend vor, welche die sonst unabhängigen elektromagnetischen Schwingungen ins Gleichgewicht bringen. Bei gegebener Temperatur T sind die Resonatoren termisch angeregt. In der Tat ist nach Boltzmann die Wahrscheinlichkeit $w(p, q)$, ein Hamiltonsches System mit Phasenkoordinaten p, q bei der Temperatur T in $dpdq$ zu finden gerade

$$w(p, q) dp dq = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z(\beta)} dp dq, \quad (1.1.6)$$

wobei H die Hamiltonfunktion ist, $\beta = (kT)^{-1}$ die inverse Temperatur, k die Boltzmann-Konstante und

$$Z(\beta) = \int dp dq e^{-\beta H(p, q)}. \quad (1.1.7)$$

Die mittlere Energie ist damit

$$\bar{E} = \int dp dq H(p, q) w(p, q) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta).$$

Für einen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator der Frequenz ω_0 ist,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 q^2,$$

und daher ist (1.1.7) ein Gaussches Integral,

$$Z(\beta) = \frac{\pi}{\beta \omega_0},$$

und damit

$$\bar{E} = \frac{\partial}{\partial \beta} \log \beta = kT ,$$

was unabhängig von ω_0 ist.

Umgekehrt stehen die Resonatoren im Gleichgewicht mit der elektromagnetischen Strahlung; dies bedeutet, dass auch das elektromagnetische Feld der Frequenz ω die Energie kT trägt. Wegen (1.1.5) folgt dann, dass die Energiedichte $u(\omega, T)$ des elektromagnetischen Feldes durch

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (1.1.8)$$

gegeben ist (Rayleigh-Jeans, 1900), so dass die Energie pro Volumeneinheit gerade

$$\int_0^\infty d\omega u(\omega, T) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT = \infty \quad (1.1.9)$$

ist. Das ist die sogenannte ‘Ultraviolett katastrophe’. Sie steht im Widerspruch zum experimentellen Verhalten

$$u(\omega, T) \propto \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad (1.1.10)$$

für grosse ω (Wien, 1896). Planck bemerkte, dass \hbar eine neue Naturkonstante sein musste.

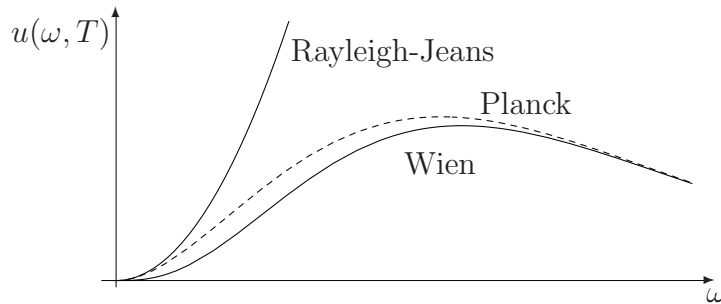


Abbildung 1: Energiedichte der Strahlung eines schwarzen Körpers.

Am 7. Oktober 1900 erfuhr Planck von Messungen, die eine Abweichung vom Wienschen Gesetz zeigten. Noch am selben Tag interpolierte er zwischen (1.1.8) und (1.1.10) gemäss

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} . \quad (1.1.11)$$

Aus dem Vergleich mit der neuen experimentellen Kurve fand er

$$\begin{aligned} \hbar &= 1,04 (1,05549) \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} , \\ k &= 1,34 (1,3807) \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \end{aligned}$$

(in Klammern die heutigen Werte). Die grossartigste Bestätigung fand das Plancksche Gesetz (1.1.11) in der gemessenen Spektralverteilung der kosmischen Hintergrundstrahlung bei $T = 2,73\text{K}$ (COBE 1992, WMAP 2003).

Nachträglich (14. Dez. 1900) begründet Planck (1.1.11) so:

“Wir betrachten aber – und dies ist der wesentlichste Punkt der ganzen Berechnung – E als zusammengesetzt aus einer ganz bestimmten Anzahl endlicher Teile und bedienen uns dazu der Naturconstanten $h = 6,55 \cdot 10^{-27}$ [erg· sec].”

[Hier ist $h = 2\pi\hbar$.]

Die Idee ist also, dass der Resonator nicht alle Energien E annehmen kann, sondern dass die möglichen Energien des Resonators quantisiert sind, nämlich als

$$E_n = n\hbar\omega_0, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.1.12)$$

Dies bedingt die Ersetzung von (1.1.6) und (1.1.7) durch

$$w_n = \frac{e^{-\beta n\hbar\omega_0}}{Z(\beta)}, \quad Z(\beta) = \sum_0^{\infty} e^{-\beta n\hbar\omega_0} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}$$

und damit

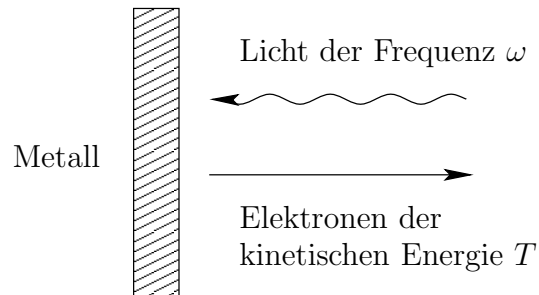
$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \log Z(\beta) = \frac{\hbar\omega_0}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1},$$

was auf (1.1.11) führt. In dieser Analyse sind die Feldoszillatoren noch nicht quantisiert — dies geschah erst später im Rahmen der Quantenfeldtheorie.

1.2 Der Photoeffekt (1905) und Comptoneffekt (1923)

Wird eine (metallische) Oberfläche durch Licht der (Kreis-)Frequenz ω bestrahlt, treten Elektronen aus — das ist der sogenannte photoelektrische Effekt, der von Hertz 1887 erstmals entdeckt wurde.

Lenard (1902) bemerkte, dass die Energie T der emittierten Elektronen (monoton wachsend) nur von der Frequenz abhängt, nicht aber von der Intensität der einfallenden Strahlung. Davon abhängig ist hingegen die Emissionsrate.

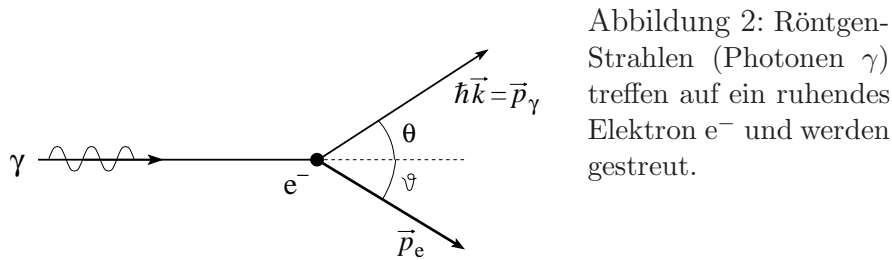


Dieses Verhalten widerspricht offenbar der klassischen Vorstellung! Einstein's Deutung (1905) dieses Effektes war, dass Licht quantisiert ist, und zwar gemäss $E = \hbar\omega$. Ein Lichtquant $\hbar\omega$ kann dann an ein einziges Elektron übergeben werden, das aus dem Metall mit der Energie

$$T = \hbar\omega - W \quad (1.2.1)$$

(W : Austrittsarbeit) entweicht. (Erst um 1915 waren die experimentellen Daten gut genug, um (1.2.1) zu bestätigen.)

Diese Deutung basiert darauf, dass das Licht (das ja durch elektromagnetische Wellen beschrieben wird) auch Teilchenaspekte besitzt, nämlich, dass es aus ‘Lichtquanten’ zusammengesetzt zu sein scheint, die eine bestimmte Energie tragen und mit einzelnen Elektronen wechselwirken. Dieser Teilchenaspekt des Lichtes wurde später eindrücklich durch den **Comptoneffekt** demonstriert, bei dem Lichtstrahlen an Elektronen gestreut werden:



Dieser Effekt kann dadurch richtig beschrieben werden, dass man den Streuprozess als Teilchen-Teilchen (Photon-Elektron) Streuung unter Energie- und Impulserhaltung interpretiert. (Da sich das Licht mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, muss man dazu natürlich die relativistische Energie- und Impulserhaltung benutzen — siehe Übungsaufgabe.) Dabei ist der Impuls p^μ eines Photons mit Wellenlänge λ gerade durch

$$p^\mu = (\hbar k, \hbar \vec{k}) , \quad k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.2.2)$$

gegeben, wobei \vec{k} der Wellenvektor ist, dessen Richtung die Ausbreitungsrichtung der Welle beschreibt und λ die Wellenlänge ist.

1.3 Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)

Atome weisen diskrete Lichtemissionsspektren auf. Für das Wasserstoff-Atom gilt die empirisch hergeleitete Formel

$$\omega_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) , \quad n, m = 1, 2, \dots , \quad n > m , \quad (1.3.1)$$

(Balmer 1885, aus den 4 Linien $m = 2$, $n = 3, 4, 5, 6$).

Bohr nimmt an (analog zur Planckschen Quantisierung des Resonators, aber gegen klassische Vorstellungen), dass das Atom nur in Zuständen mit diskreten Energien E_n existieren kann. Strahlung (nämlich ein Lichtquant) der Frequenz

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m)$$

wird emittiert beim Übergang $n \rightarrow m$, $E_m < E_n$. (Auch der Übergang $m \rightarrow n$ ist möglich unter Absorption eines Lichtquants gleicher Frequenz.) Mit diesem Ansatz wird

der spektroskopische Befund (1.3.1) als Energiebilanz erklärt. Für das H-Atom ergibt sich

$$E_n = -\text{Ry} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.3.2)$$

mit $\text{Ry} = R \cdot \hbar$.

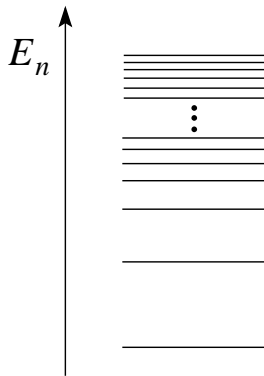


Abbildung 3: Diskretes Spektrum im Bohrschen Atommodell. Das Korrespondenzprinzip lässt sich auf hohe Anregungsenergien E_n mit $n \gg 1$, anwenden wo das Spektrum quasi-kontinuierlich ist.

Als Modell des Atoms verwendet Bohr das von Rutherford (1911): Ein Elektron (Masse m , Ladung $-e$) im Feld eines viel schwereren Kerns (Ladung e), den wir zunächst als fest annehmen. Längs klassischen Bahnen würde das Elektron strahlen und so dem Kern stets näher kommen. Bohr wählt die Quantenzustände unter den Kreisbahnen (Radius r , Winkelgeschwindigkeit ω , Drehimpuls L , Energie E). Für diese gilt

$$mr\omega^2 = \frac{e^2}{r^2}, \quad L = mr^2\omega, \quad E = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Daraus folgt

$$r = \frac{L^2}{me^2}, \quad E = -\frac{me^4}{2L^2}, \quad \omega = \frac{me^4}{L^3}.$$

Nach (1.3.2) muss $L \propto n$ sein. Bohr setzt als **Quantenbedingung**:

$$L_n = \hbar n, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.3.3)$$

und findet

$$\begin{aligned} r_n &= a_0 n^2, & a_0 &= \frac{\hbar^2}{me^2} && \text{(Bohr-Radius)}, \\ E_n &= -\text{Ry} \cdot \frac{1}{n^2}, & \text{Ry} &= \frac{me^4}{2\hbar^2} && \text{(Rydbergkonstante)}, \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

$$\omega_n = \frac{2\text{Ry}}{\hbar n^3} \quad (1.3.5)$$

mit den heutigen Werten

$$a_0 = 0,529177 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad \text{Ry} = 13,6058 \text{ eV}.$$

Berücksichtigt man die Mitbewegung des Kerns der Masse M , so ist m durch die reduzierte Masse zu ersetzen; ebenso seine Ladung e durch Ze bei wasserstoffähnlichen Ionen wie zum Beispiel He^+ ; also Ry in (1.3.4) durch

$$Z^2 \frac{M}{M+m} Ry .$$

Die Wahl von \hbar als Proportionalitätsfaktor in (1.3.3) ist zwingend, falls man die Gültigkeit der klassischen Strahlungstheorie für grosse n fordert: beim Übergang $n \rightarrow n-1$ soll dann Licht der klassischen Umlauffrequenz ω_n ausgestrahlt werden. In der Tat stimmt

$$\omega_{n,n-1} = \frac{Ry}{\hbar} \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx \frac{2Ry}{\hbar n^3}, \quad (n \rightarrow \infty)$$

mit (1.3.5) überein. Später (1923) erhebt Bohr dies zum **Korrespondenzprinzip**: Die Quantentheorie reproduziert die klassische Physik im Grenzfall grosser Quantenzahlen.

Grosse Erfolg der Bohrschen Theorie waren unter anderem, der richtige Wert von R , a_0 als richtige Grössenordnung der Atome, sowie die Erklärung des Verhältnisses $R_{\text{He}^+} : R_{\text{H}} = 4,0016$.

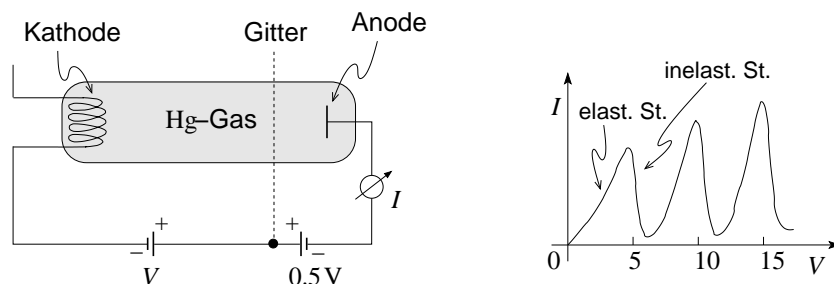


Abbildung 4: Durch ein elektrisches Potential beschleunigte Elektronen treffen auf Hg-Atome. Inelastische Stöße transferieren die Atome in hochenergetische Anregungszustände die unter Aussendung elektromagnetischer Strahlung zerfallen.

Die diskreten Energieniveaus in Atomen wurde auch durch das Franck-Hertz Experiment (1914) untermauert: Elektronen nehmen im Potential V kinetische Energie auf, die sie durch inelastische Stöße mit den Hg-Atomen an selbige abgeben. Die Atome werden dabei vom Grundzustand mit Energie E_0 in einen angeregten Zustand mit Energie E_n , $E_n - E_0 \approx 5 \text{ eV}$ gehoben. Die gestoppten Elektronen erreichen die Anode nicht mehr und es ergeben sich die Täler in $I(V)$; die Atome fallen unter Abgabe von Strahlung in den Grundzustand zurück.

1.4 Bohr-Sommerfeld Quantisierung (1915)

Das Korrespondenzprinzip und die Bohrsche Quantisierung führen auf ein Selektionskriterium für in der Quantenmechanik erlaubte klassische Bahnen: auszuwählen sind diejenigen

Bahnen, welche eine Quantisierungsbedingung erfüllen. Für den Fall von **gebundenen** Bahnen eines Hamiltonschen System mit **einem** Freiheitsgrad ist die Bedingung, dass die Wirkung

$$\oint pdq = 2\pi n\hbar = nh, \quad (n = (0), (\pm)1, (\pm)2, \dots), \quad (1.4.1)$$

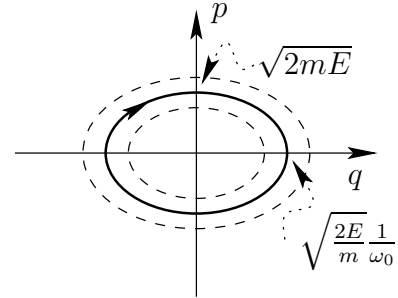
quantisiert ist, wobei das Integral sich über eine Bahnkurve erstreckt.

Zum Beispiel gilt für einen harmonischen Oszillator längs einer Bahn der Energie E

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 = E,$$

also

$$\oint pdq = \pi\sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m}}\omega_0^{-1} = \frac{2\pi E}{\omega_0}$$



und (1.4.1) liefert

$$E_n = n\hbar\omega_0,$$

was überraschend mit Plancks Postulat (1.1.12) übereinstimmt.

Die Bedingung (1.4.1) lässt sich auf **vollständig separable** Systeme (s. Allgemeine Mechanik) mit f Freiheitsgraden erweitern. Für diese Systeme hat die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H\left(q, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \equiv \alpha_1,$$

wobei $H(q, p)$ die Hamiltonfunktion in passenden Koordinaten ist, eine vollständige Lösung der Form

$$S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f) = \sum_{k=1}^f S_k(q_k, \alpha_1, \dots, \alpha_f).$$

Dabei sind $(\alpha_1, \dots, \alpha_f) = \alpha$ Erhaltungsgrößen. Im $2f$ -dimensionalen Phasenraum verläuft die Bewegung dann auf dem Schnitt von f durch α bestimmte Flächen

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha), \quad (k = 1, \dots, f). \quad (1.4.2)$$

Falls die f -dimensionalen Schnittflächen topologisch **Tori** sind, so ist die Sommerfeld-Bedingung anwendbar. Sie zeichnet als erlaubt diejenigen Tori (und nicht spezielle, darin verlaufende Bahnen) aus, für welche

$$W_k := \oint p_k dq_k = 2\pi n_k \hbar, \quad (n_k = 0, (\pm)1, \dots) \quad (1.4.3)$$

für alle $k = 1, \dots, f$, wobei p_k durch (1.4.2) gegeben ist. Dies bestimmt $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$ als Funktion der n_k und insbesondere die möglichen Energien $E_{n_1 \dots n_k}$.

Auf Systeme, die nicht separabel sind (und dies ist der generische Fall), kann man Sommerfelds Bedingung nicht anwenden. Sie ist daher nicht wirklich von fundamentaler Signifikanz.

1.5 Teilchen als Welle (de Broglie 1923)

Wie wir in Kapitel 1.1.2 gesehen haben, verhalten sich Lichtwellen manchmal so, als ob sie Teilchen wären. De Broglie hat vorgeschlagen, dass umgekehrt auch Teilchen Wellencharakter besitzen. Konkret postulierte er, dass die Relation (1.2.2) auch für Teilchen gilt, d.h. dass ein Teilchen mit Impuls p einer Welle mit Wellenlänge λ und Kreisfrequenz ω

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (1.5.1)$$

entspricht. [$E = cp^0$.]

Diese Hypothese ist überzeugend durch das **Davison-Germer Experiment (1927)** bestätigt worden. Dabei betrachtet man ein Streuexperiment an einem Festkörper (à la von Laue), aber benützt einen Elektronenstrahl statt einer Lichtwelle. Die Reflexion von Elektronen von einer Kristalloberfläche ergibt ‘von Laue’ Reflexe

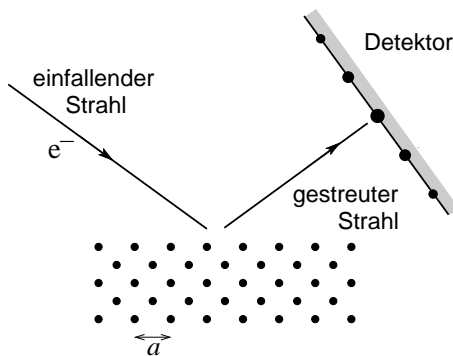


Abbildung 5: Streuung von Elektronen an einer Kristalloberfläche.

Die Struktur des von Laue Interferenzbildes bestätigt die Gültigkeit der de Broglie Relation.

2 Wellenmechanik

Ausgehend von dem Postulat von de Broglie wollen wir jetzt (heuristisch) die Schrödinger Gleichung ableiten.

2.1 Die Schrödinger Gleichung

Nach de Broglie ist einem Teilchen mit Impuls $p^\mu = (E, \vec{p})$ eine Welle zugeordnet, deren Wellenlänge λ und Kreisfrequenz ω durch (1.5.1) gegeben sind

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (2.1.1)$$

Eine Welle mit diesen Parametern ist die Funktion

$$\Psi(x, t) = \Psi(0, 0)e^{\frac{2\pi i x}{\lambda} - i\omega t}, \quad (2.1.2)$$

wobei $\Psi(0, 0)$ eine Konstante ist, die die Amplitude der Welle bestimmt. Diese Welle ist durch die Gleichungen charakterisiert

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x, t) = \frac{2\pi i}{\lambda}\Psi(x, t) = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x, t) \quad (2.1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = -i\omega\Psi(x, t) = -i\frac{E}{\hbar}\Psi(x, t). \quad (2.1.4)$$

Im nicht-relativistischen Grenzfall (den wir im folgenden behandeln wollen — die quantenmechanische Beschreibung der relativistischen Physik führt zur Quantenfeldtheorie) ist die Energie E eines freien Teilchens mit Impuls p durch

$$E = \frac{1}{2m}p^2 \quad (2.1.5)$$

gegeben. Daher erhalten wir die Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x, t). \quad (2.1.6)$$

Falls das Teilchen nicht frei ist, sondern sich im Einfluss des Potentials $V(x)$ bewegt, hat die rechte Seite von (2.1.5) zusätzlich den Term $V(x)$; dann erhalten wir

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\Psi(x, t). \quad (2.1.7)$$

Diese Gleichung ist die **(zeit-abhängige) Schrödinger-Gleichung**.

Die Funktion $\Psi(x, t)$ in (2.1.7) ist eine *komplexe* Funktion von (x, t) . Falls Ψ eine Lichtwelle beschreiben würde, dann ist die Intensität des Lichtes bei (x, t) gerade $|\Psi(x, t)|^2$.

Im gegenwärtigen Kontext interpretieren wir daher (Born 1926) $|\Psi(x, t)|^2$ als die *Wahrscheinlichkeit* mit der das Teilchen sich zur Zeit t am Punkt x befindet. Damit diese Interpretation Sinn macht muss $\Psi(x, t)$ so normalisiert sein, dass

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad \text{für alle } t. \quad (2.1.8)$$

Damit haben wir bereits die wichtigsten Postulate der Wellenmechanik zusammengetragen; zur Übersicht stellen wir sie noch einmal zusammen:

- (i) Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t am Ort x anzutreffen, ist durch das Normquadrat $|\Psi(x, t)|^2$ der Wellenfunktion gegeben.
- (ii) Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist für jedes t quadrat-integrierbar in x ; insbesondere ist sie wie in (2.1.8) normalisiert.
- (iii) Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist eine komplexe Funktion, die der zeit-abhängigen Schrödinger Gleichung genügt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t). \quad (2.1.9)$$

Hierbei ist H der Hamiltonoperator, der durch

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (2.1.10)$$

definiert ist. Auch in der Quantenmechanik ist also die Hamiltonfunktion (bzw. der Hamiltonoperator) die Erzeugende der Zeitentwicklung.

Wir sollten betonen, dass die obige Diskussion diese Postulate nicht ableitet, genauso wenig wie man beispielsweise Newton's Kraftgesetz 'ableiten' kann. Wir haben lediglich versucht, sie zu motivieren. Wir wollen sie jetzt als die Regeln, die Quantenmechanik definieren, akzeptieren, und studieren, welche Konsequenzen sie haben.

In der Definition des Hamiltonoperators (2.1.10) begegnen wir zum ersten Mal einer speziellen Eigenschaft der Quantenmechanik: klassische Observable (zum Beispiel die Energie, d.h. die Hamiltonfunktion) werden in der Quantenmechanik durch Operatoren (in diesem Fall den Hamiltonoperator H) dargestellt. Diese Operatoren wirken auf dem Raum der Wellenfunktionen. Der Umstand, dass diese Operatoren im allgemeinen nicht vertauschen, ist der entscheidende Grund für viele 'Quanteneffekte' der Quantenmechanik, insbesondere für die Heisenberg'sche Unschärferelation (die wir ein wenig später ableiten werden).

Ein anderes Beispiel für diese Operatorbeschreibung von Observablen ist (2.1.3): auf Wellenfunktionen ist die Impulsobservable p durch den Differentialoperator

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.1.11)$$

dargestellt.

Die obigen Postulate sind spezifisch für die Situation, wo wir ein Teilchen im Raum analysieren wollen. Wir werden die Postulate später in eine abstraktere Form bringen. Wir sollten auch noch darauf hinweisen, dass es noch ein weiteres Postulat gibt, das erklärt, was genau bei einer Messung geschieht. Wir werden natürlich auch auf diesen Punkt später zurückkommen. Für den Moment wollen wir jedoch zunächst ein paar Konsequenzen dieser Postulate studieren.

2.2 Wahrscheinlichkeitsstrom und die Kontinuitätsgleichung

Wie wir oben postuliert haben hat $|\Psi(x, t)|^2$ die Interpretation einer Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x, t) \equiv |\Psi(x, t)|^2. \quad (2.2.1)$$

Die Schrödinger Gleichung (und ihre komplex konjugierte) bestimmen die Zeitenwicklung dieser Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{d}{dt}\rho(x, t) = \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) + \Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)^* \quad (2.2.2)$$

$$= i \frac{\hbar}{2m} \left(\Psi(x, t)^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) - \Psi(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)^* \right) - \frac{i}{\hbar} \left(\Psi(x, t)^* V(x) \Psi(x, t) - \Psi(x, t) V(x) \Psi(x, t)^* \right), \quad (2.2.3)$$

wobei wir benutzt haben, dass x und $V(x)$ reel sind. Die zweite Zeile verschwindet, und der Rest kann als

$$\frac{d}{dt}\rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (2.2.4)$$

geschrieben werden, wobei $j(x, t)$ der *Wahrscheinlichkeitsstrom* ist,

$$j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* - \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right). \quad (2.2.5)$$

Die Gleichung (2.2.4) hat die Interpretation einer Kontinuitätsgleichung. Um das genauer zu verstehen, integrieren wir die Wahrscheinlichkeitsdichte über ein kleines Intervall

$$P(x_0; \delta) = \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} dx \rho(x, t). \quad (2.2.6)$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(x_0; \delta) &= - \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) \\ &= j(x_0 - \delta, t) - j(x_0 + \delta, t). \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Die Änderung in der Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in dem Intervall zu finden, wird also dadurch beschrieben, wieviel ‘Wahrscheinlichkeit’ aus dem Intervall geflossen oder in das

Intervall geflossen ist. d.h. durch die Werte des Wahrscheinlichkeitsstroms an den Intervallgrenzen. Die Wahrscheinlichkeit verhält sich also wie eine inkompressible Flüssigkeit: sie kann weder vernichtet noch erzeugt werden; sie kann sich in einem Intervall nur dadurch ändern, dass sie aus dem Intervall ausfließt oder in es hineinfließt.

2.3 Das Ehrenfest'sche Theorem

Um Kontakt zur klassischen Mechanik herzustellen betrachten wir nun *Erwartungswerte*. Wie oben besprochen ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit t am Ort x zu treffen $|\Psi(x, t)|^2$. Der Erwartungswert einer Ortsmessung ist also

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x |\Psi(x, t)|^2. \quad (2.3.1)$$

Wie schon im vorigen Kapitel bestimmt die Schrödinger Gleichung die Zeitentwicklung dieses Erwartungswertes. In der Tat berechnen wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx x \frac{\partial}{\partial t} (\Psi(x, t) \Psi(x, t)^*) \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx x \left[\left(i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) \right) \Psi(x, t)^* \right. \\ &\quad \left. + \Psi(x, t) \left(-i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)^* + \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi(x, t)^* \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Die Terme, die das Potential involvieren, kürzen sich gegenseitig. Im ersten Term integrieren wir nun partiell und erhalten

$$\begin{aligned} i \frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx x \Psi(x, t)^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= i \frac{\hbar}{2m} \left[x \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right]_{x=-\infty}^{x=\infty} \\ &\quad - i \frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \left(\Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right). \end{aligned}$$

Da Ψ quadrat-integrabel ist, d.h. da es (2.1.8) erfüllt, muss der Randterm verschwinden. [Dieses Argument ist ein klein wenig schlampig!] Nun erinnern wir uns, dass der Impulsoperator durch (2.1.11) definiert ist. Der erste Term in der zweiten Zeile ist also

$$-i \frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \left(\Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right) = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t)^* p \Psi(x, t) = \frac{1}{2m} \langle p \rangle. \quad (2.3.3)$$

In Analogie zu (2.3.1) interpretieren wir dies als $\frac{1}{2m}$ Mal den Erwartungswert des Impulses p . Den zweiten Term in der zweiten Zeile integrieren wir wiederum partiell

$$\begin{aligned} -i \frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left[x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) \right]_{x=-\infty}^{x=\infty} \\ &\quad + i \frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \left(\Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* + x \Psi(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)^* \right). \end{aligned}$$

Der Randterm verschwindet wiederum, und der letzte Term kürzt genau den ersten Term in der zweiten Zeile von (2.3.2). Den vorletzten Term integrieren wir nochmals partiell und erhalten

$$i\frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* = i\frac{\hbar}{2m} [\Psi(x, t) \Psi(x, t)^*]_{x=-\infty}^{x=\infty} - i\frac{\hbar}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \quad (2.3.4)$$

$$= \frac{1}{2m} \langle p \rangle, \quad (2.3.5)$$

wobei wir wiederum den Randterm weggelassen haben [dieses Mal ist das wirklich korrekt!] sowie (2.3.3) benützt haben. Insgesamt erhalten wir also

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle. \quad (2.3.6)$$

Das ist die bekannte (nicht-relativistische) Relation zwischen Geschwindigkeit und Impuls. Mit Hilfe einer ähnlichen Rechnung (Übungsaufgabe) können wir auch zeigen, dass

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\frac{1}{m} \langle V'(x) \rangle \equiv -\frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t)^* V'(x) \Psi(x, t), \quad (2.3.7)$$

wobei $V'(x)$ die Ortsableitung des Potentials $V(x)$ ist. Der Ortserwartungswert $\langle x \rangle$ genügt also der Newton'schen Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\langle V'(x) \rangle.$$

Dieses Resultat wird *Ehrenfest'sches Theorem* genannt. Es stellt eine Beziehung zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik her: die Erwartungswerte der Quantenmechanik erfüllen die klassischen Bewegungsgleichungen.

2.4 Realität der physikalischen Observablen

Oben haben wir den Erwartungswert des Impulsoperators p durch

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \quad (2.4.1)$$

definiert. Der Erwartungswert ist das mittlere Ergebnis einer Impulsmessung. Damit das eine vernünftige physikalische Interpretation hat, müssen wir verlangen, dass (2.4.1) eine reelle Zahl ist, d.h. dass

$$\langle p \rangle^* = \langle p \rangle. \quad (2.4.2)$$

Wir wollen nun zeigen, dass dies automatisch der Fall ist. (Im wesentlichen ist das dieselbe Rechnung, die wir oben schon durchgeführt haben.)

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle^* &= i\hbar \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* \\
 &= i\hbar [\Psi(x, t) \Psi(x, t)^*]_{x=-\infty}^{x=\infty} - i\hbar \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \\
 &= \langle p \rangle,
 \end{aligned} \tag{2.4.3}$$

wobei wir benützt haben, dass die Integrabilität von $\Psi(x, t)$ impliziert, dass der Randterm verschwindet. Man kann entsprechend nachprüfen, dass der Erwartungswert der Energie

$$\langle H \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \Psi^*(x, t) H \Psi(x, t), \tag{2.4.4}$$

wobei H der Hamilton Operator (2.1.10) ist, auch reell ist (Übungsaufgabe),

$$\langle H \rangle^* = \langle H \rangle. \tag{2.4.5}$$

2.5 Zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung

Wir haben bisher immer angenommen, dass das Potential $V(x)$ tatsächlich nicht von der Zeit t explizit abhängt. Falls das der Fall ist, können wir die x und t Variablen separieren; dazu machen wir den Ansatz

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\chi(t). \tag{2.5.1}$$

Die Schrödinger Gleichung impliziert nun, dass

$$\psi(x) i\hbar \dot{\chi}(t) = \chi(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) \right), \tag{2.5.2}$$

wobei $\dot{\chi}(t) = \frac{d}{dt}\chi(t)$ und $\psi'(x) = \frac{d}{dx}\psi(x)$. Zumindest formal können wir jetzt (2.5.2) durch $\psi(x)\chi(t)$ teilen, und erhalten damit

$$i\hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{1}{\psi(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) \right). \tag{2.5.3}$$

Wir beobachten, dass die linke Seite nicht von x abhängt, wohingegen die rechte Seite nicht von t abhängt. Damit die beiden Ausdrücke gleich sein können, müssen sie beide gleich der selben Konstanten sein, die wir mit E bezeichnen. Wir haben damit die zeit-abhängige Schrödingergleichung in zwei separate Gleichungen zerlegt,

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{\chi}(t) &= E\chi(t) \\
 H\psi(x) &= E\psi(x),
 \end{aligned} \tag{2.5.4}$$

wobei H der Hamiltonoperator (2.1.10) ist. Wir können die erste Gleichung leicht lösen

$$\chi(t) = \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right). \quad (2.5.5)$$

Falls also $\psi(x)$ die Eigenwert Gleichung (2.5.4) mit Eigenwert E erfüllt, dann löst

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) \quad (2.5.6)$$

die (zeit-abhängige) Schrödinger Gleichung. Die Eigenvektor Gleichung

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{mit} \quad H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right), \quad (2.5.7)$$

wird als *zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung* bezeichnet. Da $|\Psi(x, t)| = |\psi(x)|$, ist die Wellenfunktion korrekt normalisiert (d.h. erfüllt (2.1.8)), falls $\psi(x)$ die Normalisierungsbedingung as

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad (2.5.8)$$

erfüllt. Offenbar ist die Normalisierungsbedingung (2.1.8) dann für alle Zeiten erfüllt.

Die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung ist eng mit der zeit-unabhängigen Hamilton-Jakobi Gleichung verwandt, die letztes Jahr in der Mechanik diskutiert wurde. (In der Tat fand mit solchen Argumenten Schrödinger ursprünglich die nach ihm benannte Gleichung!) Um das genauer zu verstehen machen wir den Ansatz (in 3 Dimensionen)

$$\Psi(\vec{x}, t) = A(\vec{x}) e^{i\frac{S(\vec{x})}{\hbar}} e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad \psi(\vec{x}) = A(\vec{x}) e^{i\frac{S(\vec{x})}{\hbar}}, \quad (2.5.9)$$

wobei sowohl $A(\vec{x})$ als auch $S(\vec{x})$ reelle Funktionen sind. Dann ist die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung für $\psi(\vec{x})$ (wir nehmen an, wie beschreiben ein Teilchen mit Potential $V(\vec{x})$)

$$\begin{aligned} \frac{(\nabla S)^2}{2m} + (V(\vec{x}) - E) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \\ \nabla A \cdot \nabla S + \frac{A}{2} \Delta S &= 0, \end{aligned}$$

wobei die erste (zweite) Gleichung gerade den Realteil (Imaginärteil) der zeit-unabhängigen Schrödinger Gleichung beschreiben. Im klassischen Limes, d.h. für $\hbar \rightarrow 0$, wird die erste Gleichung dann

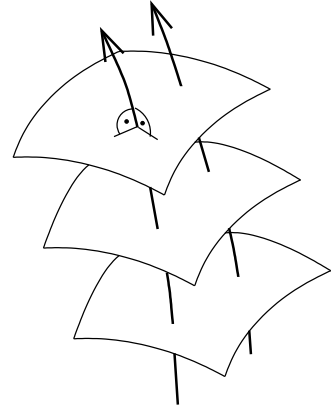
$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{x}) = H(\vec{x}, \nabla S) = E. \quad (2.5.10)$$

Das ist gerade die zeit-unabhängige Hamilton-Jakobi Gleichung. Die Phase der Welle Ψ kann also mit der (dimensionslosen) Grösse S/\hbar identifiziert werden, wobei S die erzeugende Funktion der kanonischen Transformation ist, die in der Hamilton-Jakobi Theorie auftritt.

Andererseits erinnern wir uns aus der Mechanik Vorlesung daran, dass eine Lösung $S(\vec{x})$ der Hamilton-Jakobi Gleichung (2.5.10) die physikalische Bahn gerade vermöge

$$\vec{p} = m\dot{\vec{x}} = \nabla S . \quad (2.5.11)$$

beschreibt. Die physikalische Bahn ist also immer senkrecht zu der Fläche $S = \text{const.}$ Diese Flächen sind jedoch gerade die Wellenfronten der Welle Ψ , da S die Phase der Welle ist. In dieser Weise ist also die quantenmechanische Welle direkt mit der klassischen Bahn verbunden.



2.6 Energie Eigenzustände

Wir bezeichnen mit ψ_n , $n \in \mathbb{N}$ einen vollständigen Satz normalisierter Eigenfunktionen des Hamiltonoperators mit Eigenwerten

$$H\psi_n = E_n\psi_n . \quad (2.6.1)$$

In vielen Fällen ist der Satz der Eigenfunktionen abzählbar, d.h. wir können annehmen, dass sich die Eigenfunktionen durch eine positive ganze Zahl bezeichnen lassen. Weiterhin wollen wir annehmen, dass jede quadrat-integrierbare Funktion sich als Linearkombination dieser ψ_n schreiben lässt. (Wir werden auf diese Annahmen später zurückkommen, wenn wir die Quantenmechanik ein wenig formaler beschreiben werden.)

Angenommen wir kennen die Wellenfunktion zur Zeit $t = 0$, $\Psi(x, 0)$. Wir wollen die Lösung für alle $t \geq 0$ bestimmen. Nach Annahme können wir die Funktion $\Psi(x, 0)$ durch die ψ_n ausdrücken

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) ,$$

wobei die a_n im allgemeinen komplexe Koeffizienten sind. Es folgt dann aus (2.6.1), dass

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \quad (2.6.2)$$

für alle t . Nach Konstruktion stimmt (2.6.2) mit der gegebenen Funktion $\Psi(x, 0)$ für $t = 0$ überein; $\Psi(x, t)$ ist ausserdem eine Lösung der zeit-abhängigen Schrödinger Gleichung da jeder einzelne Term eine Lösung ist, und da die Differentialgleichung linear ist. Der Umstand, dass die Summe zweier Lösungen wieder eine Lösung definiert, nennt man manchmal das *Superpositionsprinzip*; wir werden es immer wieder benützen.

Wir haben hier also das Problem, die allgemeine Lösung der Schrödinger Gleichung (zu vorgegebenen Anfangsbedingungen) zu finden, darauf zurückgeführt, den vollständigen Satz der normierbaren Lösungen von (2.5.7) zu finden. Wir sollten schon an dieser Stelle darauf hinweisen, dass die Bedingung, dass ψ_n quadrat-integrierbar ist, im wesentlichen für die Quantisierung der Eigenwerte verantwortlich sein wird.

2.7 Energiemessung

Wir wollen nun annehmen, dass wir einen vollständigen Satz normalisierter Eigenfunktionen des Hamilton-Operators ψ_n , $n \in \mathbb{N}$ gefunden haben, wobei die zugehörigen Eigenwerte $H\psi_n = E_n\psi_n$ sind. Der Einfachheit halber wollen wir weiterhin annehmen, dass alle Eigenwerte distinkt sind, d.h. dass $E_n \neq E_m$ für $n \neq m$. Wir wollen zeigen, dass dies impliziert, dass die normalisierten Eigenfunktionen tatsächlich ‘orthonormal’ sind, d.h. dass

$$\int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & \text{falls } m = n \\ 0 & \text{falls } m \neq n. \end{cases} \quad (2.7.1)$$

Dazu beobachten wir, dass

$$\begin{aligned} E_m \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) &= \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) H \psi_m(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m''(x) + \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) V(x) \psi_m(x), \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

wobei wir benützt haben, dass ψ_m eine Eigenfunktion mit Eigenwert E_m ist. Den zweiten Term können wir als

$$\int_{\mathbb{R}} dx (V(x)\psi_n(x))^* \psi_m(x) \quad (2.7.3)$$

umschreiben, und den ersten Term integrieren wir partiell,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m''(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi_n^*(x) \psi_m'(x)]_{x=-\infty}^{x=\infty} + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n'^*(x) \psi_m'(x) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} [\psi_n'^*(x) \psi_m(x)]_{x=-\infty}^{x=\infty} - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n''^*(x) \psi_m(x), \end{aligned}$$

wobei wir wiederum die Randterme weggelassen haben (da ψ_n quadrat-integrabel ist). Zusammen erhalten wir also

$$\begin{aligned} E_m \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) &= \int_{\mathbb{R}} dx (H \psi_n)^* \psi_m(x) \\ &= E_n^* \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x), \end{aligned} \quad (2.7.4)$$

wobei wir nun benützt haben, dass ψ_n auch eine Eigenfunktion mit Eigenwert E_n ist.

Zunächst betrachten wir den Fall $m = n$. Durch Vergleich der beiden Seiten von (2.7.4) zusammen mit der Normierung von ψ_n folgt dann, dass

$$E_n = E_n^*. \quad (2.7.5)$$

Dies zeigt, dass alle Eigenwerte E_m des Hamilton-Operators reell sind. (Wie wir gleich sehen werden, impliziert das insbesondere auch, dass der Erwartungswert reell ist.)

Da die Eigenwerte reell sind, können wir nun die beiden Seiten von (2.7.4) voneinander abziehen, und erhalten

$$(E_m - E_n) \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = 0. \quad (2.7.6)$$

Nach Annahme ist $E_m \neq E_n$ (falls $m \neq n$), und daher muss das Integral verschwinden; das beweist dann (2.7.1).

Wie wir gerade gezeigt haben, können wir die allgemeinste Lösung der Schrödinger Gleichung immer in der Form (2.6.2) schreiben. Wir wollen nun den Erwartungswert der Energie für diese Wellenfunktion berechnen. Wegen (2.4.4) müssen wir berechnen

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \Psi(x, t)^* H \Psi(x, t) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_m^* a_n \exp\left(-\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}\right) \int_{\mathbb{R}} dx \psi_m(x)^* H \psi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n, \end{aligned} \quad (2.7.7)$$

wobei wir benützt haben, dass ψ_n eine Eigenfunktion von H mit Eigenwert E_n ist, sowie die Orthonormalität (2.7.1). Wir bemerken, dass dieser Erwartungswert reell (da die E_n reell sind) sowie konstant ist, d.h. unabhängig von der Zeit t .

Die Formel (2.7.7) hat nun die folgende Interpretation: die möglichen Messergebnisse einer Energiemessung sind die Eigenwerte E_n , und die Wahrscheinlichkeit, mit der der Wert E_n gemessen wird, ist gerade gleich $|a_n|^2$. Mit diesen Annahmen ist dann gerade (2.7.7) der Erwartungswert der Energie. Diese Annahmen (oder Postulate) sind weitere zentrale Annahmen der Wellenmechanik:

- (iv) Die möglichen Messergebnisse einer Energiemessung eines Systems sind die Eigenwerte des Hamilton-Operators H .
- (v) Falls die Eigenwerte alle voneinander verschieden sind, so ist die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert E_n (der zu der Eigenfunktion $H\psi_n = E_n\psi_n$ gehört) zu messen, gerade

$$\left| \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \Psi(x, t) \right|^2. \quad (2.7.8)$$

In (2.7.8) haben wir benützt, dass

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \Psi(x, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} a_m \exp\left(-\frac{iE_m t}{\hbar}\right) \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \psi_m(x) \\ &= a_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (2.7.9)$$

zusammen mit dem Umstand, dass das Exponential eine reine Phase ist (da E_n reell ist). Falls die Eigenwerte nicht alle voneinander verschieden sind, gilt eine ähnliche Formel, die wir im Rahmen der formaleren Diskussion der Quantenmechanik besprechen werden. Damit die obige Interpretation Sinn macht, muss gelten

$$\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \quad (2.7.10)$$

Man kann leicht zeigen (Übungsaufgabe), dass dies aus der Normierung der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ folgt.

Diese Axiome beschreiben schon die wichtigsten Elemente der ‘Quantennatur’ der Wellenmechanik; insbesondere folgt aus (iv) dass nur diskrete Energiewerte zulässig sind. Das ist ein vom Gesichtspunkt der klassischen Mechanik aus ungewöhnlicher Sachverhalt!

Später (in Kapitel 4) werden wir die Axiome der Quantenmechanik formalisieren (und dabei aus der Wellenmechanik verallgemeinern). Insbesondere werden wir dort auch die Analoga der Axiome (iv) und (v) für die anderen Observablen erklären. Abgesehen davon fehlt nur noch ein wichtiges Postulat der Quantenmechanik, das wir jetzt schon einmal erwähnen sollten:

- (vi) Die Energie eines Quantensystems sei zur Zeit $t = t_0$ mit dem Ergebnis E_n gemessen worden. Dann ‘kollabiert’ die Wellenfunktion des Systems zu der Eigenfunktion ψ_n mit $H\psi_n = E_n\psi_n$, d.h. es gilt

$$\Psi(x, t) = A\psi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \quad \text{für } t > t_0. \quad (2.7.11)$$

Hierbei ist A eine Konstante mit $|A| = 1$, und wir haben wiederum (wie schon zuvor) angenommen, dass die Eigenwerte von H alle unterschiedlich sind.

Dieses Axiom ist noch weniger ‘klassisch’ als die anderen; der Kollaps der Wellenfunktion als Konsequenz einer Messung ist intuitiv nur schwer verständlich. Die physikalische Interpretation dieses Axioms ist, dass es unmöglich ist, eine Messung durchzuführen, ohne dabei das System zu beeinflussen. Das Axiom sagt in genauer Weise, was der Effekt dieser Beeinflussung ist. Man kann die Aussage des Axioms auch noch anders formulieren: nachdem die Energie des Systems einmal als E_n gemessen wurde, wird jede zukünftige Energiemessung immer wieder E_n finden und zwar mit Wahrscheinlichkeit 1. (Hierbei ist angenommen worden, dass das System zwischendurch nicht andersweitig beeinflusst worden ist.)

Es gibt ein (offensichtliches) konzeptuelles Problem (das ‘Messproblem’ der Quantenmechanik), das mit diesem Axiom in Verbindung steht. Dies hängt damit zusammen, dass es nicht klar ist, wie man präzise definieren soll, was genau eine ‘Messung’ ist. In dieser Vorlesung wollen wir nicht versuchen, auf diese Fragen näher einzugehen — eine moderne Diskussion mancher dieser Aspekte findet sich in dem Buch von Isham [I]. Im folgenden wollen wir die Axiome einfach als die Regeln ansehen, die die Wellenmechanik definieren, ohne ihre konzeptionellen Probleme zu hinterfragen.

Nachdem wir nun das Grundgerüst der Wellenmechanik eingeführt haben, wollen wir nun ein paar explizite Beispiele betrachten, die uns eine bessere Vorstellung davon geben sollen, wie Quantenmechanik tatsächlich funktioniert.

3 Beispiele einfacher Systeme

Bevor wir damit beginnen wollen, die Quantenmechanik ein wenig formaler zu analysieren, wollen wir zunächst ein Gefühl für die Theorie bekommen. Dazu wollen wir die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung für ein paar einfache Systeme lösen. Die einfachsten Systeme sind 1-dimensionale Systeme, in denen das Teilchen sich nur in einer Richtung bewegen kann.

3.1 Das Teilchen in der ‘Box’

Wir betrachten ein Teilchen, das sich im Intervall $[0, a]$ frei bewegen kann, aber das Intervall nicht verlassen kann. Durch ein Potential $V(x)$ ausgedrückt bedeutet dies, dass

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Da das Potential ausserhalb der ‘Box’ unendlich ist, muss ausserhalb der Box $\psi(x) = 0$, $x \notin [0, a]$ gelten. Da das Teilchen im Innern der Box, d.h. für $x \in [0, a]$, frei ist, müssen wir dort die Differentialgleichung lösen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi. \quad (3.1.2)$$

Weiterhin muss ψ überall (und insbesondere an den Randpunkten $x = 0, a$) stetig sein; falls das nicht der Fall wäre, dann wäre die zweite Ableitung von ψ bei $x = 0, a$ proportional zu der Ableitung der Deltafunktion (mehr dazu später), und würde daher nicht die Schrödinger Gleichung lösen. Da aber ψ ausserhalb des Intervalls verschwindet gilt also

$$\psi(0) = \psi(a) = 0. \quad (3.1.3)$$

Die allgemeine Lösung von (3.1.2) ist

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cosh\left(\sqrt{2m|E|} \frac{x}{\hbar}\right) + B \sinh\left(\sqrt{2m|E|} \frac{x}{\hbar}\right) & \text{falls } E < 0 \\ A + Bx & \text{falls } E = 0 \\ A \cos\left(\sqrt{2m|E|} \frac{x}{\hbar}\right) + B \sin\left(\sqrt{2m|E|} \frac{x}{\hbar}\right) & \text{falls } E > 0, \end{cases} \quad (3.1.4)$$

wobei A und B Konstanten sind, die durch die Randbedingungen bestimmt werden. In jedem der drei Fälle verlangt $\psi(0) = 0$, dass $A = 0$. Falls $E \leq 0$, impliziert $\psi(a) = 0$ dann $B = 0$; alle Lösungen mit $E \leq 0$ sind also trivial. Andererseits gibt es eine nicht-triviale Lösung, falls $E > 0$ von der Form

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (3.1.5)$$

ist, wobei $n \in \mathbb{N}$, $\sqrt{2m|E_n|} = \frac{n\pi\hbar}{a}$. Denn dann ist das Argument des Sinus in (3.1.4) gleich $n\pi$ für $x = a$. In diesem Fall haben wir also $\psi(a) = 0$ selbst wenn B nicht verschwindet. Wir finden also die nicht-triviale Lösungen

$$\psi_n = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (3.1.6)$$

Die Konstanten B_n werden nun dadurch bestimmt, dass wir verlangen, dass ψ_n wie in (2.5.8) normiert ist. Also wollen wir B_n so finden, dass

$$1 = |B_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{1}{2}a|B_n|^2. \quad (3.1.7)$$

Eine Lösung ist $B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Die normierten Eigenfunktionen sind also

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad \text{mit} \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \quad (3.1.8)$$

Das Beispiel ist vielleicht ein wenig künstlich, aber es zeigt schon einige der charakteristischen Eigenschaften von Quantensystemen. Insbesondere sind die möglichen Energieeigenwerte *diskret*; wie wir oben erklärt haben, bedeutet dies, dass eine Energiemessung des Systems nur diese diskreten Werte finden kann. Wir sollten darauf hinweisen, dass diese Diskretheit im wesentlichen eine Folge der Randbedingungen war. Weiterhin sind alle Energieeigenwerte positiv, und insbesondere ist $E = 0$ nicht zulässig. Klassisch hätte man erwartet, dass das Teilchen einfach in Ruhe (mit Energie $E = 0$) irgendwo in der Box sitzen kann. Wie wir später sehen werden, ist dies jedoch mit der Heisenberg'schen Unschärferelation nicht kompatibel, und daher ist die Grundzustandsenergie strikt positiv. Schliesslich gilt die Faustregel (die für viele Quantensysteme richtig ist): die Wellenfunktion $\psi_1(x)$ des Grundzustandes hat keine Nullstelle im Intervall $(0, a)$; der erste angeregte Zustand $\psi_2(x)$ hat eine Nullstelle in $(0, a)$, der n te angeregte Zustand $\psi_{n+1}(x)$ hat n Nullstellen in $(0, a)$, usw.

Wir hatten in der Analyse des letzten Kapitels angenommen, dass sich jede Wellenfunktion (die die angemessenen Randbedingungen erfüllt — im vorliegenden Fall ist das $\Psi(x, t) = 0$ für $x \leq 0$ und $x \geq a$) durch die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators ausdrücken lässt. Hier ist das einfach eine Folge der üblichen Fourier-Analyse: jedes solche $\Psi(x, t)$ lässt sich als

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (3.1.9)$$

schreiben, wobei

$$c_n = \int_0^a dx \psi_n^*(x) \Psi(x, 0). \quad (3.1.10)$$

Diese Formel ist eine direkte Folge der Orthonormalitätsrelation (2.7.1) (falls die Funktionen vollständig sind). Zum Beispiel können wir jetzt die folgende Frage beantworten:

Problem: Angenommen das System wird zur Zeit $t = 0$ durch die konstante Wellenfunktion beschrieben, $\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{a}}$. Was ist die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Energiemessung E_n gemessen wird?

Wie wir zuvor erklärt haben ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Energie E_n gemessen wird einfach $|c_n|^2$ in der Entwicklung (3.1.9). Wegen (3.1.10) berechnen wir nun

$$\begin{aligned} c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a dx \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \left[-\frac{a}{n\pi} \cos \frac{n\pi x}{a} \right]_0^a \\ &= \frac{\sqrt{2}}{n\pi} [1 - (-1)^n]. \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

Die Wahrscheinlichkeit, die Energie E_n zu messen ist also Null falls n gerade ist; für ungerade n gilt andererseits

$$P_n = \left(\frac{2\sqrt{2}}{n\pi} \right)^2 = \frac{8}{n^2\pi^2}. \quad (3.1.12)$$

Als Nebenprodukt dieser Rechnung finden wir auch

$$\sum_{n>0 \text{ odd}} \frac{8}{n^2\pi^2} = 1, \quad (3.1.13)$$

und daher die nicht-triviale Identität

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m-1)^2} = \frac{\pi^2}{8}. \quad (3.1.14)$$

Ausgedrückt durch die Riemann'sche ζ -Funktion, deren Reihenentwicklung

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}, \quad (3.1.15)$$

für $s > 1$ konvergiert, ist die linke Seite

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m-1)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-2} - \sum_{n=1}^{\infty} (2n)^{-2} = \zeta(2) - \frac{1}{4}\zeta(2). \quad (3.1.16)$$

Daher folgt aus (3.1.14), dass

$$\zeta(2) = \frac{4}{3} \frac{\pi^2}{8} = \frac{\pi^2}{6}. \quad (3.1.17)$$

3.2 Teilchen im Topf

Als nächstes wollen wir das Teilchen im Topf diskutieren, d.h. den Fall, für den das Potential durch

$$V(x) = \begin{cases} -V & \text{falls } -a \leq x \leq a, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2.1)$$

gegeben ist. Zunächst interessieren wir uns für gebundene Zustände, d.h. für Zustände für die $|\psi(x)| \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$; diese entsprechen Lösungen, bei denen das Teilchen an den Topf gebunden ist, d.h. für die die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen nach Unendlich entkommt Null ist. [Die anderen Lösungen — die Streulösungen werden wir in Kapitel 3.6 besprechen.]

Wie zuvor behandeln wir die unterschiedlichen Regionen zunächst separat. Falls $x < -a$ und $x > a$, ist die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x), \quad (3.2.2)$$

und die allgemeinste Lösung ist

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad (3.2.3)$$

wobei

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \quad (3.2.4)$$

Damit ψ für $x \rightarrow \pm\infty$ abfällt muss κ reell gewählt werden, d.h. E muss negativ sein. Im folgenden werden wir das Vorzeichen der Wurzel immer so wählen, dass κ positiv ist. Mit dieser Konvention ist die Lösung mit den richtigen asymptotischen Randbedingungen

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{\kappa x} & \text{if } x < -a, \\ \psi(x) &= De^{-\kappa x} & \text{if } x > a. \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

In der mittleren Region, $-a < x < a$, ist die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - V\psi(x) = E\psi(x), \quad (3.2.6)$$

dessen allgemeinste Lösung von der Form

$$\psi(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx} \quad (3.2.7)$$

ist, wobei

$$k = \frac{\sqrt{2m(V+E)}}{\hbar}. \quad (3.2.8)$$

Bevor wir mit der detaillierten Diskussion der daraus zusammengesetzten Lösung beginnen, ist es nützlich zu beobachten, dass falls $\psi(x)$ eine gerade Funktion ist, $\psi(-x) = \psi(x)$, dass dann das auch für $H\psi(x)$ gilt, und entsprechend für ungerade Funktionen. Wir

können daher das Eigenwertproblem separat für gerade und ungerade Funktionen lösen. (Wir werden diese Art von Argumenten später noch genauer diskutieren, wenn wir allgemeiner ‘Symmetrien’ in der Quantenmechanik behandeln werden.)

Mit dieser Vorbemerkung wollen wir uns nun den geraden Lösungen zuwenden. Für gerade Wellenfunktionen ist $A = D$ und $B = C$, und der Ansatz ist daher

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x < -a \\ 2B \cos(kx) & \text{falls } -a < x < a \\ Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x > a. \end{cases} \quad (3.2.9)$$

Als nächstes wollen wir beweisen, dass sowohl ψ als auch ψ' bei $x = \pm a$ stetig sein müssen.¹ Die Analyse ist im wesentlichen für die beiden Fälle $x = \pm a$ gleich; wir werden daher nur die ‘Klebebedingung’ bei $x = a$ analysieren. Zunächst beobachten wir

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'_k(a + \epsilon) - \psi'_k(a - \epsilon)) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \psi''_k(x) \\ &= \int_{a-\epsilon}^a dx (E + V) \psi_k(x) + \int_a^{a+\epsilon} dx E \psi_k(x). \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Da E und $E + V$ endliche Konstanten sind und da ψ in der Nähe von $x = a$ beschränkt ist, folgt, dass die rechte Seite der zweiten Zeile im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ gegen Null strebt. Daraus folgt, dass ψ' bei $x = a$ stetig sein muss. Insbesondere muss daher auch ψ stetig sein.

Da $\psi(x)$ gerade ist, sind die beiden Klebebedingungen bei $x = \pm a$ gleich, und es genügt die Bedingung bei $x = -a$ zu betrachten. Die relevanten Gleichungen sind dann

$$Ae^{-\kappa a} = 2B \cos(ka), \quad \text{and} \quad \kappa A e^{-\kappa a} = 2Bk \sin(ka). \quad (3.2.11)$$

Wenn wir die beiden Gleichungen durcheinander teilen, finden wir

$$\kappa = k \tan(ka). \quad (3.2.12)$$

Weiterhin gilt wegen (3.2.4) und (3.2.8) dass

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV}{\hbar^2}. \quad (3.2.13)$$

Es ist bequem die Variablen $\eta = \kappa a$ und $\xi = ka$ einzuführen. Dann kann man (3.2.12) und (3.2.13) als

$$\eta = \xi \tan(\xi), \quad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2ma^2V}{\hbar^2} \quad (3.2.14)$$

schreiben. Diese beiden Gleichungen für η und ξ kann man numerisch (oder graphisch) lösen. Zum Beispiel sieht man leicht, dass für

$$\frac{2ma^2V}{\hbar^2} \leq \pi^2 \quad (3.2.15)$$

¹Im Fall des Teilchens in der Box (Kapitel 3.1) musste nur ψ stetig sein, nicht aber ψ' . Der Umstand, dass dort ψ' nicht stetig sein muss kann man nun auch verstehen!

nur eine Lösung existiert — siehe Abbildung 6. Entsprechend zeigt man, dass die Anzahl der geraden gebundenen Lösungen gerade N ist, falls

$$(N - 1)^2 \pi^2 < \frac{2ma^2 V}{\hbar^2} \leq N^2 \pi^2. \quad (3.2.16)$$

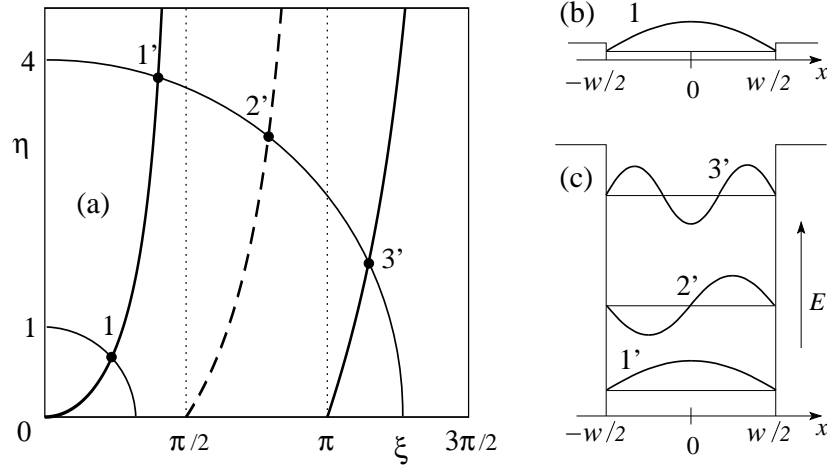


Abbildung 6: Die Lösungen in den zwei Fällen $V = 4E_0$ und $V = 64E_0$. (a) Graphische Lösung der transzendenten Gleichung mit $\xi \tan \xi$ (durchgezogene Linie) und mit $\xi \cot \xi$ (gestrichelte Linie). (b) Lösung im Fall des flachen Potentials $V = 4E_0$. (c) Lösungen für das tiefe Potential $V = 64E_0$. [Hier ist $a = w/2$ und $E_0 = \hbar^2/(8ma^2)$.]

Die Analyse für den ungeraden Fall ist ähnlich. In diesem Fall haben wir $A = -D$ und $B = -C$, und der Ansatz ist

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x < -a \\ 2iB \sin(kx) & \text{falls } -a < x < a \\ -Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x > a. \end{cases} \quad (3.2.17)$$

Die Stetigkeitsbedingung bei $x = -a$ gibt nun

$$Ae^{-\kappa a} = -2iB \sin(ka), \quad \text{and} \quad \kappa A e^{-\kappa a} = 2iBk \cos(ka). \quad (3.2.18)$$

Wiederum teilen wir diese beiden Gleichungen durcheinander, und finden dann

$$\kappa = -k \cot(ka). \quad (3.2.19)$$

Durch η und ξ ausgedrückt (die wie oben definiert sind) erhalten wir dann

$$\eta = -\xi \cot(\xi), \quad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2ma^2 V}{\hbar^2}. \quad (3.2.20)$$

Diese Gleichungen können wiederum numerisch (oder graphisch) gelöst werden. Insbesondere kann man leicht sehen, dass es keine ungerade gebundene Lösung gibt, falls

$$\frac{2ma^2 V}{\hbar^2} \leq \frac{\pi^2}{4}. \quad (3.2.21)$$

3.3 Das Stufenpotential

Als nächstes Beispiel betrachten wir das Stufenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0 \\ V_0 & \text{falls } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.3.1)$$

wobei $V_0 > 0$. Wie zuvor wollen wir die Lösungen der zeit-unabhängigen Schrödinger Gleichung

$$H\psi = E\psi \quad (3.3.2)$$

bestimmen. Wir sind weiterhin an den Lösungen, die die folgende physikalische Konfiguration beschreiben: ein Teilchen kommt von links und wird an der Stufe gestreut. Wir wollen die Wahrscheinlichkeit bestimmen, mit der das Teilchen reflektiert bzw. transmittiert wird.

Für $x < 0$ ist die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi, \quad (3.3.3)$$

und daher

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi. \quad (3.3.4)$$

Die allgemeinste Lösung dieser Gleichung ist

$$\psi_k(x) = Ae^{\frac{ikx}{\hbar}} + Be^{-\frac{ikx}{\hbar}}, \quad (3.3.5)$$

wobei A und B Konstanten sind und $k = \sqrt{2mE}$.

Da wir an der Konfiguration interessiert sind, in der wir ein Teilchen von links einschicken, benötigen wir k reell, so dass die Wellenfunktionen im Unendlichen nicht abfällt oder explodiert. Daher muss $E > 0$ sein. Der Term $Ae^{\frac{ikx}{\hbar}}$ beschreibt eine von links einlaufende Welle mit Impuls k , wohingegen der Term $Be^{-\frac{ikx}{\hbar}}$ die reflektierte Welle beschreibt, die mit entgegengesetztem Impuls nach rechts fliegt. (In der Tat rechnet man leicht nach, dass diese beiden Terme zu Wahrscheinlichkeitsströmen mit entgegengesetztem Vorzeichen führen!) Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist dann einfach $R = |B/A|^2$.

Nun betrachten wir die Region $x \geq 0$, in der die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V_0\psi = E\psi \quad (3.3.6)$$

ist, und daher

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi. \quad (3.3.7)$$

Die Eigenschaften der Lösungen zu dieser Gleichung hängen nun stark von dem Vorzeichen von $E - V_0$ ab, nämlich ob die Energie der einfallenden Welle kleiner oder grösser als die Höhe der Potentialstufe ist. Wir diskutieren die beiden Fälle separat:

Fall 1: $E > V_0$. In diesem Fall ist die allgemeinste Lösung

$$\psi_k(x) = Ce^{\frac{ilx}{\hbar}} + De^{-\frac{ilx}{\hbar}}, \quad (3.3.8)$$

wobei C und D Konstanten sind und $l = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Für die Konfiguration, in der wir interessiert sind, gibt es kein Teilchen das von rechts aus dem Unendlichen eingeschossen wird; daher interessieren wir uns für die Lösung mit $D = 0$.

Mit denselben Argumenten wie oben sieht man leicht, dass die richtige Klebebedingung ist, dass ψ_k und ψ'_k bei $x = 0$ stetig sind. Die Stetigkeit von ψ_k bei $x = 0$ impliziert, dass

$$A + B = C, \quad (3.3.9)$$

und die Stetigkeit von ψ'_k ergibt

$$(A - B)k = Cl. \quad (3.3.10)$$

Wir haben also

$$\begin{aligned} 2A &= C \left(1 + \frac{l}{k}\right) \\ 2B &= C \left(1 - \frac{l}{k}\right) \end{aligned}$$

und daher

$$\begin{aligned} \frac{C}{A} &= \frac{2}{1 + \frac{l}{k}} \\ \frac{B}{A} &= \frac{1 - \frac{l}{k}}{1 + \frac{l}{k}}. \end{aligned}$$

Die Reflektions- und Transmissions-Wahrscheinlichkeiten sind also

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(1 - \frac{l}{k})^2}{(1 + \frac{l}{k})^2}, \quad T = \frac{l}{k} \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4\frac{l}{k}}{(1 + \frac{l}{k})^2}. \quad (3.3.11)$$

Wir beachten, dass diese Definition der Transmissionswahrscheinlichkeit Sinn macht, da dann gilt $R + T = 1$. (Diese Identität folgt tatsächlich allgemeiner aus der Kontinuitätsgleichung.) Falls V_0 relativ zu E klein ist, dann ist T viel grösser als R . Falls die Höhe der Stufe V_0 relativ zu E grösser wird, nimmt die Reflektions-Wahrscheinlichkeit zu. Das ist wie man erwarten sollte.

Fall 2: $E < V_0$. Klassisch würde man erwarten, dass in diesem Fall das Teilchen immer reflektiert wird, da seine Energie nicht ausreicht, um die Potentialstufe zu überwinden. In der Quantenmechanik ist das aber nicht notwendigerweise so. Für $x < 0$ ist die Lösung wie zuvor, aber für $x > 0$ haben wir jetzt

$$\psi_k(x) = C'e^{-\frac{\kappa x}{\hbar}} + D'e^{\frac{\kappa x}{\hbar}}, \quad (3.3.12)$$

wobei κ eine positive reelle Zahl ist $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Damit (3.3.12) für $x \rightarrow +\infty$ nicht explodiert, muss $D' = 0$ gelten. Wie zuvor müssen ψ_k und ψ'_k bei $x = 0$ stetig sein; nun führt dies zu

$$\begin{aligned} A + B &= C' \\ i(A - B)k &= -C'\kappa \end{aligned} \quad (3.3.13)$$

und daher

$$\begin{aligned} \frac{C'}{A} &= \frac{2}{1 + \frac{i\kappa}{k}} \\ \frac{B}{A} &= \frac{1 - \frac{i\kappa}{k}}{1 + \frac{i\kappa}{k}}. \end{aligned}$$

Insbesondere ist also $C' \neq 0$. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei $x > 0$ anzutreffen ist also nicht gleich Null! Die Wahrscheinlichkeit nimmt jedoch mit $x > 0$ exponentiell ab, und das Teilchen erreicht deshalb niemals $x = \infty$. (Dies passt dann damit zusammen, dass in diesem Fall die Reflektions-Wahrscheinlichkeit $R = |B/A|^2 = 1$ eins ist.)

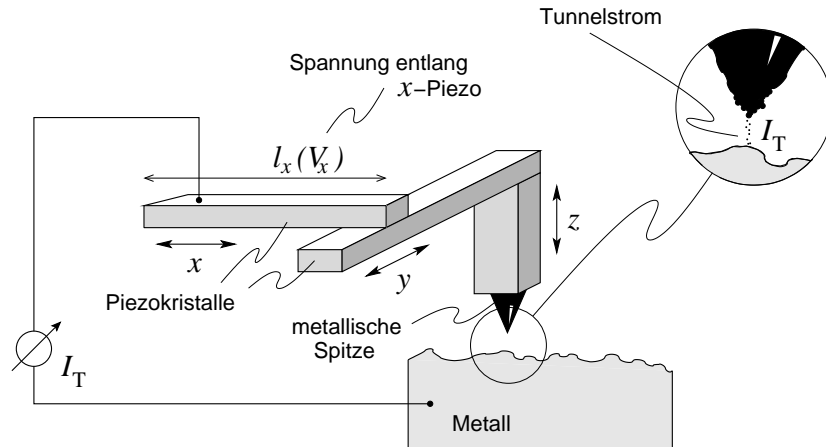


Abbildung 7: Tunnelmikroskop (Binnig & Rohrer, IBM): Der Tunnelstrom I_T fließt von der Metallspitze des Mikroskops zur untersuchten Oberfläche. Der Strom I_T hängt empfindlich (exponentiell) von der Distanz Spitze-Oberfläche ab und kann damit als Steuergröße genutzt werden: Der Strom I_T wird in eine Spannung $V_z(x, y)$ verwandelt, die den Piezokristall entlang z manipuliert, so dass I_T konstant bleibt. Die Kristalle entlang der x, y Ebene dienen der Verschiebung der Spitze ('scanning'). Das Potentialrelief $V_z(x, y)$ dient dann als Höhenkarte der Oberfläche.

Der Umstand, dass das Teilchen eine Region erreichen kann, die klassisch nicht erlaubt ist, wird manchmal 'Tunneln' genannt. [Streng genommen spricht man nur von 'Tunneln' im Fall einer endlichen Stufe, d.h. falls $V(x) = V_0$ für $0 \leq x \leq a$ mit $V(x) = 0$ für $x > a$; in diesem Fall ist die Transmissionswahrscheinlichkeit endlich, obgleich klassisch die Region

$x > a$ nicht erreichbar ist — siehe später.] Dieser Tunneleffekt hat wichtige Anwendungen; zum Beispiel ist er der physikalische Mechanismus des ‘Rastertunnelmikroskop’ (see Abbildung 7).

3.4 Normierung und Wellenpakete

Die obigen Wellenfunktionen sind streng genommen nicht normierbar. Zum Beispiel ist für den Fall eines freien Teilchens mit festem k (bzw. fester Energie E) die Wellenfunktion $\psi_k(x) = e^{ikx}$ offenbar nicht quadrat-integrabel, da $|\psi_k(x)|^2 = 1$ für alle x . Dieses Problem tritt immer dann auf, wenn die Menge der Lösungen der zeit-unabhängigen Schrödingergleichung durch einen kontinuierlichen Parameter (wie zum Beispiel k hier) parametrisiert wird.

Es ist dennoch nützlich, diese Lösungen auf diese Weise zu beschreiben. Obgleich diese Lösungen nicht quadrat-integrabel sind, kann man dennoch die allgemeinste Lösung der zeit-abhängigen Schrödinger Gleichung durch sie ausdrücken. In der Tat gilt weiterhin, dass die allgemeinste Lösung von der Form

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dk f(k) e^{ikx} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \quad (3.4.1)$$

ist, wobei $f(k)$ die Superposition dieser fundamentalen Lösungen beschreibt. Diese Funktion ist dann quadrat-integrabel, falls wir $f(k)$ geeignet wählen. Eine Superposition dieser freien Wellen wird oft als ‘Wellenpaket’ bezeichnet.

Um zu sehen, unter welchen Bedingungen dieses Wellenpaket quadrat-integrabel ist, erinnern wir uns daran, dass

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{ikx} = \delta(k) , \quad (3.4.2)$$

wobei $\delta(k)$ die übliche δ -Distribution ist. Eine Distribution ist eine Abbildung von einem geeigneten Funktionenraum (üblicherweise der Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit geeigneten Randbedingungen im Unendlichen) in die komplexen Zahlen. Für den Fall der δ -Distribution ist diese Abbildung durch

$$f \mapsto \int_{\mathbb{R}} dx f(x) \delta(x) = f(0) \quad (3.4.3)$$

definiert. Formal kann man sich die δ -Distribution als Funktion vorstellen, die überall (mit Ausnahme des Ursprungs) verschwindet. Das obigen Integral kann daher nur von $f(0)$ abhängen. Der ‘Wert’ der δ -Funktion bei 0 ist gerade so, dass das obige Integral nicht verschwindet sondern gerade $f(0)$ ergibt. [$\delta(0)$ ist daher Unendlich, aber in einem sehr präzisen Sinn!]

Distributionen kann man in vieler Hinsicht wie Funktionen behandeln; zum Beispiel kann man ihre Ableitung dadurch definieren, dass die übliche partielle Integrationsformel weiterhin gilt. Genauer gesagt ist $\delta'(x)$ die Distribution, die durch

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) \delta'(x) &= [f(x)\delta(x)]_{x=-\infty}^{x=\infty} - \int_{\mathbb{R}} dx f'(x) \delta(x) \\ &= -f'(0) \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

definiert ist. In mancher Hinsicht verhalten sich daher Distributionen wie normale Funktionen; der Hauptunterschied besteht darin, dass das Produkt zweier Distributionen im allgemeinen nicht wohl-definiert ist.

Mit diesen Vorbereitungen können wir nun die Normalisierung der Funktion (3.4.1) analysieren. Dazu berechnen wir

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} dx |\Psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dk \int_{\mathbb{R}} dk' f^*(k') f(k) \psi_{k'}^*(x) \psi_k(x) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{i\frac{E_{k'} t}{\hbar}} \\
&= \int_{\mathbb{R}} dk \int_{\mathbb{R}} dk' f^*(k') f(k) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{i\frac{E_{k'} t}{\hbar}} \delta(k' - k) \\
&= \int_{\mathbb{R}} dk \int_{\mathbb{R}} dl f^*(k+l) f(k) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{i\frac{E_{k+l} t}{\hbar}} \delta(l) \\
&= \int_{\mathbb{R}} dk |f(k)|^2, \tag{3.4.5}
\end{aligned}$$

wobei wir die Integration über x in der zweiten Zeile mit Hilfe von (3.4.2) ausgeführt haben; in der vorletzten Zeile haben wir ausserdem substituiert $k' - k = l$. Das Wellenpaket (3.4.1) ist also genau dann korrekt normiert, falls die Funktion f quadrat-integrierbar (mit Integral 1) ist.

Als Beispiel betrachten wir das Wellenpaket, das durch

$$f(k) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} e^{-a^2(k-k_0)^2/2} \tag{3.4.6}$$

definiert wird; dies beschreibt eine um k_0 zentrierte Impulsverteilung deren Breite umgekehrt proportional zu a ist. In diesem Fall kann man das Wellenpaket direkt berechnen:

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t) &= \int dk e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} f(k) \\
&= \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} \int dk e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} e^{-a^2(k-k_0)^2/2} \\
&= \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}} \int dk e^{-k^2\left(\frac{a^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)} e^{k(ix + a^2 k_0)} \\
&= \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}} e^{\frac{c^2}{4b^2}} \int dk e^{-(bk - \frac{c}{2b})^2}, \tag{3.4.7}
\end{aligned}$$

wobei wir

$$b^2 = \frac{a^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}, \quad c = ix + a^2 k_0 \tag{3.4.8}$$

definiert haben. Das Gauss'sche Integral kann nun leicht durchgeführt werden, und wir finden

$$\Psi(x, t) = \frac{\pi^{1/4} \sqrt{a}}{b} e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}} e^{\frac{c^2}{4b^2}} = \frac{\pi^{1/4} \sqrt{a}}{b} e^{\left(\frac{a^4}{4b^2} - \frac{a^2}{2}\right) k_0^2} e^{-\frac{x^2}{4b^2} + ixk_0 \frac{a^2}{2b^2}}. \tag{3.4.9}$$

Die Funktion ist also wieder von Gauss'schem Typ, d.h. sie ist proportional zu $e^{-a'^2 x^2}$, wobei nun die Breite proportional zu $2b \sim a$ ist. Da $|b|$ mit der Zeit anwächst, $|b| \sim \sqrt{t}$, läuft das Wellenpaket langsam auseinander.

3.5 Das Delta-Funktionspotential

Als weitere Beispielrechnung wollen wir die Wellenfunktion für das idealisierte Potential $V(x) \sim \delta(x)$ berechnen; dieses Potential verschwindet für $x \neq 0$, aber ist bei $x = 0$ unendlich. Wie zuvor wollen wir die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung lösen, wobei wir uns wiederum für die Lösung interessieren, die ein Teilchen beschreibt, das von links auf das Potential geschossen wird. Wir wollen insbesondere die Transmissions- und Reflektionswahrscheinlichkeit berechnen.

Die Schrödinger Gleichung ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.5.1)$$

Für $x < 0$ ist die allgemeinste Lösung

$$\psi(x) = Ae^{\frac{ikx}{\hbar}} + Be^{-\frac{ikx}{\hbar}}, \quad (3.5.2)$$

wobei, wie zuvor, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Für $x > 0$ ist die Lösung im wesentlichen dieselbe; da wir uns aber nur für die Lösungen interessieren, die ein von links einfliegendes Teilchen beschreiben, trägt nur einer der beiden Terme bei, nämlich

$$\psi(x) = Ce^{\frac{ikx}{\hbar}}. \quad (3.5.3)$$

Es bleibt, die richtigen Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ zu verlangen; dabei wird natürlich die δ -Funktion, die im Potential auftritt, eine wichtige Rolle spielen. Um zu verstehen, was in diesem Fall die richtige Klebebedingung ist, integrieren wir (3.5.1) von $-\epsilon$ nach ϵ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) + V\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x). \quad (3.5.4)$$

Nun bilden wir den Limes $\epsilon \rightarrow 0$. Da $\psi(x)$ auf dem Intervall $[-\epsilon, \epsilon]$ beschränkt ist, verschwindet die rechte Seite und wir erhalten

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mV}{\hbar^2}\psi(0), \quad (3.5.5)$$

wobei wir die Notation

$$f(0^+) = \lim_{\substack{x \rightarrow 0 \\ x > 0}} f(x) \quad f(0^-) = \lim_{\substack{x \rightarrow 0 \\ x < 0}} f(x) \quad (3.5.6)$$

benützt haben. Damit die beiden Grenzwerte $\psi'(0^+)$ und $\psi'(0^-)$ existieren, muss ψ bei $x = 0$ stetig sein; in der obigen Notation bedeutet dies

$$\psi(0^+) - \psi(0^-) = 0. \quad (3.5.7)$$

Für den obigen Ansatz (3.5.7) muss also gelten

$$A + B = C, \quad (3.5.8)$$

und (3.5.5) impliziert

$$\frac{ik}{\hbar} [C - (A - B)] = 2\frac{ik}{\hbar} B = \frac{2mV(A + B)}{\hbar^2}, \quad (3.5.9)$$

wobei wir (3.5.8) benützt haben. Wir können (3.5.9) durch

$$\frac{B}{A} = \frac{1}{\frac{ik\hbar}{mV} - 1} \quad (3.5.10)$$

lösen, und dann folgt aus (3.5.8), dass

$$\frac{C}{A} = \frac{\frac{ik\hbar}{mV}}{\frac{ik\hbar}{mV} - 1}. \quad (3.5.11)$$

Die beiden letzten Gleichungen implizieren nun, dass

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{1}{\frac{ik\hbar}{mV} - 1} \frac{1}{\frac{-ik\hbar}{mV} - 1} = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 V^2}}, \quad (3.5.12)$$

und

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{\frac{ik\hbar}{mV}}{\frac{ik\hbar}{mV} - 1} \frac{\frac{-ik\hbar}{mV}}{\frac{-ik\hbar}{mV} - 1} = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{m^2 V^2}}{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 V^2}}. \quad (3.5.13)$$

Man sieht leicht, dass die Konsistenzbedingung

$$R + T = 1 \quad (3.5.14)$$

gilt. Wie erwartet wächst die Transmissionswahrscheinlichkeit T mit der Energie, wohingegen die Reflektionswahrscheinlichkeit in gleichem Mass mit wachsender Energie abnimmt.

3.6 Resonanzen

Schliesslich wollen wir nochmals das Potential aus Kapitel 3.2 analysieren, aber dieses Mal für den Fall positiver Energie. In der klassischen Physik würde man erwarten, dass ein Teilchen mit positiver Energie nicht von dem Potential beeinflusst wird. Wie wir jedoch nun zeigen wollen, ist diese Intuition in der Quantenmechanik nicht richtig.

Wir machen nun den Ansatz, dass für $x < -a$ die Wellenfunktion durch

$$x < -a : \quad \psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}, \quad \text{wobei} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (3.6.1)$$

gegeben ist. Diese Wellenfunktion beschreibt ein von links einfliegendes Teilchen der Energie E , sowie das entsprechend reflektierte Teilchen. (Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist also $R = |r|^2$.) Für $-a < x < a$ ist die Lösung

$$-a < x < a : \quad \psi(x) = A e^{lx} + B e^{-lx}, \quad \text{wobei} \quad l = \frac{\sqrt{2m(E + V)}}{\hbar} > 0. \quad (3.6.2)$$

Für $x > a$ haben wir schliesslich

$$x > a : \quad \psi(x) = te^{ikx} + De^{-ikx}, \quad \text{wobei} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (3.6.3)$$

Wie zuvor wählen wir $D = 0$, da kein Teilchen von rechts einfliegen soll. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist dann $T = |t|^2$.

Wie zuvor können wir dieses Problem dadurch lösen, dass wir die verschiedenen Lösungen gemäss der richtigen Klebebedingungen zusammenfügen. Bei $x = a$ haben wir die beiden Bedingungen

$$\begin{aligned} t &= Ae^{i(l-k)a} + Be^{-i(l+k)a} \\ (k/l)t &= Ae^{i(l-k)a} - Be^{-i(l+k)a}, \end{aligned}$$

die sich leicht nach A und B auflösen lassen

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}e^{-i(l-k)a} t \left(1 + \frac{k}{l}\right) \\ B &= \frac{1}{2}e^{i(l+k)a} t \left(1 - \frac{k}{l}\right). \end{aligned}$$

Die Klebebedingungen bei $x = -a$ sind nun

$$\begin{aligned} e^{-ika} + re^{ika} &= Ae^{-ila} + Be^{ila} \\ e^{-ika} - re^{ika} &= (l/k) (Ae^{-ila} - Be^{ila}). \end{aligned}$$

Zusammen mit den obigen Formeln für A und B finden wir dann

$$t = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2la) - i\frac{l^2+k^2}{2lk} \sin(2la)}. \quad (3.6.4)$$

Schliesslich drücken wir l und k durch E und V aus, und erhalten die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\sin^2(2la)V^2}{4E(E+V)}}. \quad (3.6.5)$$

Wir bemerken, dass im allgemeinen $T < 1$. Dies bedeutet daher, dass in der Quantenmechanik selbst Teilchen mit $E > 0$ von dem Potential beeinflusst werden!

Im Rahmen dieser Analyse können wir nun auch den Tunneleffekt (den wir schon zuvor angesprochen haben — siehe Kapitel 3.3) im Detail verstehen. Der Tunneleffekt tritt dann auf, falls V negativ ist (so dass $-V$ positiv ist) und $0 < E < -V$. In der obigen Analyse ging nicht ein, dass V positiv war — V spielt nur für die Analyse der Wellenfunktion für $-a < x < a$ eine Rolle, für die die Frage, ob der Exponent reell oder imaginär ist, irrelevant ist. Wir können also einfach in dem Ausdruck für die Transmissionswahrscheinlichkeit

(3.6.5) V und E entsprechend wählen. Da wir uns für den Fall $E + V < 0$ interessieren, ist dann $l = \frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}$ rein imaginär, und wir finden

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\sinh(2|l|a)V^2}{4E(-V-E)}} , \quad |l| = \frac{\sqrt{2m(-E-V)}}{\hbar} \in \mathbb{R}^+ . \quad (3.6.6)$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit verschwindet nicht, obgleich der Bereich mit $x > a$ klassisch für das einfallende Teilchen nicht zugänglich ist! Wir bemerken jedoch, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit exponentiell mit a und $-(E + V)$ abfällt, da der sinh entsprechend ansteigt.

Wir beobachten, dass perfekte Transmission, d.h. $T = 1$ (Resonanz) genau dann auftritt, falls $\sin^2(2la) = 0$, also für $l = n\pi/2a$ mit $n \in \mathbb{N}$. Die zugehörigen Energien sind

$$E_{\text{res}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 - V = E_0(n\pi)^2 - V . \quad (3.6.7)$$

Diese resonanten Energien können selbst für $n > 0$ *negativ* sein. Man rechnet leicht nach (unter Benützung der Resultate aus Sektion 3.2), dass es genau so viele resonante Lösungen negativer Energie wie gebundene Zustände gibt.

Tatsächlich kann man die gebundenen Lösungen auch direkt aus der Struktur der obigen Lösung als Funktion von t ablesen: die gebundenen Lösungen existieren nämlich genau dann, wenn t einen Pol besitzt. Die Bedingung dafür, dass t einen Pol hat, ist

$$2 \cot(2la) = \cot(la/2) - \tan(la/2) = \frac{ik}{l} - \frac{l}{ik} . \quad (3.6.8)$$

Diese Gleichung hat die zwei Lösungen

$$\cot(la/2) = \frac{ik}{l} , \quad \text{oder} \quad \tan(la/2) = -\frac{ik}{l} . \quad (3.6.9)$$

Diese beiden Bedingungen sind gerade die Bedingungen für die Existenz von geraden bzw. ungeraden gebundenen Lösungen.

Schliesslich ist es instruktiv, die Lösungen in der Nähe der Resonanz (also in der Nähe von $T = 1$) genauer zu studieren. Wir schreiben

$$e^{-2ika} \frac{1}{t} = \cos(2la) \left[1 - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) \tan(2la) \right] \approx 1 . \quad (3.6.10)$$

Für eine Resonanz gilt $E = E_n$, $\cos(2la) = 1$ sowie $\tan(2la) = 0$. Wenn wir den Ausdruck in Potenzen von $(E - E_n)$ entwickeln, finden wir für die Klammer

$$1 - \frac{i}{2} \frac{d}{dE} \left[\left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) \tan 2al \right]_{E_n} (E - E_n) \equiv 1 - \frac{2i}{\Gamma} (E - E_n), \quad (3.6.11)$$

$$\text{wobei} \quad \frac{4}{\Gamma} = \left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) 2a \frac{dl}{dE} \Big|_{E_n} . \quad (3.6.12)$$

Als Funktion von E verhält sich also $t(E)$ in der Nähe einer Resonanz wie

$$e^{2ika}t(E) \cong \frac{i\Gamma/2}{E - (E_n - i\Gamma/2)} \quad (3.6.13)$$

und das Absolutquadrat $T = |t(E)|^2$ wird durch ein Lorentzkurve beschrieben (siehe Abbildung 8(a))

$$T = |t|^2 \cong \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_n)^2 + \Gamma^2/4} . \quad (3.6.14)$$

Für das weitere ist es bequem, die Amplitude $t(E)$ als

$$t(E) = |t| e^{i\delta(E)} \quad (3.6.15)$$

zu schreiben, wobei $\delta(E)$ eine Phase ist. Man sieht leicht, dass diese Phase jedes Mal, wenn eine Resonanz durchlaufen wird, um π wächst — siehe Abbildung 8(b).

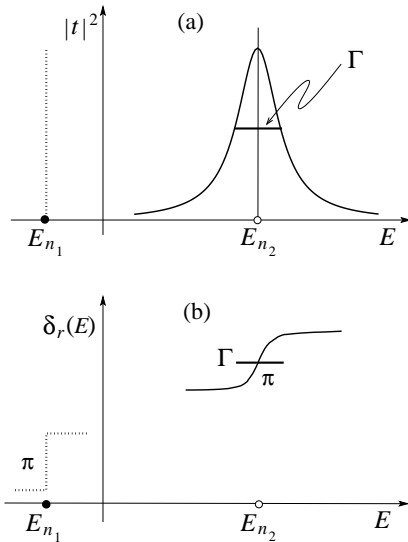


Abbildung 8: (a) Verhalten der Transmissionswahrscheinlichkeit $T = |t(E)|^2$ in der Nähe einer Resonanz $E_{n_2} > 0$.

(b) Phasenshift $\delta(E)$ in $t(E)$ in der Umgebung einer Resonanz; der Sprung in π ist über eine Breite der Größenordnung Γ verschmiert.

4 Der Formalismus der Quantenmechanik

Wir wollen nun versuchen, die Axiome der Quantenmechanik ein wenig abstrakter zu formulieren. Bisher haben wir die verschiedenen Systeme, die wir besprochen haben, durch komplexe Wellenfunktionen $\Psi(x, t)$ beschrieben, deren Zeitentwicklung durch die Schrödinger Gleichung gegeben ist. Da die Schrödinger Gleichung eine lineare Differentialgleichung ist, gilt das Superpositionsprinzip, d.h. die Summe zweier Lösungen und das Vielfache einer Lösung sind immer auch Lösungen. Der Raum der Lösungen ist daher ein komplexer Vektorraum. (Im Fall der Wellenfunktionen ist der Lösungsraum ein Unterraum des Raums der komplexwertigen Funktionen auf dem Konfigurationsraum.)

Damit die Wellenfunktion eine vernünftige Wahrscheinlichkeitsinterpretation besitzt, war weiterhin wichtig, dass sie normierbar war, d.h. dass

$$\int_{\mathbb{R}^f} d\vec{x} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = 1 \quad \text{für jedes } t.$$

Formal gesehen bedeutet dies, dass der komplexe Vektorraum der Lösungen ein inneres Produkt besitzen muss. Einen solchen Vektorraum nennt man einen **Hilbertraum**.

4.1 Der Hilbertraum

Sei \mathcal{H} ein komplexer Vektorraum. \mathcal{H} ist ein Hilbertraum, falls \mathcal{H} eine positiv-definite sesqui-lineare Form (Skalarprodukt) besitzt, bezüglich deren Norm \mathcal{H} vollständig ist. Das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist eine Abbildung

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} , \quad (4.1.1)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

- (i) Das Skalarprodukt ist linear im zweiten Argument,

$$\langle \psi | \alpha \chi_1 + \beta_2 \chi_2 \rangle = \alpha \langle \psi | \chi_1 \rangle + \beta \langle \psi | \chi_2 \rangle . \quad (4.1.2)$$

- (ii) Das Skalarprodukt hat die Eigenschaft

$$\overline{\langle \psi | \chi \rangle} = \langle \chi | \psi \rangle . \quad (4.1.3)$$

[Insbesondere ist das Skalarprodukt daher anti-linear im ersten Argument,

$$\langle \alpha \chi_1 + \beta_2 \chi_2 | \psi \rangle = \alpha^* \langle \chi_1 | \psi \rangle + \beta^* \langle \chi_2 | \psi \rangle .$$

Die durch das Skalarprodukt definierte Form ist daher nicht bilinear sonder ‘sesqui-linear’.]

- (iii) Das Skalarprodukt ist positiv definit,

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 , \quad \text{und} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \psi = 0 . \quad (4.1.4)$$

Hier sind ψ, χ_j Elemente von \mathcal{H} , und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.
 Jedes Skalarprodukt definiert eine Norm durch

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} . \quad (4.1.5)$$

Wegen (iii) ist der Ausdruck unter der Wurzel immer positiv, und von daher ist die Norm ebenso positiv. Weiterhin zeigt man leicht mit Hilfe der Cauchy-Schwarz Ungleichung

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \cdot \langle \psi | \psi \rangle , \quad (4.1.6)$$

die direkt aus den Axiomen (i) – (iii) folgt (Übungsaufgabe), dass die durch (4.1.5) definierte Norm die Dreiecksungleichung erfüllt,

$$\|\psi + \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\| . \quad (4.1.7)$$

Schliesslich ist ein komplexer Vektorraum \mathcal{H} mit einem Skalarprodukt ein Hilbertraum, falls \mathcal{H} bezüglich der Norm (4.1.5) vollständig ist: dies bedeutet, dass jede Cauchy Folge von Vektoren $\phi_n \in \mathcal{H}$ zu einem Element in \mathcal{H} konvergiert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n = \phi \in \mathcal{H} .$$

[Eine Cauchy Folge ϕ_n ist eine Folge, die die folgende Eigenschaft besitzt: für jedes $\epsilon > 0$ gibt es ein $N \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n, m > N$,

$$\|\phi_n - \phi_m\| < \epsilon .]$$

Das einfachste Beispiel eines Hilbertraumes ist der n -dimensionale komplexe Vektorraum \mathbb{C}^n , für den das Skalarprodukt durch

$$\left\langle \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \right\rangle = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i \quad (4.1.8)$$

definiert ist. In der Quantenmechanik echter physikalischer Systeme treten jedoch üblicherweise unendlich-dimensionale Vektorräume auf. Typischerweise sind diese unendlich-dimensionalen Vektorräume separabel, d.h. sie besitzen eine abzählbare Basis.

4.2 Der L^2 Raum

Der Hilbertraum, der der Wellenmechanik zu Grunde liegt, ist der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen, der sogenannte L^2 Raum. Im einfachsten Fall eines 1-dimensionalen Konfigurationsraums (die Verallgemeinerung für f -dimensionale Systeme ist relativ offensichtlich) ist der relevante L^2 Raum $L^2(\mathbb{R})$, der Vektorraum der komplexwertigen Funktionen $f : \mathbb{R} \leftarrow \mathbb{C}$, für die gilt

$$\int_{\mathbb{R}} dx |f(x)|^2 < \infty . \quad (4.2.1)$$

Weiterhin definieren wir das Skalarprodukt durch

$$\langle f|g \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx f^*(x) g(x) . \quad (4.2.2)$$

Die L^2 Bedingung (4.2.1) ist also einfach die Bedingung, dass $\langle f|f \rangle < \infty$. Auf der Menge dieser Funktionen definieren wir die Vektorraumoperationen

$$\begin{aligned} (f + g)(x) &= f(x) + g(x) \\ (\lambda f)(x) &= \lambda f(x) . \end{aligned}$$

Es ist klar, dass das obige Skalarprodukt bezüglich dieser Operationen sesquilinear ist, d.h. (i) und (ii) erfüllt sind. Weiterhin ist offensichtlich, dass $\langle f|f \rangle \geq 0$. Um zu sehen, dass das Skalarprodukt tatsächlich positiv definit ist (Eigenschaft (iii)), müssen wir genauer erklären, wie das Integral definiert ist. Das richtige Integral-Mass ist das sogenannte Lebesgue-Mass, für das auch nicht-stetige Funktionen integrierbar sind. Der Hilbertraum ist dann der Raum aller lebesgue-integrierbaren Funktionen, wobei wir Funktionen identifizieren, die sich nur auf einer Menge vom Mass Null unterscheiden; das Skalarprodukt ist dann auf diesem Quotientenraum eindeutig definiert und ist ferner automatisch positiv-definit.

Mit Hilfe der Cauchy-Schwarz Ungleichung kann man nun leicht beweisen, dass die obigen Vektorraumoperationen tatsächlich auf L^2 schliessen. Für den Fall der Skalarmultiplikation ist das relativ offensichtlich, denn es gilt wegen der Sesquilinearität

$$\langle \lambda f|\lambda f \rangle = |\lambda|^2 \langle f|f \rangle . \quad (4.2.3)$$

Um zu beweisen, dass $f + g$ in L^2 liegt (falls f und g in L^2 liegen) berechnet man nun

$$\langle f + g|f + g \rangle = \langle f|f \rangle + \langle g|g \rangle + \langle f|g \rangle + \langle g|f \rangle . \quad (4.2.4)$$

Die letzten beiden Terme kann man nun mit Hilfe der Cauchy-Schwarz Ungleichung abschätzen, und es folgt daher, dass $\langle f + g|f + g \rangle < \infty$. Dies beweist, dass die Vektorraumoperationen auf L^2 schliessen.

Mit demselben Argument folgt übrigens auch, $\langle f|g \rangle < \infty$, falls f und g in L^2 liegen (und daher (4.2.1) erfüllen); das Skalarprodukt ist also für alle Elemente von L^2 wohldefiniert.

Die verbleibende Eigenschaft, nämlich dass der so-definierte Vektorraum vollständig ist, erfordert ein wenig mehr Aufwand. Die Details spielen aber für das Weitere keine wichtige Rolle, und wir werden daher nicht darauf eingehen.

4.3 Separable Hilberträume

Der $L^2(\mathbb{R})$ Hilbertraum ist unendlich-dimensional und separabel. Dies bedeutet, dass er eine abzählbar unendliche Basis f_n besitzt, d.h. linear unabhängige Vektoren f_n , wobei

$n = 1, 2, \dots$, so dass sich jede Funktion $f \in L^2$ als Linearkombination der f_n schreiben lässt,

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n, \quad c_n \in \mathbb{C}. \quad (4.3.1)$$

Wann immer ein Hilbertraum eine abzählbare Basis besitzt, kann man daraus eine orthonormale Basis konstruieren. Eine orthonormale Basis hat die Eigenschaft, dass

$$\langle f_n | f_m \rangle = \delta_{m,n}. \quad (4.3.2)$$

Allgemeiner nennen wir zwei Vektoren f und g eines Hilbertraumes orthogonal, falls $\langle f | g \rangle = 0$.

Die orthonormale Basis kann mit Hilfe des **Schmidt'schen Orthogonalitätsverfahren** rekursiv konstruiert werden. Dabei setzen wir

$$\begin{aligned} h_1 &= f_1 / \|f_1\| \\ g_2 &= f_2 - \langle h_1 | f_2 \rangle h_1 & h_2 &= g_2 / \|g_2\| \\ g_3 &= f_3 - \langle h_1 | f_3 \rangle h_1 - \langle h_2 | f_3 \rangle h_2 & h_3 &= g_3 / \|g_3\| \end{aligned}$$

usw.

4.4 Operatoren und Observable

Wie wir gesehen haben sind die Wellenfunktionen Elemente eines Hilbertraumes, nämlich des L^2 Raumes. Wie wir weiter gesehen haben entsprechen physikalischen Observablen (so wie zum Beispiel dem Impuls oder der Energie, d.h. der Hamiltonfunktion) Differential-Operatoren, die auf diesen Wellenfunktionen wirken. Zum Beispiel ist der Impuls p der Operator

$$\mathbf{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad f(x) \mapsto \mathbf{p} f(x) = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}. \quad (4.4.1)$$

[Wir ignorieren hier das Problem, dass \mathbf{p} nicht auf dem ganzen L^2 Raum definiert ist.] Als Operator auf L^2 ist \mathbf{p} ein linearer Operator, d.h. für $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ und $f, g \in \mathcal{H}$ gilt

$$\mathbf{p}(\lambda f + \mu g) = \lambda \mathbf{p}(f) + \mu \mathbf{p}(g). \quad (4.4.2)$$

Ein anderes (noch einfacheres) Beispiel ist der Ortsoperator; er ist einfach durch Multiplikation mit x definiert

$$\mathbf{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad f(x) \mapsto \mathbf{x} f(x) = x \cdot f(x). \quad (4.4.3)$$

Dieser Operator ist natürlich auch linear in dem obigen Sinn. Wir erwarten daher, dass im allgemeinen Fall Observable durch **lineare Operatoren** auf dem Hilbertraum beschrieben werden.

Die Operatoren, die zu observablen physikalischen Grössen gehören, haben besondere Eigenschaften. Wie wir zuvor argumentiert haben, ist der Erwartungswert des Impulses in dem Zustand $\Psi(x, t)$ zum Beispiel

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\Psi} = \int_{\mathbb{R}} dx \Psi^*(x, t) \mathbf{p} \Psi(x, t) . \quad (4.4.4)$$

In der Sprache des Hilbertraumes ist das einfach

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\Psi} \equiv \langle \Psi | \mathbf{p} | \Psi \rangle . \quad (4.4.5)$$

Im allgemeinen definieren wir also den Erwartungswert einer physikalischen Observablen \mathbf{A} durch

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{\Psi} \equiv \langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle . \quad (4.4.6)$$

Da dies der Erwartungswert einer physikalischen Messung beschreibt, muss $\langle \mathbf{A} \rangle_{\Psi}$ reell sein. (Wir hatten das zuvor explizit für den Fall des Impulses und der Energie nachgeprüft. Für den Fall des Erwartungswertes des Ortes ist das offensichtlich.) Wegen der Eigenschaft (ii) des Skalarproduktes ist das die Bedingung

$$\langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = \langle \mathbf{A} | \Psi | \Psi \rangle . \quad (4.4.7)$$

Zu jedem Operator \mathbf{B} können wir die Adjungierte \mathbf{B}^\dagger durch

$$\langle f | \mathbf{B} g \rangle = \langle \mathbf{B}^\dagger f | g \rangle , \quad \text{für alle } f, g \in \mathcal{H} \quad (4.4.8)$$

eindeutig bestimmen. Eine hinreichende Bedingung, die (4.4.7) garantiert, ist also einfach, dass

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A} , \quad (4.4.9)$$

d.h. dass der Operator **selbst-adjungiert** ist. Man prüft leicht nach (im wesentlichen mit derselben Rechnung wie in Kapitel 2.4), dass der Impuls und Hamiltonoperator selbst-adjungiert sind. Wir verlangen daher im allgemeinen: *physikalische Observable werden durch selbst-adjungierte Operatoren auf dem Hilbertraum dargestellt.*

Im endlich dimensionalen Fall, d.h. falls $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, können wir jeden linearen Operator \mathbf{A} durch eine Matrix $M(\mathbf{A})$ beschreiben. (Diese Matrix hängt natürlich von der Wahl der Basis ab; im folgenden wählen wir immer eine Orthonormalbasis, z.B. die Basis $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $e_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, usw.) Dann ist die Matrix des adjungierten Operators \mathbf{A}^\dagger gerade die hermitesch konjugierte Matrix von \mathbf{A} , d.h.

$$M(\mathbf{A}^\dagger) = \overline{M(\mathbf{A})}^t . \quad (4.4.10)$$

Die Observablen entsprechen also gerade den hermiteschen Matrizen. Der allgemeine Fall ist die unendlich-dimensionale Verallgemeinerung dieser Bedingung.

4.5 Messungen, Erwartungswerte und die Dirac Notation

Als nächstes wollen wir erklären, was die möglichen Resultate einer Messung der Observablen \mathbf{A} sind und was die richtige Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist, d.h. wir wollen die Axiome (iv) und (v) aus Kapitel 2.7 auf allgemeine Observable verallgemeinern.

Der Einfachheit halber nehmen wir zunächst an, dass der Hilbertraum endlich-dimensional (von Dimension N) ist. Jeder selbst-adjungierte Operator (d.h. jede hermitesche Matrix) kann dann diagonalisiert werden; dies bedeutet, dass wir eine Basis von \mathcal{H} aus Eigenvektoren von \mathbf{A} finden können. Wir bezeichnen diese Eigenvektoren mit ψ_n , wobei $n = 1, 2, \dots, N$, und die zugehörigen Eigenwerte mit λ_n , $n = 1, 2, \dots, N$,

$$\mathbf{A} \psi_n = \lambda_n \psi_n . \quad (4.5.1)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, dass die ψ_n normiert sind, $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$. Weiterhin zeigt man leicht (das ist die analoge Rechnung zu jener in Kapitel 2.7), dass die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten zueinander orthogonal sind, $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$ falls $\lambda_m \neq \lambda_n$. In der Tat folgt dies aus

$$\begin{aligned} \lambda_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle &= \langle \psi_m | \mathbf{A} \psi_n \rangle = \langle \mathbf{A} \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= \lambda_m^* \langle \psi_m | \psi_n \rangle . \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

Wenden wir diese Gleichung mit $m = n$ an, folgt dass alle λ_n reell sein müssen. Dann können wir die beiden Seiten der Gleichung voneinander abziehen und deduzieren, dass $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$ falls $\lambda_m \neq \lambda_n$. Falls es mehrere Eigenvektoren zu demselben Eigenwert gibt, können wir diese separat (mit dem Schmidt-schen Orthogonalisierungsverfahren) orthonormieren; wir können daher also immer annehmen, dass die Eigenvektoren eines selbst-adjungierten Operators (im endlich-dimensionale Fall) orthonormiert sind,

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{m,n} . \quad (4.5.3)$$

Für das folgende ist es bequem die sogenannte **Dirac-Notation** einzuführen. Dabei bezeichnen wir Vektoren des Hilbertraums als ‘kets’, nämlich als

$$|a\rangle \in \mathcal{H} . \quad (4.5.4)$$

[Der Name ‘ket’ rührt daher, dass der ket-Vektor die 2. Hälfte des Skalarproduktes, der ‘brac-ket’ ist.] Entsprechend definieren wir die ‘bra’s durch

$$\langle a| \in \mathcal{H}^* . \quad (4.5.5)$$

Vermöge des Skalarproduktes kann man ‘bra’s natürlicherweise als Elemente des Dual-Raumes auffassen: ein ‘bra’ kann nämlich ein ‘ket’ aufessen, und dafür eine Zahl geben,

$$\langle a|(|b\rangle) \equiv \langle a|b\rangle . \quad (4.5.6)$$

Mit Hilfe dieser Notation kann man nun leicht Spektralprojektoren definieren. Dazu betrachten wir

$$P_n = |\psi_n\rangle\langle\psi_n| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} . \quad (4.5.7)$$

Man rechnet leicht nach (wegen der Normierung von ψ_n), dass P_n ein Projektor ist, $P_n^2 = P_n$. Ausserdem ist offensichtlich, dass P_n auf den Eigenraum $|\psi_n\rangle$ projiziert. Es ist dann klar, dass

$$\mathbf{A} = \sum_n \lambda_n P_n = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| . \quad (4.5.8)$$

Das ist die sogenannte Spektralzerlegung von \mathbf{A} .

Mit Hilfe dieser Spektralzerlegung können wir nun den Erwartungswert von \mathbf{A} in dem Zustand ψ als

$$\langle\mathbf{A}\rangle_\psi = \sum_n \lambda_n \langle\psi|\psi_n\rangle \langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n |\langle\psi|\psi_n\rangle|^2 \quad (4.5.9)$$

schreiben. Die Interpretation dieser Formel ist nun klar:

- (iv') die möglichen Ergebnisse einer Messung von \mathbf{A} sind die verschiedenen Eigenwerte λ_n .
- (v') die Wahrscheinlichkeit, dass als Messergebnis λ auftritt ist einfach

$$W(\lambda) = \sum_{\lambda_m=\lambda} |\langle\psi_m|\psi\rangle|^2 . \quad (4.5.10)$$

Der Erwartungswert von \mathbf{A} im Zustand ψ ist $\langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle$.

Das ist die gesuchte Verallgemeinerung von (iv) und (v) aus Kapitel 2.7.

Die anderen Postulate der Quantenmechanik können wir jetzt auch allgemeiner formulieren:

- (i') Der Raum der Zustände ist ein Hilbertraum \mathcal{H} , auf dem ein selbst-adjungierter Hamiltonoperator H definiert ist. Das System wird zu jeder Zeit t durch einen *Strahl* im Hilbertraum beschrieben; ein Strahl $\psi(t)$ ist die Äquivalenzklasse von normierten Vektoren χ mit $\langle\chi|\chi\rangle = 1$, wobei $\chi_1 \sim \chi_2$ falls $\chi_1 = e^{i\alpha}\chi_2$.

- (ii') Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t) \quad (4.5.11)$$

beschrieben. [Das ist nun eine Differentialgleichung in \mathcal{H} . Man sieht leicht, dass diese Zeitentwicklung auf den Äquivalenzklassen der Strahlen wohldefiniert ist.]

- (iii') Observablen werden durch selbst-adjungierte Operatoren \mathbf{A} beschrieben.

Man überzeugt sich leicht, dass alle messbaren Konsequenzen unabhängig von der Wahl des Repräsentanten im Strahl sind.

4.6 Verallgemeinerung auf ∞ -dimensionale Hilberträume

Um die obigen Begriffe auf unendlich dimensionale Hilberträume zu verallgemeinern, benötigen wir ein bisschen mehr Technologie. Insbesondere müssen wir das Spektrum von \mathbf{A} definieren. Das **Spektrum** $\sigma(\mathbf{A})$ eines selbst-adjungierten Operators $\mathbf{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ enthält $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$, falls es für jedes $\epsilon > 0$ einen normierten Zustand $\psi_\epsilon \in \mathcal{H}$ ($\langle \psi_\epsilon | \psi_\epsilon \rangle = 1$) gibt, so dass

$$\|(\mathbf{A} - \lambda)\psi_\epsilon\| \leq \epsilon . \quad (4.6.1)$$

Falls λ ein Eigenwert von \mathbf{A} ist, d.h. falls es ein ψ gibt, so dass

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi \quad (4.6.2)$$

dann ist natürlich $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$. In der Tat besteht im endlich dimensionalen Fall, d.h. falls \mathcal{H} ein endlich dimensionaler Hilbertraum ist, das Spektrum von \mathbf{A} einfach aus den Eigenwerten von \mathbf{A} . Das Spektrum ist also die (richtige) Verallgemeinerung des Konzeptes der Eigenwerte für den unendlich dimensionalen Fall.

Wie wir oben gesehen haben ist jeder Eigenwert eines selbst-adjungierten Operators reell. Tatsächlich kann man auch zeigen, dass das gesamte Spektrum $\sigma(\mathbf{A})$ eines selbst-adjungierten Operators immer eine Teilmenge der reellen Zahlen ist. Damit macht es dann Sinn zu postulieren: *die möglichen Resultate einer Messung der Observablen \mathbf{A} ist das Spektrum von \mathbf{A} .* Das ist einfach die richtige (unendlich-dimensionale) Verallgemeinerung unserer früheren Behauptung, dass die möglichen Messergebnisse die Eigenwerte sind.

Das Spektrum kann diskret sein, oder kontinuierlich, oder sowohl diskrete als auch kontinuierliche Teile enthalten. Zum Beispiel ist das Spektrum von x für ein freies Teilchen die gesamte reelle Achse, und entsprechendes gilt für p . Das Spektrum des Hamiltonoperators eines freien Teilchens ist hingegen die positive Halb-Achse,

$$\text{freies Teilchen:} \quad \sigma(x) = \sigma(p) = \mathbb{R} , \quad \sigma(H) = \mathbb{R}^+ . \quad (4.6.3)$$

Für das Teilchen im Potentialtopf (siehe Kapitel 3.2) gilt andererseits

$$\text{Potentialtopf:} \quad \sigma(H) = \{E_1, \dots, E_N\} \cup \mathbb{R}^+ , \quad (4.6.4)$$

wobei E_1, \dots, E_N die Energien der gebundenen Zustände sind. Für den harmonischen Oszillator, den wir später (Kapitel 6) diskutieren werden, ist das Spektrum von H rein diskret,

$$\text{Harmonischer Oszillator:} \quad \sigma(H) = \{\hbar\omega(\frac{1}{2} + n) : n = 0, 1, 2, \dots\} . \quad (4.6.5)$$

Die Verallgemeinerung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation auf beliebige Observablen beruht auf dem Spektralsatz. Falls das Spektrum rein diskret ist (wie zum Beispiel im endlich-dimensionalen Fall), dann gilt

$$f(A) := \sum_{a \in \sigma(A)} f(a)P_a , \quad (4.6.6)$$

wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion und $f(A) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein Operator ist. Die Zuordnung $f \mapsto f(A)$ hat die Eigenschaften

$$(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2)(A) = \alpha_1 f_1(A) + \alpha_2 f_2(A), \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}), \quad (4.6.7)$$

$$(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A), \quad (4.6.8)$$

$$\bar{f}(A) = f(A)^\dagger, \quad (4.6.9)$$

$$f(A) = \begin{cases} \mathbf{1} & \text{für } f(x) \equiv 1, \\ A & \text{für } f(x) = x, \end{cases} \quad (4.6.10)$$

sowie Stetigkeit bzgl. f , auf die wir nicht näher eingehen. Der **Spektralsatz** besagt, dass es auch im unendlich-dimensionalen Fall eine eindeutige Zuordnung gibt

$$f \mapsto f(A), \quad (4.6.11)$$

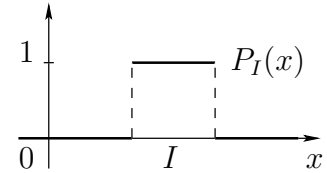
die die Eigenschaften (4.6.7–4.6.10) erfüllt..

Mit Hilfe des Spektralsatzes können wir nun die Wahrscheinlichkeitsinterpretation auch im allgemeinen Fall erklären.

Sei nun $I \subset \mathbb{R}$ ein Intervall und $P_I(x)$ dessen charakteristische Funktion. Dann ist $P_I(A)$ ein orthogonaler Projektor,

$$P_I(A) = P_I(A)^\dagger = P_I(A)^2$$

(folgt aus (4.6.8, 4.6.9)), und für disjunkte Intervalle I_1, I_2 gilt



$$P_{I_1 \cup I_2}(A) = P_{I_1}(A) + P_{I_2}(A)$$

(folgt aus (4.6.7)). Für jeden Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist dann

$$W_\psi(I) = \langle \psi | P_I(A) | \psi \rangle$$

ein **Wahrscheinlichkeitsmass** auf \mathbb{R} , d.h. es erfüllt.

$$\begin{aligned} W_\psi(I) &= \|P_I(A)\psi\|^2 \geq 0 \\ W_\psi(I_1 \cup I_2) &= W_\psi(I_1) + W_\psi(I_2), \quad (I_1 \cap I_2 = \emptyset), \\ W_\psi(\mathbb{R}) &= 1. \end{aligned}$$

Wir interpretieren dann $W_\psi(I)$ als die Wahrscheinlichkeit, dass \mathbf{A} im Zustand $|\psi\rangle$ einen Messwert $a \in I$ annimmt. Die obigen drei Bedingungen garantieren, dass das eine vernünftige Definition ist.

Weiterhin definieren wir dann den **Erwartungswert** von \mathbf{A} im Zustand ψ durch

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\psi = \int \lambda dW_\psi((-\infty, \lambda]) = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle, \quad (4.6.12)$$

da $\int \lambda dP_{(-\infty, \lambda]}(x) = x$, vgl. (4.6.7, 4.6.10).

4.7 Andere Darstellungen der Quantenmechanik

In der ursprünglichen Beschreibung der Quantenmechanik als Wellenmechanik war unser Hilbertraum der ‘Ortsraum’ $L^2(\mathbb{R})$, wobei wir \mathbb{R} (bzw. \mathbb{R}^3) als den physikalischen Raum interpretierten. In dieser Betrachtung wirkt der Ortsoperator einfach als Multiplikationsoperator

$$\mathbf{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad (f)(y) \mapsto [\mathbf{x}(f)](y) = yf(y) , \quad (4.7.1)$$

wohingegen der Impulsoperator der Differentialoperator

$$\mathbf{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad f(x) \mapsto [\mathbf{p}f](x) = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (4.7.2)$$

ist. Aus der Perspektive der obigen Analyse ist nun klar, dass dies nur eine spezielle ‘Darstellung’ der Quantenmechanik ist. Zum Beispiel könnten wir genauso gut im Impulsraum arbeiten, der (für den Fall eines freien Teilchens) auch wieder gerade $L^2(\mathbb{R})$ (bzw. $L^2(\mathbb{R}^3)$) ist. In dieser ‘Impulsdarstellung’ ist dann der Impulsoperator einfach ein Multiplikationsoperator, nämlich

$$\mathbf{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad f(q) \mapsto [\mathbf{p}(f)](q) = qf(q) , \quad (4.7.3)$$

und der Ortsoperator wirkt nun als Differentialoperator

$$\mathbf{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad f(p) \mapsto [\mathbf{x}f](p) = i\hbar \frac{\partial f(p)}{\partial p} . \quad (4.7.4)$$

Die Definition des Ortsoperators im Impulsraum ist dadurch vorgeschrieben, dass er dieselbe algebraische Struktur wie in der Ortsdarstellung besitzen muss. Zum Beispiel muss der Kommutator von \mathbf{x} und \mathbf{p} in beiden Beschreibungen übereinstimmen. Der Kommutator zweier Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} ist einfach

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} . \quad (4.7.5)$$

Um diesen Kommutator auszurechnen, wenden wir die rechte Seite auf ein beliebiges Element des Hilbertraums an. Zum Beispiel gilt im Ortsraum

$$\mathbf{x}\mathbf{p}f(x) = x \left(-i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (4.7.6)$$

und

$$\mathbf{p}\mathbf{x}f(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (xf(x)) = -i\hbar f(x) - i\hbar x \frac{\partial f(x)}{\partial x} . \quad (4.7.7)$$

Subtraktion dieser beiden Ausdrücke führt zu

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}]f = i\hbar f(x) , \quad (4.7.8)$$

was als Operatoridentität einfach bedeutet

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar . \quad (4.7.9)$$

Man rechnet leicht nach, dass mit der obigen Definition für \mathbf{x} (4.7.6) dieselbe Operatoridentität (4.7.9) auch im Impulsraum gilt.

Orts- und Impulsraum sind vermutlich die beiden wichtigsten Darstellungsräume der Quantenmechanik. Im Prinzip kann man jedoch die Operatoralgebra der Observablen eines physikalischen Systems auch in anderen Hilberträumen darstellen. Manchmal ist es zum Beispiel bequem in der ‘Energiedarstellung’ zu arbeiten, in der der Hamiltonoperator diagonal wirkt. [Dies bedeutet einfach, dass man mit dem abstrakten Vektorraum arbeitet, dessen Basis die verschiedenen Lösungen der zeit-unabhängigen Schrödinger Gleichung parametrisiert.]

5 Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Viele Quantenphänomene sind schlussendlich eine Folge davon, dass die Observablen in der Quantenmechanik durch selbst-adjungierte Operatoren beschrieben werden, die im allgemeinen nicht miteinander vertauschen. Zum Beispiel haben wir ja bereits im letzten Kapitel gesehen, dass der Orts- und Impulsoperator nicht miteinander vertauschen, sondern dass gilt

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar.$$

Wie wir in Kürze zeigen wollen, ist der Umstand, dass dieser Kommutator nicht verschwindet der wesentliche Grund für die Heisenberg'sche Unschärferelation. Bevor wir diese ableiten, wollen wir zunächst ein besseres Gefühl dafür bekommen, was die physikalische Konsequenz nicht-verschwindender Kommutatoren ist.

5.1 Nicht-vertauschende Observable

Um einige der Komplikationen zu illustrieren, die auftreten, wenn Observable nicht vertauschen, betrachten wir das folgende 'toy model'. Wir arbeiten in der 'Energiedarstellung' und nehmen (der Einfachheit halber!) an, dass dieser Hilbertraum nur zwei-dimensional ist. Wir bezeichnen die zwei orthonormalen Eigenvektoren des Hamiltonoperators H mit χ_1 und χ_2 , wobei

$$\mathbf{H}\chi_1 = E_1\chi_1 \quad \mathbf{H}\chi_2 = E_2\chi_2. \quad (5.1.1)$$

Die beiden Zustände χ_1 und χ_2 bezeichnen also zwei Lösungen der zeit-unabhängigen Schrödinger Gleichung. Wir wollen weiterhin annehmen, dass es ausserdem eine Observable \mathbf{S} gibt, die auf diesen Zustände als

$$\mathbf{S}\chi_1 = \chi_2 \quad \mathbf{S}\chi_2 = \chi_1 \quad (5.1.2)$$

wirkt. Durch 2×2 Matrizen ausgedrückt sind diese Operatoren also

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.3)$$

Beide Matrizen sind in der Tat hermitesch, denn sie entsprechen (als Observable) selbst-adjungierten Operatoren. Nun berechnen wir den Kommutator:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, \mathbf{S}] &= \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & E_1 \\ E_2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & E_2 \\ E_1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

Der Kommutator verschwindet also nicht, vorausgesetzt, dass $E_1 - E_2 \neq 0$, d.h. dass die beiden Energieeigenwerte nicht übereinstimmen.

Die Eigenvektoren des Hamiltonoperators sind χ_1 und χ_2 , aber offensichtlich sind diese Vektoren *nicht* Eigenvektoren von \mathbf{S} . Dies ist notwendigerweise der Fall, da ja \mathbf{S} und \mathbf{H} nicht miteinander vertauschen. Da wir auch die Wahrscheinlichkeiten einer \mathbf{S} -Messung ausrechnen wollen, sollten wir die \mathbf{S} -Eigenvektoren, sowie ihre Eigenwerte bestimmen. Die Eigenwerte von \mathbf{S} sind einfach die Lösungen der charakteristischen Gleichung

$$\det(\mathbf{S} - \lambda \mathbf{1}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1. \quad (5.1.5)$$

Wir sehen also, dass die beiden Eigenwerte von \mathbf{S} gerade ± 1 sind. Weiterhin findet man leicht, dass der (normierte) Eigenvektor mit Eigenwert $s_1 = +1$ durch

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 + \chi_2) \quad (5.1.6)$$

gegeben ist, wohingegen der normierte Eigenvektor zu $s_2 = -1$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 - \chi_2) \quad (5.1.7)$$

ist. Ein natürliches Problem, für das wir uns vielleicht interessieren, ist das folgende:

Problem: Zur Zeit $t = 0$ wird \mathbf{S} gemessen und der Wert $s = +1$ gefunden. Das System wird dann eine Zeit t nicht gestört, und dann wird wiederum \mathbf{S} gemessen. Was ist die Wahrscheinlichkeit, dass $s = +1$ gemessen wird?

Zur Erinnerung, falls wir statt \mathbf{S} beide Male die Energie (d.h. die Observable, die zum Hamiltonoperator gehört) messen würden, wäre die Wahrscheinlichkeit, dasselbe Messergebnis wiederzufinden eins — siehe die Diskussion nach Postulat (vi) in Kapitel 2.7. Der Grund dafür ist, dass die Eigenzustände des Hamiltonoperators Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger Gleichung sind, und sich daher in der Zeit nur trivial verändern (nämlich durch eine Phase, die auf die Messwahrscheinlichkeit keinen Einfluss hat). Hier ist die Situation anders, da die Eigenzustände von \mathbf{S} nicht Eigenzustände des Hamiltonoperators sind.

Lösung: Gemäss der obigen Postulate ist das System nach der Messung von $\mathbf{S} = +1$ zur Zeit $t = 0$ in dem Eigenzustand, der zum Eigenwert $s = +1$ gehört. Das System wird also zur Zeit $t = 0$ durch

$$\Psi(t = 0) = \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 + \chi_2) \quad (5.1.8)$$

beschrieben. (Ohne Beschränkung der Allgemeinheit, haben wir hier einen definitiven Wert für die relative Phase zwischen $\Psi(t, 0)$ und ψ_1 gewählt — diese Phase spielt für das Weitere keine Rolle.) Wie wir weiterhin in Kapitel 2.6 gesehen haben, ist die Lösung der zeit-abhängigen Schrödinger Gleichung für $t > 0$ dann

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_1 e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} + \chi_2 e^{-i \frac{E_2 t}{\hbar}} \right). \quad (5.1.9)$$

Zur Zeit t wollen wir nun wiederum \mathbf{S} bestimmen; um die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten auszurechnen, ist es nun geschickt, $\Psi(t)$ wiederum in der Eigenbasis von \mathbf{S} auszurechnen. Um die Koeffizienten in dieser Basis zu berechnen, benützen wir nun den jetzt wohl-bekanntem Trick; wir machen also den Ansatz

$$\Psi(t) = a_1(t)\psi_1 + a_2(t)\psi_2, \quad (5.1.10)$$

und benützen, dass ψ_1 und ψ_2 orthonormal sind, um abzuleiten, dass

$$a_i(t) = \langle \psi_i | \Psi(t) \rangle \quad i = 1, 2. \quad (5.1.11)$$

Wir berechnen

$$\begin{aligned} a_1(t) &= \frac{1}{2} \langle \chi_1 + \chi_2 | \chi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \chi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\frac{(E_1+E_2)t}{2\hbar}} \left(e^{-i\frac{(E_1-E_2)t}{2\hbar}} + e^{i\frac{(E_1-E_2)t}{2\hbar}} \right) \\ &= e^{-i\frac{(E_1+E_2)t}{2\hbar}} \cos \left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} \right) \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

und

$$\begin{aligned} a_2(t) &= \frac{1}{2} \langle \chi_1 - \chi_2 | \chi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \chi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} - e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\frac{(E_1+E_2)t}{2\hbar}} \left(e^{-i\frac{(E_1-E_2)t}{2\hbar}} - e^{i\frac{(E_1-E_2)t}{2\hbar}} \right) \\ &= -i e^{-i\frac{(E_1+E_2)t}{2\hbar}} \sin \left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} \right). \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

Mit Hilfe dieser Formeln für $a_1(t)$ und $a_2(t)$ können wir nun die Wahrscheinlichkeit dafür ablesen, zur Zeit $t = 0$ $\mathbf{S} = +1$ zu messen: die Wahrscheinlichkeit ist einfach

$$P(S = +1, t) = |a_1(t)|^2 = \cos^2 \left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} \right), \quad (5.1.14)$$

und die Wahrscheinlichkeit, $\mathbf{S} = -1$ zu messen, ist

$$P(S = -1, t) = |a_2(t)|^2 = \sin^2 \left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} \right). \quad (5.1.15)$$

Die beiden Wahrscheinlichkeiten addieren sich natürlich zu 1. Zur Zeit $t = 0$ ist zudem $|a_1(0)| = 1$ und $|a_2(0)| = 0$. Für $t > 0$ hängen die Wahrscheinlichkeiten jedoch in nicht-trivialer Weise von t ab — das ist typisches Quantenverhalten, das man so klassisch nicht erwartet hätte!

5.2 Die Unschärfe einer Observablen

Wie wir zuvor erklärt haben, ist der Erwartungswert einer Observablen \mathbf{A} im Zustand ψ einfach

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle. \quad (5.2.1)$$

Wir definieren nun die **Unschärfe** der Observable \mathbf{A} durch

$$\Delta \mathbf{A} = \sqrt{\langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle}. \quad (5.2.2)$$

Das Quadrat der Unschärfe ist eine nicht-negative reelle Zahl, denn

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{A})^2 &= \langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \psi | (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle) (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle) \psi \rangle \\ &= \langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle) \psi | (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle) \psi \rangle \geq 0, \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

wobei wir benutzt haben, dass $(\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)$ ein selbst-adjungierter Operator ist, da \mathbf{A} selbst-adjungiert ist und da der Erwartungswert $\langle \mathbf{A} \rangle$ deshalb reell ist. Da das Quadrat der Unschärfe reell und nicht-negativ ist, können wir die Unschärfe immer durch die *positive* Wurzel davon erklären. Die Unschärfe einer Observablen (in einem Zustand ψ) ist also immer eine nicht-negative reelle Zahl.

Um die Unschärfe tatsächlich zu berechnen, beobachtet man, dass

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{A})^2 &= \langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle (\mathbf{A}^2 - 2\mathbf{A}\langle \mathbf{A} \rangle + \langle \mathbf{A} \rangle^2) \rangle \\ &= \langle \mathbf{A}^2 \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle^2. \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

Als Beispiel betrachten wir das 1-dimensionale Teilchen in der Box. Wie wir in Kapitel 3.1 gesehen haben, sind für diese Theorie die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators durch

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad \text{mit} \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (5.2.5)$$

gegeben, wobei $0 \leq x \leq a$ und $\psi_n(x) = 0$ für $x > a$ oder $x < 0$. Im Zustand ψ_n ist der Erwartungswert für x

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \rangle &= \int_0^a dx x |\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \int_0^a dx x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a dx x \frac{d}{dx} \left[x - \frac{a}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] \\ &= \frac{1}{a} \left[x \left(x - \frac{a}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right) \right]_0^a \\ &\quad - \int_0^a dx \left[x - \frac{a}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

Der Randterm ist einfach gleich a , und im zweiten Integral ist nur das Integral von x von Null verschieden (das $\cos \sin$ -Integral verschwindet, wie aus der Fouriertheorie wohl-bekannt). Da das x -Integral gerade $a/2$ ist, folgt also insgesamt

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{a}{2}. \quad (5.2.7)$$

Entsprechend berechnet man (Übungsaufgabe)

$$(\Delta \mathbf{x})^2 = \langle (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^2 \rangle = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right). \quad (5.2.8)$$

Der Erwartungswert des Impulses ist andererseits

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a dx \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ &= -\frac{2i\hbar n\pi}{a} \int_0^a dx \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ &= -\frac{i\hbar}{a} \left[\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right]_0^a \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

Daher gilt einfach

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{p})^2 &= \langle \mathbf{p}^2 \rangle \\ &= \langle \psi_n | -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n \rangle \\ &= \left\langle \psi_n \left| \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{a^2} \right| \psi_n \right\rangle \\ &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}. \end{aligned} \quad (5.2.10)$$

Wir beobachten nun, dass

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{p})^2 (\Delta \mathbf{x})^2 &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right) \\ &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right) \\ &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{12} - \frac{\hbar^2}{2}. \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

Die rechte Seite ist für $n = 1$ am kleinsten, und daher gilt also

$$(\Delta \mathbf{p})^2 (\Delta \mathbf{x})^2 \geq \hbar^2 \frac{\pi^2 - 6}{12} = 0.32 \hbar^2 \quad (5.2.12)$$

unabhängig von n . Das ist ein Beispiel der so-geannten Heisenberg'schen Unschärfere-
lation, nämlich dass das Produkt der Unschärfen von \mathbf{x} und \mathbf{p} von unten beschränkt ist.
Wie wir in Kürze zeigen werden, gilt ganz allgemein

$$(\Delta \mathbf{p})^2 (\Delta \mathbf{x})^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (5.2.13)$$

Das ist die berühmte Heisenberg'sche Unschärferelation. Wie wir gleich sehen werden, ist
dieses Resultat eine Folge eines ein wenig allgemeineren Phänomens: wann immer zwei
Observable nicht miteinander vertauschen, ist das Produkt ihrer Unschärfen von unten
beschränkt.

5.3 Die Heisenberg'sche Unschärferelation

In diesem Kapitel wollen wir das folgende Theorem beweisen:

Theorem Seien \mathbf{A} und \mathbf{B} zwei Observable eines physikalischen Systems. Dann erfüllen
die Unschärfen $\Delta \mathbf{A}$ und $\Delta \mathbf{B}$ in jedem Zustand die Ungleichung

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} |\langle \imath [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|. \quad (5.3.1)$$

Der Operator $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A}$ ist der Kommutator von \mathbf{A} und \mathbf{B} .

Beweis: Man zeigt sehr leicht (siehe Übungsaufgabe), dass $\imath [\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ ein selbst-adjungierter
Operator ist, vorausgesetzt, dass \mathbf{A} und \mathbf{B} selbst-adjungierte Operatoren sind. Der Erwar-
tungswert eines selbst-adjungierten Operators ist immer reell, und daher ist der Ausdruck
in den Betragszeichen eine reelle Zahl. Die Ungleichung (5.3.1) ist deshalb zu der Unglei-
chung

$$(\Delta \mathbf{A})^2 (\Delta \mathbf{B})^2 \geq \frac{1}{4} \langle \imath [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle^2 \quad (5.3.2)$$

äquivalent. Diese Aussage wollen wir jetzt beweisen.

Wir definieren $\mathbf{C} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$ und $\mathbf{D} = \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle$. Da \mathbf{A} und \mathbf{B} selbst-adjungierte
Operatoren sind, sind ihre Erwartungswerte reell, und daher sind auch \mathbf{C} und \mathbf{D} selbst-
adjungierte Operatoren. Weiterhin gilt

$$[\mathbf{C}, \mathbf{D}] = [\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle, \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (5.3.3)$$

Durch \mathbf{C} und \mathbf{D} ausgedrückt, ist (5.3.2) also einfach die Behauptung, dass

$$\langle \mathbf{C}^2 \rangle \langle \mathbf{D}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle^2, \quad (5.3.4)$$

wobei \mathbf{C} und \mathbf{D} selbst-adjungiert sind. Wie bezeichnen den Zustand des Systems mit ψ .
Ausserdem sei s eine beliebige reelle Zahl. Dann gilt

$$0 \leq \langle (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D}) \psi | (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D}) \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D})^\dagger (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D}) \psi \rangle = \langle (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D})^\dagger (\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D}) \rangle. \quad (5.3.5)$$

Da \mathbf{C} und \mathbf{D} selbst-adjungiert sind, erhalten wir also

$$0 \leq \langle (\mathbf{C} - \imath s \mathbf{D})(\mathbf{C} + \imath s \mathbf{D}) \rangle = \langle \mathbf{C}^2 \rangle + s \langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle + s^2 \langle \mathbf{D}^2 \rangle. \quad (5.3.6)$$

Nun beobachten wir, dass

$$\langle \mathbf{D}^2 \rangle = \langle \psi | \mathbf{D}^2 \psi \rangle = \langle \mathbf{D} \psi | \mathbf{D} \psi \rangle \geq 0, \quad (5.3.7)$$

wobei wir benützt haben, dass \mathbf{D} selbst-adjungiert ist. Es folgt daher, dass $\langle \mathbf{D}^2 \rangle = 0$ nur dann gilt, falls $\mathbf{D} \psi = 0$. In diesem Fall ist (5.3.4) trivial, denn es gilt dann auch

$$\langle [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle = \langle \psi | [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{C} \mathbf{D} \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{D} \mathbf{C} \psi \rangle = -\langle \mathbf{D} \psi | \mathbf{C} \psi \rangle = 0, \quad (5.3.8)$$

wobei wir wiederum benützt haben, dass \mathbf{D} selbst-adjungiert ist. Wir können daher annehmen, dass $\langle \mathbf{D}^2 \rangle > 0$ und wählen nun s in (5.3.6) gleich der reellen Zahl

$$s = -\frac{1}{2} \frac{\langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle}{\langle \mathbf{D}^2 \rangle}. \quad (5.3.9)$$

Damit wird (5.3.6)

$$0 \leq \langle \mathbf{C}^2 \rangle - \frac{1}{2} \frac{\langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle^2}{\langle \mathbf{D}^2 \rangle} + \frac{1}{4} \frac{\langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle^2}{\langle \mathbf{D}^2 \rangle} = \langle \mathbf{C}^2 \rangle - \frac{1}{4} \frac{\langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle^2}{\langle \mathbf{D}^2 \rangle}. \quad (5.3.10)$$

Durchmultiplizieren mit $\langle \mathbf{D}^2 \rangle$ führt dann zu

$$\frac{1}{4} \langle \imath [\mathbf{C}, \mathbf{D}] \rangle^2 \leq \langle \mathbf{C}^2 \rangle \langle \mathbf{D}^2 \rangle, \quad (5.3.11)$$

was gerade (5.3.4) ist.

Die übliche Heisenberg'sche Unschärferelation ist nun eine einfache Konsequenz dieses Theorems. Wie wir zuvor berechnet haben, ist der Kommutator von \mathbf{x} und \mathbf{p}

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = \imath \hbar. \quad (5.3.12)$$

Damit erhalten wir wie versprochen die Heisenberg'sche Unschärferelation

$$\Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{p} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.3.13)$$

Die obige Analyse zeigt noch nicht, dass die untere Schranke, die wir für das Produkt der Schwankungsquadrate abgeleitet haben, optimal ist. Mit Hilfe eines Beispiels können wir das aber nun sehen. Dazu betrachten wir das Gauss'sche Wellenpaket

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}}. \quad (5.3.14)$$

Man zeigt leicht, dass der Erwartungswert von x gerade

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0) e^{-a^2(x-x_0)^2} + x_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2(x-x_0)^2} \right] \\ &= x_0\end{aligned}\tag{5.3.15}$$

ist. Das Schwankungsquadrat ist dann

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0)^2 e^{-a^2(x-x_0)^2} \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2(x-x_0)^2} \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\sqrt{\pi}}{a} = \frac{1}{2a^2}.\end{aligned}\tag{5.3.16}$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= -i\hbar \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}} \\ &= i\hbar \frac{a^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0) e^{-a^2(x-x_0)^2} = 0.\end{aligned}\tag{5.3.17}$$

Das Schwankungsquadrat von p ist daher also

$$\begin{aligned}(\Delta p)^2 &= \langle p^2 \rangle = -\frac{a\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}} \\ &= \frac{a^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2(x-x_0)^2} - \frac{a^5\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0)^2 e^{-a^2(x-x_0)^2} \\ &= a^2\hbar^2 - a^4\hbar^2 \frac{1}{2a^2} = \frac{1}{2}a^2\hbar^2.\end{aligned}\tag{5.3.18}$$

Für dieses Beispiel ist also

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{1}{2a^2} \frac{1}{2} a^2 \hbar^2 = \frac{\hbar^2}{4}.\tag{5.3.19}$$

In diesem Fall ist also gerade die Heisenberg'sche Unschärferelation minimal erfüllt.

6 Der harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator ist eine ‘Drosophila’ der Quantenmechanik. Viele Probleme lassen sich durch eine Abbildung auf den (verschobenen) harmonischen Oszillator zurückführen und werden damit exakt lösbar. Eine ausführliche Diskussion drängt sich deshalb auf.

6.1 Die Lösung

Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators ist

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{f}{2}q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2, \quad (6.1.1)$$

wobei wir $\omega^2 = f/m$ gesetzt haben.

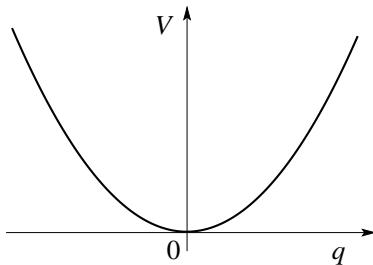


Abbildung 9: Harmonisches Potential $V(q) = \frac{f}{2}q^2 = \frac{m\omega^2}{2}q^2$ mit $\omega = \sqrt{f/m}$.

Die zeit-unabhängige Schrödinger Gleichung ist $H\psi = E\psi$, wobei H hier für den Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_q^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (6.1.2)$$

steht und E eine Konstante ist. Damit die Wellenfunktion im $L^2(\mathbb{R})$ liegt, müssen wir weiterhin verlangen, dass $\lim_{q \rightarrow \pm\infty} \psi(q) = 0$.

Um diese Problem zu lösen ist es zunächst bequem, zu dimensionslosen Variablen überzugehen,

$$x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q, \quad p = -i\sqrt{m\hbar\omega}\partial_x. \quad (6.1.3)$$

In diesen Variablen ist dann der Hamiltonoperator

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(-\partial_x^2 + x^2). \quad (6.1.4)$$

In der dimensionslosen Form haben wir also das Eigenwertproblem $H\psi = E\psi$

$$[\partial_x^2 + \lambda - x^2]\Psi = 0, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (6.1.5)$$

Dieses Problem lässt sich auf verschiedene Weisen lösen.

6.1.1 Die konventionelle Lösung

Der führende Term für $x \rightarrow \infty$ ist ($x^2 \gg \lambda$),

$$(\partial_x^2 - x^2)\psi = 0. \quad (6.1.6)$$

Daher muss ψ asymptotisch wie

$$\psi \propto e^{-x^2/2} \quad (6.1.7)$$

gehen; dann gilt nämlich $\partial_x \psi = -x\psi$ und deswegen $\partial_x^2 \psi = -\psi + x^2\psi \approx x^2\psi$ für $x \rightarrow \infty$.

Daher machen wir also den Ansatz $\psi(x) = H(x)e^{-x^2/2}$ und finden die Differentialgleichung für $H(x)$,

$$[\partial_x^2 - 2x\partial_x + (\lambda - 1)] H(x) = 0. \quad (6.1.8)$$

Zur Lösung verwenden wir den Fuchs'schen Ansatz

$$H(x) = x^s \sum_{n \geq 0} a_n x^n, \quad (6.1.9)$$

mit $a_0 \neq 0$ und $s \geq 0$, und finden durch Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} s(s-1)a_0 &= 0, \\ (s+1)s a_1 &= 0, \\ (s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\lambda)a_0 &= 0, \\ \vdots & \\ (s+n+2)(s+n+1)a_{n+2} - (2s+2n+1-\lambda)a_n &= 0. \end{aligned} \quad (6.1.10)$$

Gemäss Voraussetzung ist $a_0 \neq 0$, weshalb $s = 0$ oder $s = 1$ sein muss; weiter setzen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $a_1 = 0$. Aus diesen Bedingungen ergibt sich

- für $s = 0$ ist $H(x) = a_0 + a_2 x^2 + \dots$ gerade in x ,
- für $s = 1$ ist $H(x) = x(a_0 + a_2 x^2 + \dots)$ ungerade in x .

Der Umstand, dass es Lösungen mit definitiver Parität gibt, ist wiederum eine Folge davon, dass das Potential symmetrisch ist, $V(q) = V(-q)$.

Aus den obigen Rekursionsformeln für a_n folgt, dass $a_{n+2}/a_n \rightarrow 2/n$; falls die Folge a_n nicht abbricht, geht $H \sim \exp(x^2)$ für $x \rightarrow \infty$. Diese Funktion überkompensiert daher im Ansatz $\psi(x) = H(x)e^{-x^2/2}$ das Abfallverhalten von $e^{-x^2/2}$. Die Randbedingung $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) \rightarrow 0$ kann also nur befriedigt werden wenn die Reihe abbricht. Eine detaillierte Analyse zeigt, dass das nur dann der Fall ist, falls $\lambda_n = 2n + 1$. Dann erfüllt $H(x)$ die Differentialgleichung

$$0 = H'' - 2xH' + 2nH. \quad (6.1.11)$$

Diese Differentialgleichung hat eine polynomiale Lösung, nämlich das n -te Hermite Polynom $H_n(x)$. (Zum Beispiel ist $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$, $H_2 = 4x^2 - 2$, \dots)

Wir finden also eine Folge von (normierbaren) Lösungen

$$\psi_n(x) = N_n H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (6.1.12)$$

mit zugehörigen Eigenwerten $\lambda_n = 2n + 1$, also

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.1.13)$$

Die korrekte Normierung ist

$$N_0 = 1/\pi^{1/4}, \quad N_n = N_0/\sqrt{2^n n!}.$$

Dieser Lösungsweg repräsentiert das Standardvorgehen: Separiere die Asymptotik ($e^{-x^2/2}$) für $x \rightarrow \infty$ ab, finde die Korrektur (hier die Funktion $H(x)$) durch einen Reihenansatz; die Randbedingung verlangt den Abbruch der Reihe und es ergibt sich das Spektrum E_n und die polynomialen Eigenfunktionen $\propto H_n$.

Es gibt jedoch auch einen eleganteren Weg, der auch konzeptionell von Bedeutung ist.

6.1.2 Die elegante Lösung

Diese Lösung basiert auf einer Operatortechnik mit Auf- und Absteige Operatoren. Diese Operatoren spielen in vielen Bereichen der theoretischen Physik eine wichtige Rolle — zum Beispiel treten sie in der Feldquantisierung freier Felder auf. Wir definieren

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \partial_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} p \right), \\ a^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \partial_x). \end{aligned} \quad (6.1.14)$$

Die Umkehrung ist dann

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \\ \partial_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger). \end{aligned} \quad (6.1.15)$$

Einsetzen in (6.1.4) ergibt den Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2}(-\partial_x^2 + x^2) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}[-(a - a^\dagger)(a - a^\dagger) + (a + a^\dagger)(a + a^\dagger)] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}(-a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a - a^{\dagger 2} + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + a^{\dagger 2}) \\ &= \hbar\omega \left(aa^\dagger - \frac{1}{2}[a, a^\dagger] \right). \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

Für den Kommutator finden wir (vergleiche (6.1.4))

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[(x + \partial_x)(x - \partial_x) - (x - \partial_x)(x + \partial_x)] \\ &= \frac{1}{2}(-x\partial_x + \partial_x x)2 = 1. \end{aligned} \quad (6.1.17)$$

Wir definieren den Zahloperator $N = a^\dagger a$, und finden dann

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right). \quad (6.1.18)$$

Das Eigenwertproblem $H\Psi = E\Psi$ reduziert sich also zu

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad (6.1.19)$$

womit wir zur Diracnotation übergehen, d.h. statt Ψ_n den Zustand mit $|n\rangle$ bezeichnen. Wir untersuchen die Wirkung der Operatoren a^\dagger und a auf den Eigenzuständen $|n\rangle$ von N . Dazu bestimmen wir die Kommutatoren von N mit a^\dagger und mit a ,

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger, \quad (6.1.20)$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a. \quad (6.1.21)$$

Die Zustände

$$a^\dagger|n\rangle, \quad a|n\rangle \quad (6.1.22)$$

definieren dann neue Eigenvektoren zu N mit Eigenwert $n + 1$ und $n - 1$:

$$\begin{aligned} Na^\dagger|n\rangle &= (a^\dagger N + [N, a^\dagger])|n\rangle = a^\dagger n|n\rangle + a^\dagger|n\rangle = (n + 1)a^\dagger|n\rangle \\ Na|n\rangle &= (aN + [N, a])|n\rangle = an|n\rangle - a|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle. \end{aligned} \quad (6.1.23)$$

Die Operatoren a^\dagger und a erhöhen und erniedrigen also den Eigenwert n eines Eigenzustandes $|n\rangle$ um 1; diese Eigenschaft ist eine Folge der Kommutationsbeziehungen zwischen a , a^\dagger , und $N = a^\dagger a$ (die letztlich das Spektrum definiert),

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a. \quad (6.1.24)$$

Wir nennen a^\dagger einen **Aufsteige-** (oder Erzeugungs-) und a einen **Absteigeoperator** (oder Vernichtungsoperator).

Die Zustände $a^\dagger|n\rangle$ und $a|n\rangle$ sind noch nicht normiert: Sei $\langle n|n\rangle = 1$ normiert, dann ist

$$\begin{aligned} \langle n|a^\dagger a|n\rangle &= \langle n|N|n\rangle = n \quad \text{und} \\ \langle n|aa^\dagger|n\rangle &= \langle n|[a, a^\dagger] + a^\dagger a|n\rangle = n + 1 \end{aligned} \quad (6.1.25)$$

und wir erhalten normierte Eigenvektoren, wenn wir definieren

$$\begin{aligned} |n-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a|n\rangle, \\ |n+1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger|n\rangle. \end{aligned} \quad (6.1.26)$$

Im nächsten Schritt bestimmen wir die möglichen Eigenwerte n unter Benützung der Positivität des Skalarproduktes. Sei $|n\rangle$ ein Eigenvektor zum Eigenwert n , dann ist

$$a^k|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)\cdots(n-k+1)}|n-k\rangle, \quad (6.1.27)$$

wobei $|n-k\rangle$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $n-k$ ist. Andererseits gilt $n = \langle n|N|n\rangle = \langle an|an\rangle \geq 0$. Wählen wir $k \in \mathbb{N}$ also gross genug, so erhalten wir einen negativen Eigenwert $n-k$ zu N , was nicht möglich ist. Die Iteration muss also abbrechen, aber das kann nur dann geschehen, falls der Vorfaktor in (6.1.27) (für ein geeignetes k , und dann für alle grösseren k) verschwindet. Es folgt also, dass n ganzzahlig und nicht-negativ sein kann. Der kleinste Eigenwert ist $n=0$ und

$$a|0\rangle = 0, \quad (6.1.28)$$

d.h. der Operator a annihiliert $|0\rangle$. Es folgen dann alle $|n\rangle$ durch Anwendung von a^\dagger ,

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad n \geq 0. \quad (6.1.29)$$

Der Eigenwert n bestimmt die Energie,

$$E_n = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right); \quad (6.1.30)$$

somit zählt n die vorhandenen Energiequanten $\hbar\omega$. Die Anwendung von a^\dagger erzeugt ein zusätzliches Energiequant, welches die Schwingungsamplitude des Oszillators erhöht. Der tiefste Eigenzustand, der Grundzustand $|0\rangle$, hat keine Energiequanten, aber $E_0 = \hbar\omega/2 \neq 0$, eine Folge des Heisenbergschen Unschärfe-Prinzips: das Teilchen kann nicht scharf bei $x=0$ verweilen; durch die Unschärfe wird $\langle H \rangle \neq 0$ sogar im Grundzustand; die Energie $\hbar\omega/2$ ist das Resultat der Nullpunktsschwingungen des Vakuums.

Schliesslich brauchen wir noch die Wellenfunktionen, zuerst $|0\rangle$, das Vakuum. Nach Konstruktion ist $a|0\rangle = 0$. In der Ortsdarstellung bedeutet das

$$0 = \sqrt{2}\langle x|a|0\rangle = (x + \partial_x)\langle x|0\rangle = (x + \partial_x)\psi_0(x) = 0$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist einfach, $\psi_0(x) \propto e^{-x^2/2}$; mit der richtigen Normierung haben wir dann

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-x^2/2}. \quad (6.1.31)$$

Die Zustände $\langle x|n\rangle$ folgen durch iterative Anwendung von a^\dagger ,

$$\begin{aligned}\langle x|1\rangle &= \langle x|a^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \partial_x)\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{-x^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\pi}}2xe^{-x^2/2} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}xe^{-x^2/2}. \\ \langle x|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}}(x - \partial_x)^n e^{-x^2/2}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}}H_n(x)e^{-x^2/2},\end{aligned}\tag{6.1.32}$$

mit

$$\begin{aligned}H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2x, \\ H_2 &= (2x)^2 - 2, \\ H_3 &= (2x)^3 - 6(2x), \\ H_4 &= (2x)^4 - 12(2x^2) + 12.\end{aligned}\tag{6.1.33}$$

Die Form der Eigenfunktionen ist in Abbildung 10 gegeben. Gehen wir über zur dimensionsbehafteten Variable $q = \sqrt{\hbar/m\omega}x$ so erhalten wir

$$\langle q|n\rangle = \sqrt{\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{2^n n!}}H_n\left(\sqrt{m\omega/\hbar}q\right)e^{-(m\omega q^2)/2\hbar}.\tag{6.1.34}$$

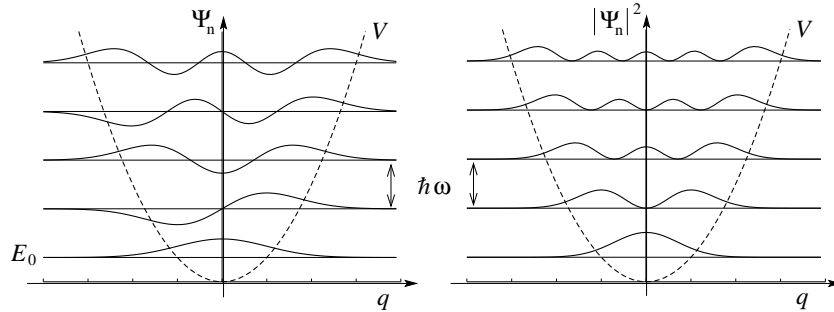


Abbildung 10: Eigenfunktionen (\propto Hermitepolynome) des harmonischen Oszillators, links die Amplituden Ψ_n , rechts die Wahrscheinlichkeiten $|\Psi_n|^2$.

6.2 Klassischer Limes

Für grosse Energien E_n nähert sich die quantenmechanische Lösung der klassischen Lösung an (klassischer Limes). Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit und Energie sind

gegeben durch

$$\begin{aligned}
 W_{\text{kl}} &= \frac{1}{2\pi q_0 \sqrt{1 - (x/q_0)^2}}, \\
 E_{\text{kl}} &= \frac{1}{2} m \omega^2 q_0^2,
 \end{aligned}
 \tag{6.2.1}$$

wobei die Amplitude q_0 durch die Abschätzung $E_{\text{kl}} = E_n$ definiert ist.

Um diese Korrespondenz zu verdeutlichen betrachten wir die Lösung für $n = 10$ (siehe Abbildung 11).

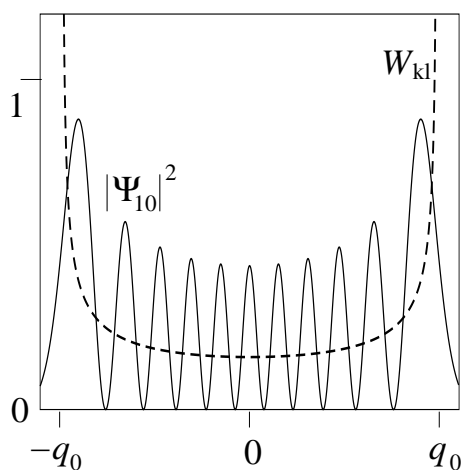


Abbildung 11: Klassischer Limes des harmonischen Oszillators. Die Wahrscheinlichkeit $|\Psi_{10}|^2$ nähert sich (nach Mittelung über kleine Skalen) dem klassischen Resultat $W_{\text{kl}}(q_0)$ an, wobei q_0 aus der Beziehung $E_{\text{kl}} = E_{10}$ zwischen den Energien folgt.

7 Symmetrien in der Quantenmechanik

Physikalische Systeme besitzen häufig offensichtliche Symmetrien, zum Beispiel die Rotationssymmetrie eines Zentralkraftproblems. Mathematisch gesehen bedeutet dies, dass das System invariant unter der Wirkung einer Symmetriegruppe G ist. Eine solche Symmetrie muss auch in der Quantentheorie weiterhin vorhanden bleiben; dabei muss die Symmetrie mit den Strukturen der Quantenmechanik (nämlich der Vektorraumstruktur und dem inneren Produkt) kompatibel sein. Die einfachste Art, dies zu erreichen (wie wir später sehen werden, ist das jedoch nicht der allgemeinste Fall) ist dadurch realisiert, falls die Gruppe G auf dem Hilbertraum \mathcal{H} durch unitäre Transformationen wirkt. Diese respektieren nämlich sowohl die Vektorraumstruktur, als auch das Skalarprodukt.

7.1 Unitäre Darstellungen

Eine **unitäre Darstellung** einer Gruppe G auf dem Hilbertraum \mathcal{H} ist ein (Gruppen)-Homomorphismus von G auf die Gruppe der unitären Operatoren auf \mathcal{H} . Konkret bedeutet dies, dass wir für jedes $g \in G$ einen unitären Operator $U(g)$ haben, so dass

$$U(g_1) \cdot U(g_2) = U(g_1 \cdot g_2) . \quad (7.1.1)$$

Hierbei ist ein unitärer Operator $U(g)$ eine lineare Abbildung

$$U(g) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (7.1.2)$$

die das Skalarprodukt erhält,

$$\langle U(g)\psi | U(g)\chi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle \quad (7.1.3)$$

für jedes $\psi, \chi \in \mathcal{H}$ und $g \in G$. Wegen der Definition des adjungierten Operators folgt aus dieser letzten Bedingung (zusammen mit der Gruppen-Homomorphismus Eigenschaft), dass

$$U(g)^\dagger = U(g)^{-1} = U(g^{-1}) . \quad (7.1.4)$$

Jede Gruppe besitzt die triviale Darstellung auf dem ein-dimensionalen Vektorraum \mathbb{C} , wobei jedes Gruppenelement g auf den Identitätsoperator abgebildet wird, $U(g) = \mathbf{1}$. Ein interessanteres Beispiel ist die Darstellung der Rotationsgruppe auf dem Raum der Wellenfunktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$. Die Gruppe der Rotationen des \mathbb{R}^3 ist die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$, die durch die reellen 3×3 Matrizen R mit Determinante 1 beschrieben wird. [Man zeigt leicht, dass die Menge dieser Matrizen eine Gruppe bilden; ferner ist klar, dass jede dieser Matrizen auf den Vektoren des \mathbb{R}^3 eine Rotation definiert.] Eine unitäre Darstellung auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ ist dann durch

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}x) \quad (7.1.5)$$

definiert. Man rechnet leicht nach, dass dies einen Homomorphismus der Rotationsgruppe in die Gruppe der unitären Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ definiert.

Dieses Argument kann leicht für alle orthogonalen Transformationen erweitert werden (also auf die Gruppe $O(3)$). Ein besonders interessanter Fall ist dabei die Untergruppe von $O(3)$, die nur aus den zwei Elementen $\pm \mathbf{1}$ besteht. Diese Gruppe wird durch den Paritätsoperator \mathcal{P} erzeugt, der zu der orthogonalen Transformation $-\mathbf{1}$ gehört. Da $\mathcal{P}^2 = 1$, hat der Paritätsoperator die Eigenwerte ± 1 . Die Eigenvektoren erfüllen

$$\psi(-\mathbf{x}) = (\mathcal{P}\psi)(\mathbf{x}) = \pm\psi(\mathbf{x}) , \quad (7.1.6)$$

d.h. sie entsprechen gerade den geraden bzw. ungeraden Funktionen. In vielen Fällen ist jedoch der Hamiltonoperator eine gerade Funktion von \mathbf{x} ; dies bedeutet, dass die Operatoren H und \mathbf{P} miteinander vertauschen. Dann kann man gemeinsame Eigenfunktionen zu H und \mathcal{P} finden — das ist das, was wir zuvor bei der Analyse des Teilchens im Potentialtopf gemacht hatten.

7.2 Die Drehgruppe $SO(3)$ und ihre Lie Algebra

Im Fall einer kontinuierlichen Gruppe (wie zum Beispiel der Rotationsgruppe) ist es oft bequem, statt der Gruppentransformationen die infinitesimalen Transformationen zu betrachten. Eine kontinuierliche Gruppe ist (falls sie ein paar technische Bedingungen erfüllt) eine **Lie Gruppe**; die infinitesimalen Transformationen einer Lie Gruppe bilden eine **Lie Algebra**, die für das weitere wichtig sein wird. Um dieses Konzept zu verstehen betrachten wir wiederum die Gruppe der Rotationen. Sei $R(t)$ eine differenzierbare Kurve von Rotationen in $SO(3)$ durch $R(0) = \mathbf{1}$. Eine infinitesimale Rotation ist dann

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} R(t) \right|_{t=0} . \quad (7.2.1)$$

[Wir stellen uns hier $R(t)$ als eine orthogonale 3×3 Matrix vor; Ω ist daher auch eine 3×3 Matrix.] Die Menge dieser infinitesimalen Rotationen bilden einen (reellen) Vektorraum, da

$$\alpha_1 \Omega_1 + \alpha_2 \Omega_2 = \left. \frac{d}{dt} R_1(\alpha_1 t) R_2(\alpha_2 t) \right|_{t=0} , \quad (7.2.2)$$

wobei $\alpha_i \in \mathbb{R}$. Weiterhin gilt

$$R \Omega_1 R^{-1} = \left. \frac{d}{dt} R R_1(t) R^{-1} \right|_{t=0} , \quad (7.2.3)$$

wobei $R \in SO(3)$ liegt. Schliesslich haben wir

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \left. \frac{d}{dt} R_1(t) \Omega_2 R_1(t)^{-1} \right|_{t=0} . \quad (7.2.4)$$

Der Kommutator zweier infinitesimaler Rotationen ist also wiederum eine infinitesimale Rotation; der Vektorraum der infinitesimalen Rotationen schliesst daher unter der Lie-Klammer (und bildet damit eine Lie Algebra). Diese Lie Algebra bezeichnen wir mit $\mathfrak{so}(3)$.

Wie schon oben angedeutet stellen wir uns die infinitesimalen Rotationen wiederum als Matrizen vor. Da $R(t)$ orthogonal ist, d.h. $R(t)^T R(t) = \mathbf{1}$ folgt durch Ableiten nach t , dass jedes Ω anti-symmetrisch ist, d.h.

$$\Omega^T + \Omega = 0 . \quad (7.2.5)$$

Die Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$ besteht also aus antisymmetrischen reellen 3×3 -Matrizen. Jede solche Matrix ist von der Form

$$\Omega(\vec{\omega}) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} , \quad (7.2.6)$$

d.h. $\Omega(\vec{\omega})\vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x}$ mit $\vec{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in \mathbb{R}^3$. Man kann leicht einsehen, dass $\mathfrak{so}(3)$ alle solche Matrizen enthält; die Vektorraum-Dimension von $\mathfrak{so}(3)$ ist also $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{so}(3) = 3$. Zum Beispiel können wir die Basisvektoren benützen

$$\Omega_i := \Omega(\vec{e}_i) , \quad i = 1, 2, 3 , \quad (7.2.7)$$

wobei $\{\vec{e}_i\}$ die Standardbasis für \mathbb{R}^3 ist.

Für $\vec{\omega} = \omega \mathbf{e}$, mit $|\mathbf{e}| = 1$, ist $e^{\Omega(\vec{\omega})t} = R(\mathbf{e}, \omega t)$ (als Matrix aufgefasst) gerade die Drehung um Achse \mathbf{e} und Winkel ωt . Aus geometrischen Überlegungen folgt nun, dass

$$R\Omega(\vec{\omega})R^{-1} = \Omega(R\vec{\omega}) , \quad (7.2.8)$$

wobei R eine beliebige Rotation in $SO(3)$ ist. Wegen (7.2.4) folgt daher (wähle $R = R(t)$ und leite nach t ab), dass

$$[\Omega(\vec{\omega}_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2) . \quad (7.2.9)$$

Insbesondere gilt daher also

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad (\text{und zyklisch,}) \quad (7.2.10)$$

was man natürlich auch direkt (aus (7.2.6)) nachrechnen kann.

Entsprechend kann man auch die Analyse für jede unitäre Darstellung von $SO(3)$ durchführen: sei $U(R)$ eine unitäre Darstellung von $SO(3)$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} , dann erhält man daraus auch eine Darstellung der Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$

$$U(\Omega) = \left. \frac{d}{dt} U(R(t)) \right|_{t=0} . \quad (7.2.11)$$

Insbesondere ist dies der Fall, falls \mathcal{H} endlich-dimensional ist, da dann $U(R)$ wiederum eine Matrix ist und die ganze Analyse wie zuvor durchgeführt werden kann; im unendlich-dimensionalen Fall erhält man durch diese Vorschrift typischerweise unbeschränkte Operatoren, und man muss mit der Definition ein wenig aufpassen. Wie wir jedoch gleich sehen werden sind alle interessanten Darstellungen der $SO(3)$ endlich-dimensional.

Die durch (7.2.11) definierte Abbildung ist in der Tat eine Darstellung von $\mathfrak{so}(3)$, d.h. ein Vektorraum-Homomorphismus von $\mathfrak{so}(3)$ in den Vektorraum der Operatoren auf \mathcal{H} , die die Lie Algebra Klammer erhält, d.h.

$$U([\Omega_1, \Omega_2]) = [U(\Omega_1), U(\Omega_2)] . \quad (7.2.12)$$

Jene letzte Eigenschaft folgt aus (7.2.4). Die Bedingung, dass die Darstellung $U(R)$ unitär ist, impliziert nun, dass

$$U(\Omega)^\dagger = -U(\Omega) , \quad (7.2.13)$$

d.h. dass die Operatoren $U(\Omega)$ anti-hermitesch sind. Für jedes $\vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$ definieren wir den selbstadjungierten **Drehimpulsoperator**

$$M(\vec{\omega}) := iU(\Omega(\vec{\omega})) , \quad (7.2.14)$$

also

$$M(\vec{\omega}) = \sum_{i=1}^3 M_i \omega_i ,$$

wobei die Vertauschungsrelationen der $M_i = M(e_i)$

$$[M_1, M_2] = iM_3 \quad (\text{und zyklisch}) \quad (7.2.15)$$

lauten. Wir nennen eine Darstellung der Lie Algebra unitär, wenn sie (7.2.13) erfüllt, d.h. wenn die zugehörige Darstellung der Lie Gruppe unitär ist.

Die unitäre Darstellung der Lie Gruppe $SO(3)$ ist eindeutig durch die Darstellung ihrer Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$, d.h. durch die Darstellung der Drehimpulsoperatoren, bestimmt. In der Tat kann man aus letzterer Darstellung durch ‘Exponenzieren’ die Darstellung der gesamten Lie Gruppe rekonstruieren. Wir werden uns daher im folgenden häufig auf die Darstellung der Lie Algebra (d.h. der Drehimpulsoperatoren) beschränken.

7.3 Reduzible und irreduzible Darstellungen

Sei \mathcal{H} der Hilbertraum, auf dem eine unitäre Darstellung der Gruppe G definiert ist. [D.h. wir haben für jedes $g \in G$ einen unitären Operator $U(g)$.] Wir nennen diese Darstellung **irreduzibel**, falls die einzigen Unterräume K von \mathcal{H} , die unter der Wirkung von $U(g)$ für alle $g \in G$ auf sich selbst abgebildet werden, $U(g)K \subset K$, einfach nur $K = \{0\}$ und $K = \mathcal{H}$ sind. Andernfalls nennen wir \mathcal{H} **reduzibel**.

Für unitäre Darstellungen kann man jede reduzible Darstellung in irreduzible Darstellungen zerlegen. Sei K also ein nicht-trivialer Unterraum von \mathcal{H} , der unter der Wirkung von G invariant ist. Dann gilt

$$\mathcal{H} = K \oplus K^\perp , \quad (7.3.1)$$

wobei

$$K^\perp = \{\psi \in \mathcal{H} : \langle \chi | \psi \rangle = 0 \text{ für alle } \chi \in K\} . \quad (7.3.2)$$

Wegen der Linearität des Skalarproduktes ist dann auch K^\perp ein Unterraum von \mathcal{H} . Weiterhin impliziert die Unitarität von U nun, dass auch K^\perp unter der Wirkung von G invariant ist: für jedes $\chi \in K$ gilt nämlich

$$\langle \chi | U(g)\psi \rangle = \langle U(g^{-1})\chi | \psi \rangle = \langle \chi' | \psi \rangle = 0 \quad (7.3.3)$$

falls $\psi \in K^\perp$. Daher liegt also auch $U(g)\psi$ in K^\perp . Wir können also sukzessive die Darstellung \mathcal{H} (falls sie reduzibel ist) in kleinere Unterdarstellungen zerlegen; diese sind entweder irreduzibel oder können auf gleich Weise weiterbehandelt werden. Zumindest im endlich-dimensionalen (im unendlich-dimensionalen Fall braucht man so etwas wie das ‘axiom of choice’) terminiert dieser Prozess und es folgt, dass man jede reduzible unitäre Darstellung als direkte Summe von irreduziblen Darstellungen schreiben kann. Im folgenden wollen wir daher irreduzible Darstellungen untersuchen.

7.4 Irreduzible Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$

Wir wollen nun die Struktur der irreduziblen endlich-dimensionalen Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$ beschreiben. [Alle diese Darstellungen sind automatisch unitär. Ferner gilt, dass es keine unendlich-dimensionale unitäre Darstellung der $SO(3)$ gibt; alle unitären Darstellungen von $SO(3)$ sind daher also direkte Summen der endlich-dimensionalen Darstellungen, die wir jetzt beschreiben wollen.] Die Lie Algebra von $SO(3)$ wird durch die Generatoren M_i , $i = 1, 2, 3$ aufgespannt, wobei die Kommutatoren durch

$$[M_1, M_2] = iM_3 \quad (\text{und zyklisch}) \quad (7.4.1)$$

gegeben sind. Wir definieren nun Auf- und Absteigeoperatoren

$$M_\pm = M_1 \pm iM_2 . \quad (7.4.2)$$

Ausgedrückt durch diese Basis sind dann die Vertauschungsregeln

$$[M_3, M_\pm] = \pm M_\pm , \quad [M_+, M_-] = 2M_3 . \quad (7.4.3)$$

Sei ψ ein Eigenvektor von M_3 :

$$M_3\psi = z\psi \quad (7.4.4)$$

für ein $z \in \mathbb{C}$. Damit ist auch $z \pm 1$ ein Eigenwert, sofern $M_\pm\psi \neq 0$:

$$M_3M_\pm\psi = M_\pm M_3\psi + [M_3, M_\pm]\psi = (z \pm 1)M_\pm\psi . \quad (7.4.5)$$

Da $\dim \mathcal{H} < \infty$, kann dieses Argument nicht beliebig wiederholt werden: Es gibt also einen Eigenwert $j \in \mathbb{C}$ mit Eigenvektor ψ_j , derart dass

$$M_3\psi_j = j\psi_j , \quad M_+\psi_j = 0 . \quad (7.4.6)$$

Wir setzen induktiv

$$M_-\psi_m =: \psi_{m-1} \quad (7.4.7)$$

für $m = j, j - 1, \dots$; somit ist

$$M_3 \psi_m = m \psi_m . \quad (7.4.8)$$

Auch diese Folge muss abbrechen, d.h. es gibt ein $k \in \mathbb{N}$, sodass

$$\psi_{j-k} \neq 0 , \quad M_- \psi_{j-k} = 0 . \quad (7.4.9)$$

Falls

$$M_+ \psi_m = \mu_m \psi_{m+1} \quad (7.4.10)$$

(was für $m = j$ zutrifft mit $\mu_j = 0$), so gilt auch

$$\begin{aligned} M_+ \psi_{m-1} &= M_+ M_- \psi_m = [M_+, M_-] \psi_m + M_- M_+ \psi_m \\ &= (2m + \mu_m) \psi_m \equiv \mu_{m-1} \psi_m . \end{aligned}$$

Es folgt induktiv

$$\mu_m = j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+1+m) . \quad (7.4.11)$$

Die Bedingung (7.4.9) besagt $\mu_{j-k-1} = 0$, also $2j = k$:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots . \quad (7.4.12)$$

Jeder irreduziblen Darstellung entspricht damit ein solches j . Umgekehrt verifiziert man, dass M_3, M_\pm , durch (7.4.7, 7.4.8, 7.4.10) auf Basisvektoren ψ_j, \dots, ψ_{-j} definiert, (7.4.3) erfüllen und somit eine Darstellung \mathcal{D}_j der $\mathfrak{so}(3)$ liefern.

Die Darstellung kann auch durch den Wert des **Casimiroperators** charakterisiert werden. Für den Fall von $\mathfrak{so}(3)$ vertauscht der Operator

$$\vec{M}^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = M_3^2 + \frac{1}{2}(M_+ M_- + M_- M_+) \quad (7.4.13)$$

mit allen anderen Operatoren, $[M_i, \vec{M}^2] = 0$. In einer irreduziblen Darstellung muss er daher einen bestimmten Wert annehmen; mit Hilfe der Vertauschungsrelationen können wir \vec{M}^2 auch als

$$\vec{M}^2 = M_- M_+ + M_3(M_3 + 1) = M_+ M_- + M_3(M_3 - 1) \quad (7.4.14)$$

schreiben; auf dem Vektor ψ_j angewendet findet man daher

$$\vec{M}^2 \psi_j = j(j+1) \psi_j . \quad (7.4.15)$$

Da \vec{M}^2 mit allen M_i vertauscht, gilt dann dasselbe für alle Vektoren $\psi \in \mathcal{D}_j$,

$$\vec{M}^2 \psi = j(j+1) \psi . \quad (7.4.16)$$

Wir haben also damit gezeigt: die endlich dimensionalen irreduziblen Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$, sind parametrisiert durch (7.4.12) mit $\dim \mathcal{D}_j = 2j + 1$. Es gilt (7.4.16).

Ist die Darstellung unitär, d.h. $M_i = M_i^\dagger$, ($i = 1, 2, 3$), und damit $M_\pm^\dagger = M_\mp$, so ist eine orthonormierte Basis

$$\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j \quad (7.4.17)$$

für \mathcal{D}_j durch

$$|j, j\rangle := \frac{\psi_j}{\|\psi_j\|}, \quad \sqrt{\mu_m}|j, m\rangle := M_-|j, m+1\rangle \quad (7.4.18)$$

gegeben. Diesbezüglich ist

$$\begin{aligned} \vec{M}^2|j, m\rangle &= j(j+1)|j, m\rangle, \\ M_3|j, m\rangle &= m|j, m\rangle, \\ M_\pm|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle. \end{aligned} \quad (7.4.19)$$

Führt man umgekehrt ein Skalarprodukt ein, indem man die Basis $\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$ als orthonormiert erklärt, so ist die Darstellung \mathcal{D}_j unitär.

Die triviale Darstellung entspricht natürlich gerade \mathcal{D}_0 . Die **fundamentale** (oder definierende) Darstellung ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ (bzw. auf $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$) definiert, wobei $U(R) = R$ und $U(\Omega) = \Omega$ ist. Sie ist irreduzibel, hat Dimension $d = 3$ und ist daher isomorph zu \mathcal{D}_1 . Dasselbe gilt für die adjungierte Darstellung auf $\mathcal{H} = \text{so}(3)$ (bzw. auf ihrer Komplexifizierung), die durch

$$U(R)\Omega = R\Omega R^{-1} \quad \text{bzw.} \quad U(\Omega_1)\Omega_2 = [\Omega_1, \Omega_2] \quad (7.4.20)$$

definiert ist.

Eine andere Klasse von Darstellungen sind die Unterräume der Funktionen auf der Kugel, die durch Kugelfunktionen erzeugt werden. Dazu betrachten wir den Raum aller (komplexwertigen) Funktionen, die auf der Kugeloberfläche definiert sind. Jede solche Funktion können wir als Funktion von θ und ϕ schreiben, wobei θ den Breitengrad und ϕ den Längengrad beschreibt. Auf dem Vektorraum dieser Funktionen wirkt die Drehgruppe wie durch (7.1.5) beschrieben; in den obigen Kugelkoordinaten gilt dann

$$M_3 = -i\frac{\partial}{\partial\phi}, \quad M_\pm = e^{i\pm\phi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \right). \quad (7.4.21)$$

[In der Tat rechnet man leicht nach, dass diese Differentialoperatoren den obigen $\text{so}(3)$ Vertauschungsregeln genügen.] Der Vektorraum aller auf der Kugel definierten Funktionen ist jedoch bezüglich dieser Wirkung nicht irreduzibel. Um die invarianten Unterräume zu beschreiben führen wir die Kugelfunktionen $Y_{l,m}$ durch

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (7.4.22)$$

ein, wobei $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ ist. Hier ist P_l^m die assoziierte Legendrefunktion, die die verallgemeinerte Legendre Gleichung

$$\frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{dP(z)}{dz} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right] P(z) = 0 \quad (7.4.23)$$

löst. Explizit ist sie durch

$$P_l^m(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2-1)^l \quad (7.4.24)$$

gegeben.

Man kann nun leicht sehen, dass

$$M_3 Y_{l,m} = m Y_{l,m} \quad (7.4.25)$$

gilt. Weiterhin zeigt man leicht, dass $Y_{l,l}$ tatsächlich von M_+ vernichtet wird; in der Tat ist

$$\begin{aligned} Y_{l,l} &\simeq \overline{P}_l^l(\cos \theta) e^{il\phi} \\ &\simeq (1-z^2)^{l/2} \frac{d^{2l}}{dz^{2l}} (z^2-1)^l e^{il\phi} \\ &\simeq \sin^l \theta e^{il\phi}. \end{aligned} \quad (7.4.26)$$

Dann berechnen wir

$$\begin{aligned} M_+ \sin^l \theta e^{il\phi} &= e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \sin^l \theta e^{il\phi} \\ &= l \sin^{l-1} \theta \cos \theta e^{i(l+1)\phi} - l \sin^l \theta \cot \theta e^{i(l+1)\phi} = 0. \end{aligned} \quad (7.4.27)$$

Mit ein wenig mehr Aufwand kann man schliesslich zeigen, dass

$$M_{\pm} Y_{l,m} = C_{l,m,\pm} Y_{l,m\pm 1}. \quad (7.4.28)$$

Die Funktionen $\{Y_{l,m} : m = -l, \dots, l\}$ definieren daher eine irreduzible Darstellung der Lie Gruppe $SO(3)$. Sie stimmt gerade mit \mathcal{D}_l überein.

7.5 $SO(3)$ vs. $SU(2)$

Die Kugelfunktionen beschreiben also alle Darstellungen von $so(3)$, für die j ganz-zahlig ist. Das sind genau jene Darstellungen, die tatsächlich zu Darstellungen der Lie Gruppe $SO(3)$ gehören. Die übrigen Darstellungen von $so(3)$, d.h. jene für die j nicht ganz-zahlig ist, führen nicht zu Darstellungen von $SO(3)$, sondern zu Darstellungen ihrer universellen Überlagerungsgruppe $SU(2)$. Diese Subtilität ist für das Weitere nicht unwichtig; sie soll deshalb ein wenig genauer erklärt werden.

Die Gruppe der unitären (komplexen) 2×2 Matrizen mit Determinante $+1$ wird $SU(2)$ genannt; jedes Element von $SU(2)$ kann man also schreiben als

$$g = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad \text{wobei} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (7.5.1)$$

Wie zuvor kann man daraus ihre Lie Algebra bestimmen (die wir mit $\mathfrak{su}(2)$ bezeichnen wollen — tatsächlich stimmt $\mathfrak{su}(2)$ wie wir gleich sehen werden mit der Lie Algebra von $\mathrm{SO}(3)$ überein): sie besteht aus alle komplexen 2×2 Matrizen A , für die

$$A^\dagger + A = 0, \quad \mathrm{sp}(A) = 0, \quad (7.5.2)$$

d.h. aus allen anti-hermiteschen, spurlosen Matrizen. Ein beliebiges Element von $\mathfrak{su}(2)$ kann man mit Hilfe der Pauli-Matrizen entwickeln; diese sind die spurlosen hermiteschen Matrizen, die explizit durch

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.5.3)$$

definiert. In der Tat kann nun jedes $A \in \mathfrak{su}(2)$ als

$$A \equiv A(\vec{a}) = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_j a_j \equiv -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \quad (7.5.4)$$

geschrieben werden. Insbesondere hat also $\mathfrak{su}(2)$ (reelle) Dimension 3, und eine natürliche Basis ist

$$A_j = -i \frac{\sigma_j}{2}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (7.5.5)$$

Die Matrizen (7.5.3) erfüllen

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (7.5.6)$$

wobei $\varepsilon_{123} = +1$ und ε_{ijk} total antisymmetrisch ist. In Vektorschreibweise gilt also

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathbf{1} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}). \quad (7.5.7)$$

Damit ist

$$[A(\vec{a}), A(\vec{b})] = A(\vec{a} \wedge \vec{b}), \quad (7.5.8)$$

bzw.

$$[A_1, A_2] = A_3 \quad (\text{und zyklisch}). \quad (7.5.9)$$

Die Lie-Algebren $\mathfrak{su}(2)$ und $\mathfrak{so}(3)$ sind also isomorph, wobei der Isomorphismus durch

$$\mathfrak{su}(2) \rightarrow \mathfrak{so}(3), \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega}), \quad (7.5.10)$$

d.h. durch $A_j \mapsto \Omega_j$ gegeben ist. Die irreduziblen Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ sind damit die \mathcal{D}_j aus Kapitel 7.4

Obgleich die Lie Algebren von $\mathrm{SU}(2)$ und $\mathrm{SO}(3)$ übereinstimmen, sind die beiden Gruppen verschieden. Um ihre Relation genauer zu verstehen definieren wir für jeden Vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ die Matrix

$$\tilde{x} = \sum_{j=1}^3 x^j \sigma_j = \begin{pmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{pmatrix}, \quad (7.5.11)$$

wobei σ_j die oben eingeführten Pauli-Matrizen sind. Diese Abbildung ist invertierbar, da

$$x^j = \frac{1}{2} \text{sp}(\tilde{x} \sigma_j), \quad (7.5.12)$$

wie man leicht nachrechnet. Falls \vec{x} ein reeller Vektor ist, dann ist \tilde{x} eine *hermitesche Matrix*; umgekehrt führt jede hermitesche Matrix \tilde{x} vermöge (7.5.12) zu einem reellen Vektor. Schliesslich rechnet man leicht nach, dass die Determinante von \tilde{x} gerade mit dem Skalarprodukt von x übereinstimmt,

$$\det \tilde{x} = -\vec{x} \cdot \vec{x}. \quad (7.5.13)$$

Für jedes Element A von $SU(2)$ betrachten wir nun die Abbildung

$$\tilde{x} \mapsto \tilde{x}' = A \tilde{x} A^\dagger. \quad (7.5.14)$$

Als Abbildung von $\vec{x} \mapsto \vec{x}'$ aufgefasst, ist dies eine lineare Abbildung, die reelle Vektoren auf reelle Vektoren abbildet. [Falls \tilde{x} hermitesch ist, dann ist auch $A \tilde{x} A^\dagger$ hermitesch.] Wegen (7.5.13) lässt diese Transformation die Länge von \vec{x} invariant, und definiert daher eine Drehung. Diese Konstruktion definiert daher einen Gruppenhomomorphism

$$SU(2) \rightarrow SO(3). \quad (7.5.15)$$

Es ist relativ offensichtlich, dass der Kern dieser Transformation gerade $\pm \mathbf{1}_2 \in SU(2)$ ist. Ferner ist der Homomorphismus surjektiv, und daher haben wir

$$SU(2)/\{\pm \mathbf{1}\} \simeq SO(3). \quad (7.5.16)$$

Zu jedem Element in $SO(3)$ gibt es also zwei Elemente in der Überlagerungsgruppe $SU(2)$, die sich gerade um ein Vorzeichen unterscheiden. Jede Darstellung von $SO(3)$ definiert auch eine Darstellung von $SU(2)$ (indem man nämlich die Wirkung von $\pm \mathbf{1} \in SU(2)$ trivial definiert), aber die Umkehrung ist nicht richtig: eine Darstellung von $SU(2)$ ist nur dann eine Darstellung von $SO(3)$, falls $\pm \mathbf{1} \in SU(2)$ trivial wirkt.

Das einfachste Beispiel einer Darstellung von $SU(2)$, die keine Darstellung von $SO(3)$ definiert ist die fundamentale Darstellung von $SU(2)$ als komplexe 2×2 Matrizen. Diese Darstellung ist offenbar zwei-dimensional, und stimmt in der Tat gerade mit $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ überein.

Offensichtlich wirkt in diesem Fall die Matrix $-\mathbf{1}$ nicht trivial, und daher definiert diese Darstellung nicht eine Darstellung auf der Quotientengruppe $SO(3)=SU(2)/\mathbb{Z}_2$.

Im allgemeinen gilt in $SO(3)$

$$R(\vec{e}_3, \varphi) = \exp \left[-i\varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = e^{-iM_3\varphi}, \quad (7.5.17)$$

und daher ist insbesondere auf jedem Darstellungsvektor $|j, m\rangle$

$$U(R(\vec{e}_3, 2\pi))|j, m\rangle = e^{-2\pi i M_3}|j, m\rangle = e^{-2\pi i j}|j, m\rangle. \quad (7.5.18)$$

Wir sehen also, dass die Rotation um 2π (die in $SO(3)$ die Identitätsabbildung sein sollte) nur in Darstellungen, für die j ganzzahlig ist, trivial dargestellt ist: die Darstellungen für die j ganz-zahlig ist, sind umgekehrt durch die Kugelfunktionen explizit realisiert. Diese sind also tatsächlich alle Darstellungen von $SO(3)$!

Falls andererseits j halb-ganz ist, dann wird die Rotation um 2π (die ein nicht-triviales Gruppenelement in der Überlagerungsgruppe $SU(2)$ definiert) nicht trivial dargestellt: diese Darstellungen der Lie Algebra $\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$ definieren nur Darstellungen von $SU(2)$, nicht aber von $SO(3)$. Insbesondere können wir sie daher *nicht* auf dem Raum der Kugelfunktionen finden, da jener eine echte Darstellung von $SO(3)$ trägt.

Man könnte daher also geneigt sein zu glauben, dass die Darstellungen mit j halb-ganz für die Quantenmechanik irrelevant sind; wie wir jedoch jetzt erklären wollen, ist das nicht der Fall.

7.6 Projektive Darstellungen

Bis anhin haben wir nur unitäre Darstellungen der Symmetriegruppe studiert; im allgemeinen ist aber nicht klar, ob eine physikalische Symmetrie tatsächlich auf diese Weise auf dem Hilbertraum realisiert sein muss. Eine mögliche Abschwächung ist relativ direkt einsichtig: wie wir zuvor in Kapitel 4 erklärt haben, wird ein physikalische Zustand nicht durch einen Vektor im Hilbertraum beschrieben, sondern lediglich durch einen Strahl, d.h. durch eine Äquivalenzklasse von Vektoren, die sich durch eine Phase unterscheiden können. Alle Relationen auf dem Hilbertraum müssen deshalb nur bis auf Phasen richtig sein. Im allgemeinen benötigen wir also keine echte Darstellung einer Symmetriegruppe, sondern es genügt, wenn die Symmetriegruppe **projektiv** dargestellt ist, d.h. falls gilt

$$U(g_1)U(g_2) = c(g_1, g_2)U(g_1g_2) , \quad (7.6.1)$$

wobei $c(g_1, g_2)$ eine Phase ist. Diese Phasen können nicht beliebig gewählt sein: da die Operatorprodukte immer noch assoziativ sein müssen, gilt notwendigerweise die sogenannte Kozykelbedingung

$$c(g_1, g_2g_3) c(g_2, g_3) = c(g_1g_2, g_3) c(g_1, g_2) . \quad (7.6.2)$$

Es gibt eine relativ offensichtliche Art, solche Phasen künstlich zu erzeugen: sei $U(g)$ eine echte Darstellung von g , dann definiere

$$\hat{U}(g) = U(g) c(g) , \quad (7.6.3)$$

wobei $c(g)$ für jedes $g \in G$ eine Phase ist. Man kann leicht nachrechnen, dass $\hat{U}(g)$ dann eine projektive Darstellung definiert, wobei

$$c(g, h) = \frac{c(g) c(h)}{c(gh)} . \quad (7.6.4)$$

Umgekehrt, kann man versuchen aus einer projektiven Darstellung durch diese Modifikation wiederum eine echte Darstellung zu erhalten. Manchmal wird das aber nicht möglich sein: man spricht dann von einer (echt) projektiven Darstellung der Gruppe.

Man kann zeigen, dass die projektive Darstellung einer Lie Gruppe G in eins zu eins Korrespondenz zu den echten Darstellung der universellen Überlagerungsgruppe \tilde{G} von G stehen. Die echten Darstellungen der Überlagerungsgruppe sind wiederum in eins zu eins Korrespondenz zu den Darstellungen der Lie Algebra von G . Die Darstellungen, die also für die Quantenmechanik relevant sind, sind daher die Darstellungen der Lie Algebra der Symmetriegruppe. Ob diese Darstellungen tatsächlich zu echten Darstellungen der Symmetriegruppe (oder lediglich zu Darstellungen ihrer Überlagerungsgruppe gehören) ist für die Quantenmechanik irrelevant.

In dem Fall der Rotationssymmetrie ist die universelle Überlagerungsgruppe von $SO(3)$ $SU(2)$. Die Darstellungen von $SU(2)$ werden durch \mathcal{D}_j parametrisiert. Falls j ganz-zahlig ist, definiert diese Darstellung tatsächlich eine echte Darstellung von $SO(3)$; andernfalls ist die Darstellung lediglich eine projektive Darstellung von $SO(3)$. Da für die Quantenmechanik lediglich die projektiven Darstellungen wichtig sind, bedeutet dies, dass alle diese Darstellungen gleichermassen relevant sind. Insbesondere können wir uns also nicht einfach auf j ganz-zahlig einschränken.

7.7 Der Spin des Elektrons

Die theoretische Möglichkeit, dass die Drehimpulsquantenzahl j eines System halbzahlig ist, wird vom Elektron verwirklicht. Evidenz dafür: ein Eigenraum eines rotationssymmetrischen Hamiltonoperators (wie der der Elektronen eines Atoms) ist es ebenfalls und trägt somit eine projektive Darstellung der $SO(3)$, die i.A irreduzibel ist: \mathcal{D}_j . Die Vielfachheit (Entartung) des Eigenwerts ist damit $2j + 1$; sie wird durch eine nicht rotationsinvariante Störung des Hamiltonoperators, wie z.B. infolge eines äusseren Magnetfelds \vec{B} , aufgehoben (Zeeman-Effekt):

$$\begin{array}{ccc}
 \text{—} & \begin{array}{c} \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \end{array} & \left. \vphantom{\begin{array}{c} \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \end{array}} \right\} 2j + 1 \\
 \text{ohne Störung} & \text{mit Störung} &
 \end{array}$$

Aus der Beobachtung der Spektren findet man Fälle mit $2j + 1$ gerade, also j halbzahl. Um diese Entartung zu erklären führt man einen zusätzliche Freiheitsgrad ein, den man den **Spin** nennt. Der Hilbertraum eines einzelnen Elektrons ist dann nicht einfach nur $L^2(\mathbb{R}^3)$, sondern (Pauli 1924)

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2 . \tag{7.7.1}$$

Auf diesem Raum wirkt dann $V \in SU(2)$ gemäss

$$U(V) = U_0(R(V)) \otimes V , \tag{7.7.2}$$

wobei hier $U_0(R)$ die Darstellung von $R \in SO(3)$ auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ ist (siehe (7.1.5)). Für den Fall des Elektrons transformiert sich der interne Freiheitsgrad also in der Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$.

In dieser (fundamentalen) Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ ist $M_j = iU(A_j)$ gegeben durch

$$M_j = \frac{\sigma_j}{2} . \quad (7.7.3)$$

Damit ist

$$M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.7.4)$$

und die Basis (7.4.19) ist gerade die Standardbasis für \mathbb{C}^2 ,

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |e_3\rangle , \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv | - e_3 \rangle : \quad (7.7.5)$$

Spin nach oben, bzw. unten bezüglich der Quantisierungsrichtung e_3 . Eigenbasen für M_1 bzw. M_2 sind

$$\begin{aligned} M_1 : \quad |e_1\rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} , & | - e_1 \rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \\ M_2 : \quad |e_2\rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} , & | - e_2 \rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

7.8 Wigner's Theorem

Wie wir in Kapitel 7.6 gesehen haben, muss die Darstellung einer Symmetriegruppe auf dem Hilbertraum der Quantenmechanik nicht notwendigerweise eine echte Darstellung sein; es genügt, wenn die Darstellung projektiv ist. Bis anhin haben wir jedoch immer implizit angenommen, dass die Darstellung unitär ist. Vom Gesichtspunkt der Quantenmechanik kommt es jedoch lediglich darauf an, dass die Wahrscheinlichkeiten

$$\frac{|\langle \phi | \psi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle} \quad (7.8.1)$$

unter der Symmetrieoperation invariant sind. Offensichtlich gilt dies, falls die Symmetrie durch unitäre Operatoren dargestellt ist, da dann jedes Skalarprodukt $\langle \phi | \psi \rangle$ invariant ist. Im allgemeinen genügt es jedoch auch, wenn die Symmetrie durch **anti-unitäre** Operatoren $U(g)$ dargestellt wird. Ein anti-unitärer Operator hat die Eigenschaft, dass

$$\langle U(g)\phi | U(g)\psi \rangle = \overline{\langle \phi | \psi \rangle} = \langle \psi | \phi \rangle . \quad (7.8.2)$$

In der Tat hat man damit alle Möglichkeiten erschöpft; das ist der Inhalt des **Wigner'schen Theorems**: Sei G eine Gruppe die auf den Zuständen des Hilbertraums \mathcal{H} so wirkt, dass die Wahrscheinlichkeiten (7.8.1) erhalten bleiben. Dann kann man die Wirkung von $g \in G$ als $\psi \mapsto U(g)\psi$ schreiben, wobei jedes $U(g)$ ein unitärer oder anti-unitärer Operator ist, und

$$U(gh) = c(g, h) U(g) U(h) \quad (7.8.3)$$

gilt, wobei $c(g, h)$ die Kozykelphasen sind.

Es gibt in der Tat physikalisch wichtige Beispiele von Symmetrien, die durch anti-unitäre (und nicht durch unitäre) Operatoren dargestellt werden. Viele physikalische Systeme sind zum Beispiel invariant unter Zeitumkehr. Wir definieren die Wirkung des Zeitumkehroperators \mathcal{T} auf den Wellenfunktionen durch

$$(\mathcal{T}\Psi)(t, \mathbf{x}) = \bar{\Psi}(-t, \mathbf{x}) . \quad (7.8.4)$$

Die komplexe Konjugation der Wellenfunktion ist hier nötig, damit weiterhin Lösungen der Schrödingergleichung auf Lösungen der Schrödingergleichung abgebildet werden. Da \mathcal{T} diese Konjugation involviert, ist der Operator auf dem Raum der Wellenfunktionen anti-unitär und nicht unitär. Ein anderes wichtiges Beispiel ist die Ladungskonjugation, die auch durch einen anti-unitären Operator auf dem Hilbertraum dargestellt wird.

Die meisten Symmetrien werden jedoch durch unitäre Operatoren dargestellt; dies ist zum Beispiel eine Folge des **Weyl'schen Lemmas**: der Operator $U(g^2)$ ist immer unitär für alle $g \in G$. In der Tat folgt aus (7.8.3), dass

$$U(g^2) = c(g, g)U(g)U(g) . \quad (7.8.5)$$

Falls $U(g)$ unitär ist, so ist natürlich auch das Produkt $U(g)U(g)$ unitär; falls $U(g)$ anti-unitär ist, gilt

$$\langle U(g)^2\phi|U(g)^2\psi\rangle = \overline{\langle U(g)\phi|U(g)\psi\rangle} = \langle\phi|\psi\rangle , \quad (7.8.6)$$

d.h. $U(g)^2$ ist ebenfalls unitär. Da $c(g, g)$ lediglich eine Phase ist, so folgt, dass auch $U(g^2)$ unitär ist.

Zum Beispiel folgt aus diesem Resultat, dass jede Rotation durch einen unitären Operator dargestellt werden muss, da sich jede Rotation als Quadrat der Rotation um den halben Winkel schreiben lässt.

8 Das Wasserstoffatom

Ein anderes wichtiges Problem, das exakt gelöst werden kann, ist das Wasserstoffatom. Das Wasserstoffatom ist ein 2-Körperproblem (Atomkern plus Elektron) mit rotations-symmetrischem 2-Körperpotential. Es ist also einfach die quantenmechanische Version des Keplerproblems.

8.1 Relativkoordinaten

Wir wiederholen zuerst das klassische Problem: Sei der Hamiltonian für zwei wechselwirkende massive Teilchen gegeben durch

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) , \quad (8.1.1)$$

wobei m_1 und m_2 die beiden Massen sind, und die Wechselwirkung durch das Potential $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ beschrieben ist. Wir definieren die Schwerpunkts- und Relativ-Koordinaten \vec{X} und \vec{x}

$$\vec{x} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{X} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} . \quad (8.1.2)$$

Entsprechend definieren wir die konjugierten Impulse

$$\vec{p} = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1 + m_2} , \quad \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 . \quad (8.1.3)$$

Ausserdem definieren wir die reduzierte Masse μ sowie die totale Masse M durch

$$\mu = m = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} , \quad M = m_1 + m_2 . \quad (8.1.4)$$

In der Quantentheorie postulieren wir nun die üblichen Vertauschungsregeln für Impuls und Ort

$$[r_i^{(\nu)}, p_j^{(\mu)}] = i\hbar \delta_{ij} \delta^{\nu\mu} , \quad (8.1.5)$$

wobei der label $\nu, \mu \in \{1, 2\}$ die beiden Teilchen beschreibt und $i, j \in \{1, 2, 3\}$ die Raumrichtungen des \mathbb{R}^3 bezeichnet. Die Ortsoperatoren des einen Teilchens kommutieren also mit den Impulsoperatoren des anderen, aber für jedes Teilchen separat gelten die üblichen Vertauschungsregeln $[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$. Falls wir die Raumkomponenten von \vec{x} und \vec{p} durch x_i und p_j , sowie jene von \vec{X} und \vec{P} durch X_i und P_j bezeichnen, folgt dann daraus

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} , \quad [X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} . \quad (8.1.6)$$

Auf dem Raum der Wellenfunktionen ($L^2(\mathbb{R}^6)$) können diese Operatoren also durch die Differentialoperatoren

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{x}} , \quad \vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{X}} \quad (8.1.7)$$

dargestellt werden. Der Hamiltonoperator kann entsprechend zerlegt werden

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(|\vec{x}|) . \quad (8.1.8)$$

Die zeit-abhängige Schrödingergleichung kann nun dadurch separiert werden, dass wir den Ansatz machen

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{x}, \vec{X}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{X}} e^{-i\hbar K^2 t / 2M} e^{-iEt/\hbar} \psi(\vec{x}) . \quad (8.1.9)$$

Das resultierende Relativproblem ist dann

$$\left[\frac{p^2}{2\mu} + V(r) \right] \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) , \quad (8.1.10)$$

wobei wir $r = |\vec{x}|$ geschrieben haben. Die totale Energie ist die Kombination $E_{\text{tot}} = E + \hbar^2 K^2 / 2M$.

8.2 Coulomb-Potential

Im folgenden sind wir insbesondere an dem Fall interessiert, wo

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (8.2.1)$$

ist. Dieses Potential beschreibt die Wechselwirkung eines Elektrons der Ladung $-e$ mit einem Atomkern der Ladung Ze ; für den Fall des Wasserstoffatoms gilt $Z = 1$ aber für das Weitere ist diese Spezialisierung nicht wichtig. Da der Hamiltonoperator rotations-symmetrisch ist, vertauscht er mit den Generatoren von $\text{so}(3)$, d.h. den infinitesimalen Rotationen. Auf dem Raum der Wellenfunktionen wirken diese Generatoren als

$$\vec{M} = -i\vec{x} \wedge \nabla_{\vec{x}} . \quad (8.2.2)$$

Wie wir in Kapitel 7.2 gesehen hatten, sind die infinitesimalen Rotation von der Form $\vec{x} \mapsto \vec{x} + i\vec{\omega} \wedge \vec{x}$. Auf dem Raum der Funktionen wirken diese also wie (siehe (7.1.5))

$$f(\vec{x}) \mapsto f(\vec{x} - i\vec{\omega} \wedge \vec{x}) = f(\vec{x}) - i(\vec{\omega} \wedge \vec{x}) \cdot \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = f(\vec{x}) - i\vec{\omega} \cdot (\vec{x} \wedge \nabla_{\vec{x}} f) . \quad (8.2.3)$$

Der Rotationsgenerator \vec{M} ist daher also wie (8.2.2) definiert. Bis auf einen Faktor stimmt also \vec{M} mit dem Drehimpulsoperator \vec{L}

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} = -i\hbar \vec{x} \wedge \nabla_{\vec{x}} = \hbar \vec{M} \quad (8.2.4)$$

überein.

Wie wir in Kapitel 7.4 gesehen haben, spielt in der Analyse der Darstellungen der Rotationsgruppe der Casimir-Operator \vec{M}^2 eine wichtige Rolle. Auf dem Raum der Wellenfunktionen wirkt dieser Operator nun wie

$$\vec{M}^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = -\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm}x_j\partial_kx_l\partial_m \quad (8.2.5)$$

$$= -(\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl})(x_jx_l\partial_k\partial_m + \delta_{kl}x_j\partial_m) \quad (8.2.6)$$

$$= -\vec{x}^2\Delta - x_j\partial_j + x_mx_l\partial_l\partial_m + 3x_j\partial_j \quad (8.2.7)$$

$$= -\vec{x}^2\Delta + x_m\partial_mx_l\partial_l + x_j\partial_j . \quad (8.2.8)$$

In Polarkoordinaten ist

$$x_i \partial_i = \vec{x} \cdot \nabla_{\vec{x}} = r \frac{\partial}{\partial r} \quad (8.2.9)$$

und daher folgt

$$\vec{M}^2 = -\vec{x}^2 \Delta + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} = -\vec{x}^2 \Delta + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r, \quad (8.2.10)$$

bzw.

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2. \quad (8.2.11)$$

Andererseits sind die Eigenwerte von \vec{M}^2 gerade durch $l(l+1)$ gegeben (siehe Kapitel 7.4), wobei für die Darstellungen auf dem Funktionenraum $L^2(\mathbb{R}^6)$ nur $l = 0, 1, \dots$ auftreten können. (Diese Funktionen definieren ja immer eine echte Darstellung der Rotationsgruppe $SO(3)$.) In der Tat sind die Funktionen mit Eigenwert $l(l+1)$ gerade die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ mit $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Wenn wir also den Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = Y_{lm}(\theta, \phi) \psi(r) \quad (8.2.12)$$

machen, dann wird die Schrödingergleichung des Relativproblems ($m = \mu$)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (8.2.13)$$

einfach

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \psi(r) - \frac{1}{r^2} l(l+1) \psi(r) \right) + V(r) \psi(r) = E \psi(r). \quad (8.2.14)$$

Wir haben damit unser ursprüngliches Problem auf eine gewöhnliche Differentialgleichung einer Variablen zurückgeführt. Dieses ‘radiale’ Eigenwertproblem vereinfacht sich, wenn wir

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (8.2.15)$$

definieren:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \mathcal{V}(r) \right) u = \varepsilon u, \quad (8.2.16)$$

wobei wir

$$\mathcal{V}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r), \quad \varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (8.2.17)$$

gesetzt haben. Wir diskutieren nun das Verhalten der Lösung bei $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$.

8.2.1 Das Verhalten bei $r = 0$

Für $r \rightarrow 0$ führt (8.2.16) auf

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2}u = 0 \quad (8.2.18)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$u(r) = ar^{l+1} + br^{-l} . \quad (8.2.19)$$

wobei wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $l \geq 0$ setzen können. Falls $l > 0$, ist diese Lösung bei $r = 0$ quadratintegrierbar, nur falls $b = 0$. Auch für $l = 0$ ist die Lösung $r^{-l} = 1$ zu verwerfen: dann ist nach (8.2.15) $\psi(\vec{x}) = 1/r$, also $-\Delta\psi = 4\pi\delta$ nicht eine Lösung der Schrödingergleichung. Die verbleibende Lösung ist bis auf die Konstante a bestimmt. Damit hat (8.2.16) für jedes ε nur eine einzige Lösung $u(\varepsilon, r) \approx r^{l+1}$, ($r \rightarrow 0$): die "reguläre Lösung".

8.2.2 Das Verhalten bei $r \rightarrow \infty$

Bei $r \rightarrow \infty$ reduziert sich (8.2.16) auf

$$-u'' = \varepsilon u \quad (8.2.20)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$ae^{ikr} + be^{-ikr} , \quad (k = \sqrt{\varepsilon}) . \quad (8.2.21)$$

Insbesondere ist zu erwarten, dass die reguläre Lösung $u(\varepsilon, r)$ von (8.2.16) für $r \rightarrow \infty$ die asymptotische Form

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{ikr} + b(\varepsilon)e^{-ikr} \quad (8.2.22)$$

besitzt. Damit $u(\varepsilon, \cdot) \in L^2(0, \infty)$ muss erstens $\varepsilon < 0$: wir legen dann k fest durch

$$k = i\kappa , \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0 , \quad (8.2.23)$$

also $e^{\pm ikr} = e^{\mp \kappa r}$. Zweitens muss $b(\varepsilon) = 0$ sein, da die zugehörige Lösung exponentiell anwächst: die Eigenwerte ε ergeben sich als **Nullstellen** der Funktion $b(\varepsilon)$. Dann reduziert sich (8.2.22) auf

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{-\kappa r} , \quad (r \rightarrow \infty) . \quad (8.2.24)$$

Die bisherige Analyse war in der Tat unabhängig von der speziellen Form des Potentials $V(r)$. Wir behandeln nun den Fall (8.2.1) des Coulombpotentials

$$\mathcal{V}(r) = -\frac{\gamma}{r} , \quad \gamma = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} . \quad (8.2.25)$$

Die allgemeine Diskussion motiviert den Ansatz

$$u(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k r^k . \quad (8.2.26)$$

Einsetzen in die Differentialgleichung liefert unter Benützung von (8.2.23) die einfache Rekursion

$$c_{k+1} = c_k \frac{\gamma - 2\kappa k}{l(l+1) - k(k+1)}, \quad (k = l+1, l+2, \dots). \quad (8.2.27)$$

Falls die Rekursion nicht abbricht (d.h. alle $c_k \neq 0$), so ist für $k \rightarrow \infty$

$$c_{k+1} \approx c_k \frac{2\kappa}{k+1}, \quad \text{also} \quad c_k \approx C \frac{(2\kappa)^{2k}}{k!}, \quad (8.2.28)$$

was auf

$$u(r) \approx e^{-\kappa r} \cdot C e^{2\kappa r} = C e^{\kappa r} \quad (8.2.29)$$

führt. Die zugehörige Lösung $u(r) \sim e^{-\kappa r} e^{2\kappa r}$ ist dann nicht quadratintegrierbar. [Die Situation ist also genauso wie in der ‘konventionellen Lösung’ des harmonischen Oszillators — siehe Kapitel 6.1.1.] Falls (8.2.27) hingegen abbricht, d.h. falls für ein n

$$c_n \neq 0, \quad c_{n+1} = 0, \quad (8.2.30)$$

so ist die Lösung eine Eigenfunktion. [Die resultierenden Polynome sind die sogenannten zugeordneten Laguerre Polynome.] Die Bedingung dafür ist

$$\kappa_n = \frac{\gamma}{2n}, \quad (n = l+1, l+2, \dots), \quad (8.2.31)$$

d.h.

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \kappa_n^2 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (8.2.32)$$

(Schrödinger 1926). Dies ist die von Bohr im Rahmen der ‘alten Quantentheorie’ hergeleitete Formel für die Energieniveaux — siehe Kapitel 1.3.

Da es für jedes l $2l+1$ verschiedene Eigenfunktionen Y_{lm} gibt (die durch $m = -l, \dots, l$ parametrisiert werden) tritt jedes dieser Energieniveaux mit der Multiplizität

$$D_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (8.2.33)$$

auf. Die Quantenzahlen n, l, m heissen Haupt-Quantenzahl n , Neben- oder Bahndrehimpuls-Quantenzahl l , und magnetische Quantenzahl m . Die zusätzliche Entartung in l ist eine Konsequenz der dynamischen Symmetrie im Coulombpotential. Wird der Spin berücksichtigt, (siehe später) verdoppelt sich die Entartung, $D_n = 2n^2$.

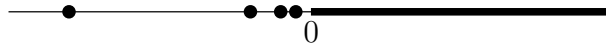
Fundamental ist die Existenz eines energetisch tiefsten Zustands ($l = 0, n = 1$): die Energie des H-Atom ist nach unten beschränkt und es ist damit stabil! Dies im Gegensatz zum klassischen H-Atom, wo das (beschleunigte) Elektron beliebig viel Energie durch Ausstrahlung abgeben würde (vgl. Elektrodynamik). Die Wellenfunktion des Grundzustandes ist nach (8.2.26)

$$u(r) = e^{-\kappa_1 r}, \quad \kappa_1 = \frac{\gamma}{2} = \frac{me^2}{\hbar^2}, \quad (8.2.34)$$

also (bis auf Normierung), da Y_0 eine Konstante ist,

$$\psi(\vec{x}) = e^{-|\vec{x}|/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (8.2.35)$$

Der Bohr-Radius a ist der Radius des Atoms in der Bohrschen Theorie. Durch (8.2.32) sind alle Eigenwerte von H gefunden (ohne Beweis). Damit ist aber (im Unterschied zum harmonischen Oszillator) noch nicht das gesamte Spektrum $\sigma(H)$ ausgeschöpft, welches (wie beim freien Teilchen) auch einen kontinuierlichen Anteil $[0, \infty)$ besitzt:



Die Übergänge zwischen den Niveaus involvieren $\Delta l = 1$ (siehe später) und gehören zu einer der Sequenzen in der Tabelle 1; siehe auch Abbildung 12 für eine graphische Darstellung der involvierten Zustände.

Endniveau n	Name	Energiebereich
$n = 1$	Lyman	UV
$n = 2$	Balmer	sichtbar
$n = 3$	Paschen	IR
$n = 4$	Bracket	IR
$n = 5$	Pfund	IR

Tabelle 1: Übergänge zwischen Niveaus

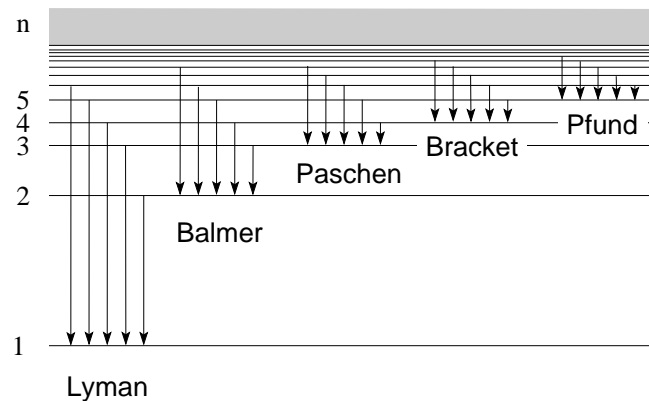


Abbildung 12: Übergänge im H-Atom: Lyman-, Balmer-, Paschen-, Bracket- und Pfund-Serien.

8.3 Dynamische Symmetrie

Der dynamischen Symmetrie (die für die Unabhängigkeit der Energie von der Drehimpulsquantenzahl l verantwortlich ist) liegt eine besondere Form des Kraftgesetzes (des Potentials) zugrunde, hier $V(r) \propto 1/r$. Ein Potential $1/r^{1+\varepsilon}$, $\varepsilon \neq 0$ hat zwar die geometrische Rotationssymmetrie, nicht aber eine zusätzliche dynamische Symmetrie. Im Fall des H-Atoms hat die dynamische Symmetrie ein klassisches Analogon, den (erhaltenen) Runge-Lenzvektor. Dies muss jedoch nicht immer der Fall sein: eine quantenmechanisch dynamische Symmetrie muss nicht unbedingt ein klassisches Analogon haben.

Zur Erinnerung betrachten wir das Keplerproblem

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{\kappa}{r}, \quad (8.3.1)$$

wobei μ die reduzierte Masse bezeichnet und κ für das verallgemeinerte Wasserstoffatom zu $\kappa = Ze^2$ gewählt wird. Klassische Bahnen sind geschlossene Ellipsen (vgl. Abb. 13) mit Halbachsen a und b und Exzentrizität $e = (1 - b^2/a^2)^{1/2}$. Erhaltungsgrößen sind die Energie $E = -\kappa/2a$ und der Drehimpuls \vec{L} ; die Richtung \hat{L} legt die Bahnebene fest, der Betrag L bestimmt die Exzentrizität via $L^2 = \mu\kappa a(1 - e^2)$. Die Bahn ist somit durch die Erhaltungsgrößen E und \vec{L} festgelegt. Zusätzlich zu H und \vec{L} ist auch der Runge-Lenzvektor \vec{J} erhalten,

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{1}{\mu} \vec{p} \wedge \vec{L} - \frac{\kappa}{r} \vec{x}, & |\vec{J}| &= \kappa e, & \vec{J} \cdot \vec{L} &= 0, \\ \vec{J}^2 &= \frac{2H}{\mu} L^2 + \kappa^2. \end{aligned} \quad (8.3.2)$$

Der Umstand, dass \vec{J} konstant ist, impliziert, dass das Perihel sich nicht bewegt; dies ist eine Besonderheit des $1/r$ -Potentials.

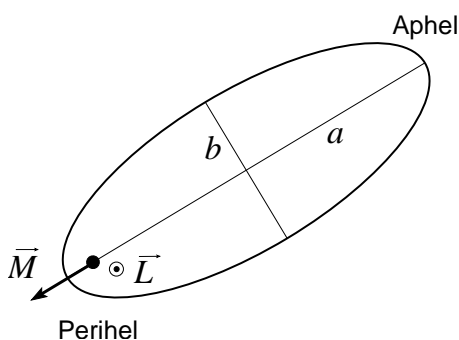


Abbildung 13: Der Runge-Lenz Vektor \vec{J} zeigt vom Brennpunkt zum Perihel und ist eine erhaltene Grösse im Keplerproblem. Störungen des $1/r$ -Potentials verursachen eine Drehung von \vec{J} ; die Beobachtung der Periheldrehung des Merkurs war eine der ersten experimentellen Bestätigungen der ART.

Für $V \propto 1/r^{1+\varepsilon}$ resultiert eine Periheldrehung; ein berühmtes Beispiel sind die Korrekturen zum Kepler Problem infolge der Allgemeinen Relativitäts Theorie (ART); die Periheldrehung des Merkurs war eine der ersten experimentellen Bestätigungen der ART.

In der Quantenmechanik definieren wir den Pauli-Lenz Vektor

$$\vec{J} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} \wedge \vec{L} - \vec{L} \wedge \vec{p}) - \kappa \frac{\vec{x}}{r}. \quad (8.3.3)$$

Diese Definition ist so gewählt, dass \vec{J} weiterhin mit dem Hamiltonoperator vertauscht; die Eigenzustände des Hamiltonoperators zu vorgegebenem Eigenvektor (d.h. die Lösungen der zeit-unabhängigen Schrödingergleichung zu festem E) transformieren sich also ineinander unter der Wirkung von \vec{J} .

Es gilt noch immer $\vec{J} \cdot \vec{L} = 0$, wobei \vec{L} der übliche Drehimpulsvektor

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} \quad (8.3.4)$$

ist (der natürlich auch mit dem Hamiltonoperator vertauscht). Ausserdem findet man

$$\vec{J}^2 = \frac{2H}{\mu} (L^2 + \hbar^2) + \kappa^2, \quad (8.3.5)$$

was sich von dem klassischen Resultat um den Zusatzterm $\propto \hbar^2$ unterscheidet.

Die Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator vertauschen, beinhalten also die drei Generatoren der Drehgruppe M_i , die die Lie Algebra $\mathfrak{su}(2)$ generieren und die Vertauschungsrelationen

$$[M_i, M_j] = i\epsilon_{ijk} M_k \quad (8.3.6)$$

erfüllen. (Bis auf Normierung sind das gerade die drei Komponenten des Drehimpulses.) Ausserdem haben wir die drei Komponenten des Pauli-Lenz Vektors \vec{J} . Da letzterer ein Vektor ist, erwartet man, dass er sich in der Vektordarstellung von $\mathfrak{su}(2)$ transformiert, also dass

$$[M_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k \quad (8.3.7)$$

gilt; man prüft leicht nach, dass das auch in der Quantenmechanik richtig ist. Schliesslich berechnet man den Kommutator der Komponenten von \vec{J} und findet

$$[J_i, J_j] = -\frac{2H}{\mu} i\hbar^2 \epsilon_{ijk} M_k. \quad (8.3.8)$$

Wir betrachten zunächst den Fall, wo der Eigenwert E von H negativ ist. Dann reskalieren wir J_i als

$$K_i = \sqrt{\frac{\mu}{-2H}} \frac{1}{\hbar} J_i \quad (8.3.9)$$

(da E negativ ist, ist der Vorfaktor reell, und K_i ist immer noch ein selbst-adjungierter Operator), und erhalten dann die kombinierten Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} [K_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk} M_k, \\ [M_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk} K_k, \\ [M_i, M_j] &= i\epsilon_{ijk} M_k. \end{aligned} \quad (8.3.10)$$

Schliesslich definieren wir

$$\vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{M} + \vec{K}) \quad \text{und} \quad \vec{D} = \frac{1}{2} (\vec{M} - \vec{K}) . \quad (8.3.11)$$

Die beiden Sätze von Operatoren S_i und D_j vertauschen

$$[S_i, D_j] = 0 \quad (8.3.12)$$

und beide bilden gerade jeweils die Lie Algebra von $\mathfrak{su}(2)$:

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} S_k , \quad [D_i, D_j] = i\epsilon_{ijk} D_k . \quad (8.3.13)$$

Die Lie Algebra dieser Operatoren ist also gerade $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$, was tatsächlich zu der Lie Algebra von $\mathfrak{so}(4)$ isomorph ist (Übungsaufgabe). Falls wir die positiven Eigenwerte von H betrachten, dann ist die resultierende Lie Algebra nicht $\mathfrak{so}(4)$, sondern die Lie Algebra der Lorentzgruppe $\mathfrak{so}(1, 3)$.

Für den Fall, dass E negativ ist, folgt nun aus (8.3.5) dass

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(K^2 + M^2 + 1)} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2((\vec{S} - \vec{D})^2 + (\vec{S} + \vec{D})^2 + 1)} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2\vec{S}^2 + 2\vec{D}^2 + 1)} . \end{aligned} \quad (8.3.14)$$

Die möglichen Eigenwerte von \vec{S}^2 und \vec{D}^2 folgen wiederum aus der Darstellungstheorie von $\mathfrak{su}(2)$:

$$\vec{S}^2 = s(s+1) , \quad \vec{D}^2 = d(d+1) , \quad (8.3.15)$$

wobei s und d halb-ganze Zahlen sind. [Weder \vec{S} noch \vec{D} haben eine direkte Interpretation als Rotationen im Raum; von daher ist nicht notwendigerweise klar, dass nur ganz-zahlige Spins erlaubt sind.] Weiterhin wissen wir, dass $\vec{K} \cdot \vec{M} = 0$, und daher, dass

$$(\vec{S} - \vec{D}) \cdot (\vec{S} + \vec{D}) = \vec{S}^2 - \vec{D}^2 = 0 . \quad (8.3.16)$$

Dies impliziert daher also, dass $s = d$. Die möglichen Energieeigenwerte sind also

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(4s(s+1) + 1)} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2s+1)^2} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} \quad \text{mit} \quad n = 2s + 1 . \end{aligned} \quad (8.3.17)$$

Die möglichen Werte von n sind also $n = 1, 2, 3, \dots$. Die Dimension der Eigenräume ist

$$\dim_{E_n} = (2s+1)(2d+1) = (2s+1)^2 = n^2 \quad (8.3.18)$$

in Übereinstimmung mit dem, was wir zuvor gesehen hatten. Wir haben also das gesamte Spektrum (zusammen mit seinen Multiplizitäten) aus Symmetrieüberlegungen bestimmen können!

9 Drehimpulsaddition

In vielen Fällen ist ein Quantensystem aus mehreren Teilsystemen zusammengesetzt. Wir wollen verstehen, wie sich der Zustandsraum eines solchen Quantensystems durch jene seiner Teilsysteme beschreiben lässt. Das relevante Konzept ist jenes eines Tensorproduktes.

9.1 Tensorprodukte

Der Hilbertraum eines Systems, das aus zwei Teilsystemen zusammengesetzt ist, ist das Tensorprodukt der Hilberträume der Teilsysteme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} . \quad (9.1.1)$$

Ein einfaches Beispiel davon haben wir gerade gesehen: der Hilbertraum des 2-Körperproblems war $L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Anders ausgedrückt: der Hilbertraum der 2-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ wird aufgespannt durch die (Tensor-)produkte

$$\psi^{(1)}(\vec{x}) \psi^{(2)}(\vec{x}_2) = (\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}) (\vec{x}_1, \vec{x}_2) . \quad (9.1.2)$$

Eine einfache Art, sich das Tensorprodukt vorzustellen, ist wie folgt. Das Tensorprodukt ist der Vektorraum der endlichen Summen

$$\sum_{j=1}^l v_j \otimes w_j \quad v_j \in \mathcal{H}^{(1)} , \quad w_j \in \mathcal{H}^{(2)} . \quad (9.1.3)$$

Die Menge dieser endlichen Summen trägt natürlicherweise eine Vektorraumstruktur: es ist offensichtlich, wie die Summe zweier solcher Ausdrücke definiert werden kann, und die skalare Multiplikation ist durch

$$\lambda \left(\sum_{j=1}^l v_j \otimes w_j \right) = \sum_{j=1}^l (\lambda v_j) \otimes w_j = \sum_{j=1}^l v_j \otimes (\lambda w_j) \quad (9.1.4)$$

erklärt, wobei wir benützen, dass $\lambda v_j \in \mathcal{H}^{(1)}$ und $\lambda w_j \in \mathcal{H}^{(2)}$, da $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ Vektorräume sind.

Man kann leicht zeigen, dass falls die beiden Hilberträume $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ jeweils eine abzählbare Basis besitzen, die wir mit $e_i^{(1)}$ und $e_i^{(2)}$ bezeichnen (wobei $i = 1, 2, \dots$), dass dann eine (abzählbare) Basis für das Tensorprodukt durch

$$e_i^{(1)} \otimes e_j^{(2)} , \quad i = 1, 2, \dots , \quad j = 1, 2, \dots \quad (9.1.5)$$

gegeben ist. Insbesondere ist also im endlich-dimensionalen Fall die Dimension des Tensorproduktes gerade das Produkt der Dimensionen der beiden Vektorräume.

Im Kontext der Quantenmechanik interessieren wir uns für Hilberträume. Das Skalarprodukt für das Tensorprodukt wird erklärt durch

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle \cdot \langle w_1 | w_2 \rangle . \quad (9.1.6)$$

Dieses Produkt wird dann linear bzw. anti-linear auf beliebige endliche Summen solcher Ausdrücke fortgesetzt. Man zeigt leicht, dass das resultierende Skalarprodukt positiv-definit ist, falls die Skalarprodukte der beiden Faktorthorien diese Eigenschaft besitzen.

Falls die $e_i^{(1)}$ und $e_i^{(2)}$ eine Orthonormalbasis (ONB) für $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ definieren, dann definiert (9.1.5) gerade auch eine ONB für das Tensorprodukt.

9.2 Addition von Drehimpulsen

Wir betrachten nun den Fall, dass beide separaten Hilberträume eine (projektive) Darstellung der Drehgruppe tragen. Zum Beispiel ist das für das 2-Körperproblem der Fall, da der Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ eine (reduzible) Darstellung der Drehgruppe trägt — diese ist durch (7.1.5) definiert. In vielen Situationen ist jedoch der Hamiltonoperator des Gesamtsystems nicht unter diese separaten Rotationen invariant (d.h. der Hamiltonoperator vertauscht nicht mit den separaten infinitesimalen Rotationsgeneratoren), sondern lediglich unter der gemeinsamen Rotationen. In diesem Fall vertauscht der Hamiltonoperator also nur mit den infinitesimalen Generatoren der gemeinsamen Rotationen. Wir wollen nun verstehen, wie diese explizit definiert sind.

Wir betrachten die Situation, wo die beiden Hilberträume $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ Darstellungen $U^{(i)}$ der Rotationsgruppe $SO(3)$ (bzw. ihrer universellen Überlagerungsgruppe $SU(2)$) tragen. Für jedes $g \in SU(2)$ haben wir also lineare Operatoren

$$U^{(i)}(g) : \mathcal{H}^{(i)} \rightarrow \mathcal{H}^{(i)} \quad (9.2.1)$$

die die Gruppenrelationen erfüllen

$$U^{(i)}(g) U^{(i)}(h) = U^{(i)}(gh) , \quad (9.2.2)$$

wobei $i = 1, 2$. Auf dem Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ haben wir deshalb eine Darstellung der Produktgruppe $SU(2) \times SU(2)$ durch

$$(g, h) \mapsto U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(h) , \quad (9.2.3)$$

wobei die rechte Seite auf ein Element $\psi_1 \otimes \psi_2$ als

$$(U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(h)) (\psi_1 \otimes \psi_2) = ((U^{(1)}(g)\psi_1) \otimes (U^{(2)}(h)\psi_2)) \quad (9.2.4)$$

wirkt. [Die Fortsetzung auf ein beliebiges Element des Tensorproduktraumes erfolgt unter Benützung der Linearität. Man rechnet leicht nach, dass dadurch tatsächlich eine Darstellung der Produktgruppe definiert wird.]

Wir interessieren uns für die gemeinsamen Rotationen, also für die Darstellung der Gruppe $SU(2)$ auf dem Tensorprodukt durch

$$g \mapsto U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(g) . \quad (9.2.5)$$

Die zugehörigen infinitesimalen Generatoren werden wir zuvor definiert: wir betrachten eine Kurve $g(t)$ mit $g(0) = \text{id}$, und nehmen die Ableitung nach t am Punkt $t = 0$, wobei

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} g(t) \right|_{t=0} \quad (9.2.6)$$

der entsprechende Lie-Algebra Generator ist. Auf dem Tensorprodukt gilt dann

$$\begin{aligned}
(U^{(1)} \otimes U^{(2)}) (\Omega) &= \left. \frac{d}{dt} (U^{(1)}(g(t)) \otimes U^{(2)}(g(t))) \right|_{t=0} \\
&= \left(\left. \frac{d}{dt} U^{(1)}(g(t)) \right|_{t=0} \otimes U^{(2)}(g(t)) \Big|_{t=0} \right) \\
&\quad + \left(U^{(1)}(g(t)) \Big|_{t=0} \otimes \left. \frac{d}{dt} U^{(2)}(g(t)) \right|_{t=0} \right) \\
&= U^{(1)}(\Omega) \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes U^{(2)}(\Omega) .
\end{aligned} \tag{9.2.7}$$

Die Lie-Algebra wirkt also dadurch auf dem Tensorprodukt, dass man die separaten Wirkungen auf den einzelnen Faktoren addiert. [Manchmal fasst man das als ‘Komultiplikation’ auf der Lie-Algebra g auf

$$\Delta(\Omega) = \Omega \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \Omega , \tag{9.2.8}$$

wobei hier Δ eine Abbildung $\Delta : g \mapsto g \otimes g$ ist. Dieser Gesichtspunkt ist insbesondere bei der Beschreibung von sogenannten ‘Quantengruppen’ nützlich.] Als Konsistenzcheck prüft man leicht nach, dass diese Wirkung dann die Kommutatorrelationen erhält:

$$\begin{aligned}
&[(U^{(1)} \otimes U^{(2)}) (\Omega_1) , (U^{(1)} \otimes U^{(2)}) (\Omega_2)] \\
&= [U^{(1)}(\Omega_1) \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes U^{(2)}(\Omega_1), U^{(1)}(\Omega_2) \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes U^{(2)}(\Omega_2)] \\
&= [U^{(1)}(\Omega_1), U^{(1)}(\Omega_2)] \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes [U^{(2)}(\Omega_1), U^{(2)}(\Omega_2)] \\
&= U^{(1)} \otimes U^{(2)}([\Omega_1, \Omega_2]) .
\end{aligned} \tag{9.2.9}$$

Wie wir gesehen haben können wir alle unitären Darstellungen von $SU(2)$ als direkte Summe der irreduziblen unitären Darstellungen beschreiben; diese sind die Darstellungen D_j mit $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ der Dimension $(2j + 1)$. Falls wir zwei solche Darstellungen zusammentensorieren erhalten wir nach dem, was wir gerade erklärt haben, wiederum eine Darstellung der Lie-Algebra $su(2)$. Im allgemeinen ist jedoch diese Darstellung nicht irreduzibel. Es ist daher von einigem Interesse zu verstehen, wie sich diese Darstellung wiederum in irreduzible Darstellungen zerlegen lässt. Dieses Problem kann in völliger Allgemeinheit gelöst werden (Clebsch-Gordon Reihe). Bevor wir aber den allgemeinen Fall behandeln wollen, ist es instruktiv, einen Spezialfall zu studieren.

9.3 Addition zweier $j = \frac{1}{2}$ Darstellungen

Der einfachste nicht-triviale Fall tritt auf, falls beide Darstellungen gerade die 2-dimensionale $j = \frac{1}{2}$ Darstellung ist. Wir wählen die übliche Basis für $D_{\frac{1}{2}}$ mit

$$\begin{aligned}
M_3 | \uparrow \rangle &= \frac{1}{2} | \uparrow \rangle & M_3 | \downarrow \rangle &= -\frac{1}{2} | \downarrow \rangle \\
M_+ | \uparrow \rangle &= 0 & M_+ | \downarrow \rangle &= | \uparrow \rangle \\
M_- | \uparrow \rangle &= | \downarrow \rangle & M_- | \downarrow \rangle &= 0 .
\end{aligned} \tag{9.3.1}$$

[Zur Erinnerung: der Koeffizient in der M_{\pm} Relation ist $\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$ — siehe (7.4.19).] Das Tensorprodukt ist also 4-dimensional, und eine Basis besteht aus

$$|\uparrow, \uparrow\rangle, \quad |\uparrow, \downarrow\rangle, \quad |\downarrow, \uparrow\rangle, \quad |\downarrow, \downarrow\rangle . \quad (9.3.2)$$

Wir analysieren nun die Wirkung der Lie-Algebra Generatoren auf diesen Vektoren. Aus der Definition (9.2.7) folgt sofort, dass alle vier Vektoren Eigenvektoren von M_3 sind, wobei

$$\begin{aligned} M_3|\uparrow, \uparrow\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle \\ M_3|\uparrow, \downarrow\rangle &= 0 \\ M_3|\downarrow, \uparrow\rangle &= 0 \\ M_3|\downarrow, \downarrow\rangle &= -|\downarrow, \downarrow\rangle . \end{aligned} \quad (9.3.3)$$

Weiterhin ist offensichtlich, dass

$$M_+|\uparrow, \uparrow\rangle = 0 . \quad (9.3.4)$$

Der Vektor $|\uparrow, \uparrow\rangle$ ist also der Höchstgewichtszustand einer Darstellung D_1 : diese besteht aus den Vektoren

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle , \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} M_- |\uparrow, \uparrow\rangle \\ |1, -1\rangle &= \frac{1}{2} M_- M_- |\uparrow, \uparrow\rangle . \end{aligned} \quad (9.3.5)$$

[Zur Erinnerung: $M_-|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle$ ist. Dies bestimmt die obigen Normierungsfaktoren.] Explizit gilt daher also

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle) , \quad (9.3.6)$$

sowie

$$|1, -1\rangle = \frac{1}{2} (|\downarrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \downarrow\rangle) = |\downarrow, \downarrow\rangle . \quad (9.3.7)$$

Schliesslich gilt dann auch automatisch, dass $M_-|1, -1\rangle = 0$.

In dem 4-dimensional Tensorproduktraum haben wir also bisher die 3-dimensionale Darstellung D_1 (9.3.5) wiedergefunden. Offensichtlich spannen diese 3 Vektoren aber noch nicht das ganze Tensorprodukt auf, da in D_1 nur eine bestimmte Linearkombination der beiden Vektoren mit $M_3 = 0$ auftritt. Der zu $|1, 0\rangle$ orthogonale Vektor muss daher in einer anderen Darstellung liegen. [Wie wir in Kapitel 7.3 gesehen haben ist das orthogonale Komplement einer Unterdarstellung im unitären Fall auch eine Unterdarstellung. Mit der Definition des Skalarproduktes auf dem Tensorprodukt kann man leicht einsehen, dass das Tensorprodukt zweier Darstellungen unitär ist, falls die beiden Darstellungen es sind. Das ist der Fall, der hier für uns relevant ist.]

Man rechnet leicht nach, dass der zu D_1 (bzw. zu $|1, 0\rangle$) orthogonale Vektor gerade

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) \quad (9.3.8)$$

ist. Der Vektor $M_+|0, 0\rangle$ hat dann M_3 Eigenwert 1, aber da er orthogonal zu D_1 liegt kann er nicht mit dem Vektor $|1, 1\rangle$ übereinstimmen. Da es in dem Tensorprodukt keinen anderen Vektor mit M_3 Eigenwert +1 gibt, muss also $M_+|0, 0\rangle$ verschwinden. Natürlich kann man das auch direkt nachprüfen

$$\begin{aligned} M_+|0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (M_+|\uparrow, \downarrow\rangle - M_+|\downarrow, \uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow\rangle) = 0. \end{aligned} \quad (9.3.9)$$

Der Vektor $|0, 0\rangle$ ist also der Höchstgewichtszustand der Darstellung D_0 , der trivialen Darstellung. In der Tat findet man natürlich auch, dass $M_-|0, 0\rangle = 0$.

Wir haben also jetzt das Tensorprodukt der beiden $j = \frac{1}{2}$ Darstellungen vollständig zerlegt

$$D_{\frac{1}{2}} \otimes D_{\frac{1}{2}} = D_1 \oplus D_0, \quad (9.3.10)$$

wobei D_1 durch die Vektoren $|1, m\rangle$ mit $m = \pm 1, 0$ aufgespannt wird, und D_0 aus dem Vektor $|0, 0\rangle$ besteht.

Man kann sich das auch geometrisch vorstellen: die beiden Spins der beiden Darstellungen sind entweder parallel ($S = 1$) oder antiparallel ($S = 0$).

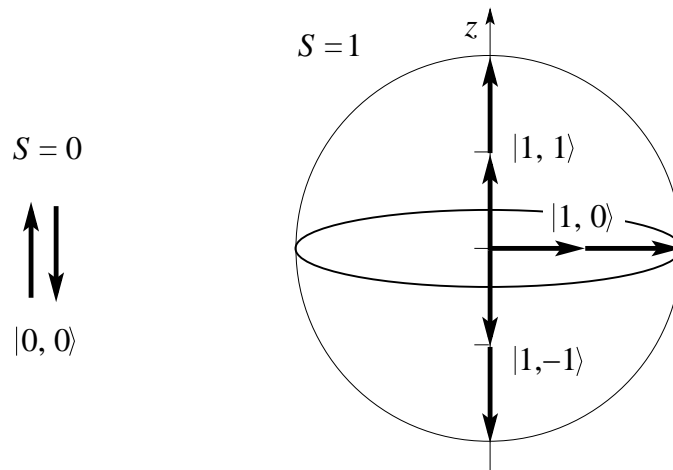


Abbildung 14: Singlett und Triplet Eigenzustände des Gesamtspins zweier Spin-1/2 Teilchen: links, Spin-Singlett zum Gesamtspin $S = 0$, $|0, 0\rangle = [|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle]/\sqrt{2}$, rechts, Spin-Triplett Zustände zum Gesamtspin $S = 1$, $|1, 1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$, $|1, 0\rangle = [|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle]/\sqrt{2}$ und $|1, -1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle$.

9.4 Die Clebsch-Gordon Reihe im allgemeinen Fall

Es sollte nun relativ klar sein, wie man die obigen Argumente auf den Fall zweier beliebiger Darstellungen $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$ verallgemeinern kann. Das Resultat ist einfach

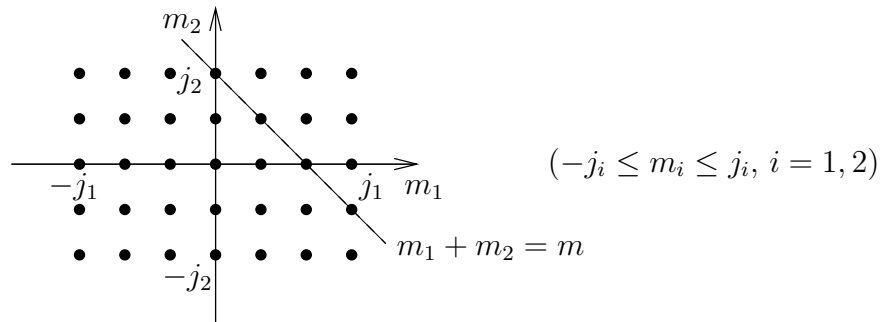
$$D_{j_1} \otimes D_{j_2} = D_{j_1+j_2} \oplus D_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus D_{|j_1-j_2|} . \quad (9.4.1)$$

Diese Zerlegung nennt man die **Clebsch-Gordon Reihe**.

Der Beweis dieser Behauptung ist tatsächlich nicht schwierig: wie zuvor wählen wir eine Eigenbasis von M_3 für die beiden Darstellungen D_{j_1} und D_{j_2} . Die Vektoren der Produktbasis sind dann automatisch Eigenvektoren von M_3 ,

$$M_3 (|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle) = (m_1 + m_2) (|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle) . \quad (9.4.2)$$

Wenn man die verschiedenen Vektoren nach ihrer Eigenwerte aufträgt erhält man das Diagramm:



Daraus erkennt man, dass die Vielfachheiten des Eigenwertes $m = m_1 + m_2$ gerade

$$\begin{array}{lll} \text{für } m = j_1 + j_2 & : & 1 \\ \text{für } m = j_1 + j_2 - 1 & : & 2 \\ \vdots & & \vdots \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| & : & 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| - 1 & : & 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \vdots & & \vdots \end{array}$$

ist, wobei wir angenommen haben, dass $m \geq 0$. (Das Resultat ist symmetrisch unter $m \rightarrow -m$.)

Wir schliessen daraus, dass keine irreduzible Darstellung D_j mit $j > j_1 + j_2$ in $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$ auftritt. Die Darstellung $D_{j_1+j_2}$ kommt genau einmal vor und enthält je einen Eigenvektor mit Eigenwert mit $m = -j, \dots, j$. Der verbleibende Eigenvektor mit $m = j_1 + j_2 - 1$ generiert eine Darstellung $D_{j_1+j_2-1}$, und so weiter bis $D_{|j_1-j_2|}$.

Als Konsistenzcheck kann man auch die Dimensionen überprüfen: das Tensorprodukt hat Dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, wohingegen die rechte Seite von (9.4.1) Dimension

$$\begin{aligned}
\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) &= \sum_{j=0}^{j_1+j_2} (2j+1) - \sum_{j=0}^{j_1-j_2-1} (2j+1) \\
&= j_1 + j_2 + 1 + 2 \frac{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)}{2} \\
&\quad - (j_1 - j_2) - 2 \frac{(j_1 - j_2 - 1)(j_1 - j_2)}{2} \\
&= (2j_2 + 1) + (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 - j_2 - 1)(j_1 - j_2) \\
&= (j_1 + j_2)^2 - (j_1 - j_2)^2 + 2j_1 + 2j_2 + 1 \\
&= 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) , \tag{9.4.3}
\end{aligned}$$

wobei wir OBdA angenommen haben, dass $j_1 \geq j_2$.

9.5 Clebsch-Gordon Koeffizienten

Wie wir oben gesehen haben können wir das Tensorprodukt der beiden irreduziblen $SU(2)$ Darstellungen $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$ vollständig nach irreduziblen $SU(2)$ Darstellungen zerlegen. Oft interessiert uns aber nicht nur, welche Darstellungen in dem Tensorprodukt vorkommen, sondern wir wollen auch wissen, wie die verschiedenen Vektoren $|j, m\rangle$ der Darstellungen D_j durch die Vektoren des Tensorproduktes ausgedrückt werden können, d.h. wir interessieren uns für die Verallgemeinerung der Formeln (9.3.5), (9.3.6) und (9.3.7). Wir bezeichnen die Vektoren des Tensorproduktes durch

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \in D_{j_1} \otimes D_{j_2} \tag{9.5.1}$$

und die Vektoren der Darstellung D_j , die in der Clebsch-Gordon Reihe auftaucht durch $|j_1, j_2, j, m\rangle$. Offenbar können wir diese Basisvektoren durch die Tensorproduktbasis ausdrücken

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1+m_2=m}} \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle}_{\text{C-G Koeffizient}} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle . \tag{9.5.2}$$

Die dabei auftretenden Koeffizienten werden die **Clebsch-Gordon Koeffizienten** genannt. Wegen der Eigenwerte bezüglich M_3 folgt sofort, dass nur die Terme mit $m = m_1 + m_2$ auftreten. Die Notation suggeriert, dass die Clebsch-Gordon Koeffizienten tatsächlich Skalarprodukte der Vektoren sind; das ist natürlich richtig, da beide Basen (die Tensorproduktbasis sowie die Basis, die durch $|j_1, j_2, j, m\rangle$ beschrieben sind) Orthonormalbasen (ψ_n) sind, für die gilt

$$\mathbf{1} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| . \tag{9.5.3}$$

Clebsch-Gordon Koeffizienten sind tabelliert (siehe zum Beispiel A.R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, New Jersey, 1957)

und es gibt inzwischen sogar Web-Tools (<http://www.gleet.org.uk/cleb/cgjava.html>). Wir sollten trotzdem verstehen, wie man diese Koeffizienten in der Tat ausrechnet. Dazu betrachten wir die Matrixelemente (im folgenden lassen wir die Kommata zwischen den Einträgen der Basen weg)

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | M_{\pm} | j_1 j_2 j m \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \pm 1 \rangle . \quad (9.5.4)$$

Andererseits kann man M_{\pm} auch nach links anwenden (unter Benützung von $M_{\pm}^{\dagger} = M_{\mp}$ und findet dann gemäss der Definition der Wirkung der Lie-Algebra Generatoren auf dem Tensorprodukt

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | M_{\pm} | j_1 j_2 j m \rangle &= \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1 j_2 (m_1 \mp 1) m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1 j_2 m_1 (m_2 \mp 1) | j_1 j_2 j m \rangle . \end{aligned}$$

Die Kombination dieser Beziehungen ergeben die Dreiecksrekursionen (aus M_+)

$$\begin{aligned} &\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j (m+1) \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 - 1)} \langle j_1 j_2 (m_1 - 1) m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 - 1)} \langle j_1 j_2 m_1 (m_2 - 1) | j_1 j_2 j m \rangle \end{aligned} \quad (9.5.5)$$

und (aus M_-)

$$\begin{aligned} &\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j (m-1) \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 + 1)} \langle j_1 j_2 (m_1 + 1) m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 + 1)} \langle j_1 j_2 m_1 (m_2 + 1) | j_1 j_2 j m \rangle . \end{aligned} \quad (9.5.6)$$

Diese Dreieckrelationen sind in Abbildung 15 skizziert, oben rechts für M_+ und unten links für M_- .

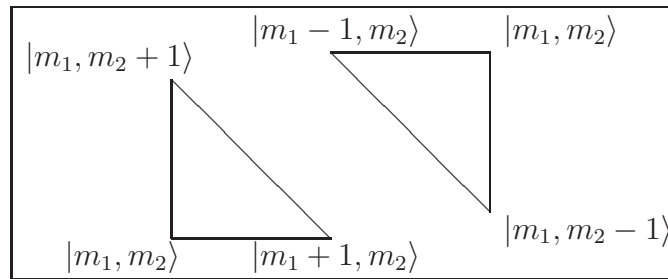


Abbildung 15: Dreiecksbeziehungen für M_+ (oben rechts) und M_- (unten links).

Sind zwei der Koeffizienten bekannt folgt daraus aus den Dreiecksbeziehungen der Dritte. Unsere Aufgabe ist es, bei festem aber beliebigem j mit $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ die Koeffizienten für alle m_1, m_2 zu finden. Dazu betrachten wir das in Abbildung 16 skizzierte Schema: wir starten am Punkt X und wählen $\langle j_1 j_2 j_1 (j - j_1) | j_1 j_2 j j \rangle \equiv \nu$ mit $\nu \in \mathbb{R}^+$. Wir

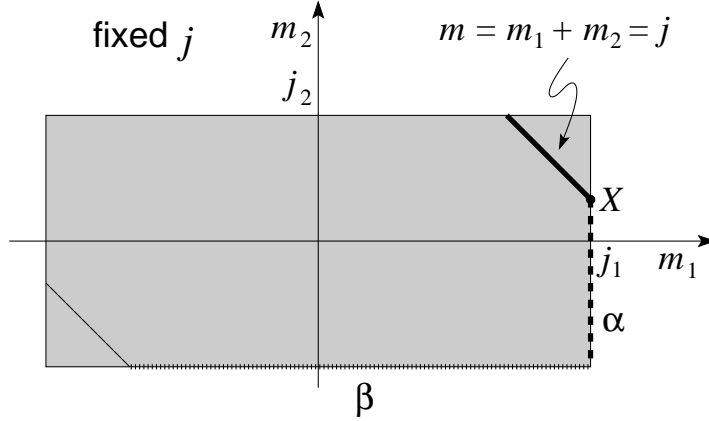


Abbildung 16: Schema zur Berechnung der Clebsch-Gordan Koeffizienten: Wir starten bei X und benützen eine Dreiecksrekursion um die Koeffizienten entlang der Kante α zu finden. Benutzung der zweiten Dreiecksrekursion liefert die Kante β , usw.

folgen der Kante α unter Verwendung der Dreiecksrelation (9.5.6) (beachte, dass $m_2 < (j - j_1)$) und benützen, dass für $m_1 > j_1$ der Koeffizient $\langle j_1 j_2 j_1 + 1 m_2 | j_1 j_2 j_1 + 1 + m_2 \rangle = 0$ verschwindet; damit finden wir die Rekursion

$$\begin{aligned} \alpha : \quad & \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j_1, j_2, j_1, m_2 | j_1, j_2, j, m-1 \rangle \\ & = \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1, j_2, j_1, m_2+1 | j_1, j_2, j, m \rangle. \end{aligned} \quad (9.5.7)$$

Anschliessend erzeugen wir mit (9.5.5) die Werte auf der Kante β und arbeiten uns alsdann iterativ durch die Matrix. Schliesslich finden wir ν durch die Bedingung, dass der Zustand $|j_1 j_2 j j\rangle$ normiert ist, d.h. durch

$$\sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = j}} |\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j j \rangle|^2 = 1. \quad (9.5.8)$$

9.5.1 Ein einfaches Beispiel

Besonders einfach sind die Resultate für den Fall der Addition eines Spin \vec{S} in der Darstellung $D_{\frac{1}{2}}$ und eines Drehimpulses \vec{L} in der Darstellung D_l , wie zum Beispiel gebraucht bei der Bestimmung des Gesamtdrehimpulses eines gebundenen Elektrons. Die Clebsch-Gordon Reihe ist in diesem Fall einfach

$$D_l \otimes D_{\frac{1}{2}} = D_{l+\frac{1}{2}} \oplus D_{l-\frac{1}{2}} \quad (9.5.9)$$

und die Clebsch-Gordon Koeffizienten sind

$$\begin{aligned} \text{für } D_{l+\frac{1}{2}} : \langle l, \frac{1}{2}, m \mp \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m \rangle &= \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}}, \\ \text{für } D_{l-\frac{1}{2}} : \langle l, \frac{1}{2}, m \mp \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m \rangle &= \mp \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}}. \end{aligned} \quad (9.5.10)$$

9.6 Physikalische Beispiele

9.6.1 Magnetisches Moment

Ein Teilchen der Ladung q ($q = -e$ für ein Elektron) und der Masse m , welches sich auf einem Orbit mit Drehimpuls \vec{L} bewegt, produziert ein magnetisches Moment \vec{M} (nicht zu verwechseln mit den infinitesimalen Generatoren der Drehgruppe) wie in Abbildung 17 skizziert,

$$\vec{M} = \frac{q}{2mc} \vec{L} . \quad (9.6.1)$$

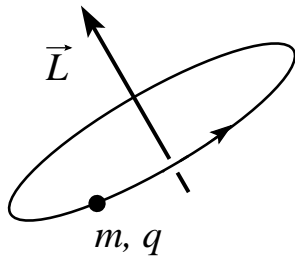


Abbildung 17: Orbitales magnetisches Moment $\vec{M} = q\vec{L}/2mc$ eines Teilchens der Masse m und Ladung q in einem Orbital mit Drehimpuls \vec{L} .

Den Ursprung dieses magnetischen Momentes kann man wie folgt verstehen. Wie aus der Elektrodynamik bekannt beschreiben wir das externe elektro-magnetische Feld durch seine Potentiale

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \Phi , \quad \vec{B} = \nabla \wedge \vec{A} . \quad (9.6.2)$$

Die Hamiltonfunktion des geladenen Teilchens in diesem externen Feld ist dann

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q \Phi . \quad (9.6.3)$$

Hierbei ist $\vec{p} = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c} \vec{A}$ der zu \vec{x} konjugierte Impuls. Gemäss des Korrespondenzprinzips wird dieser Impuls durch

$$\vec{p} \mapsto -i\hbar \nabla \quad (9.6.4)$$

ersetzt. Damit erhalten wir den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i \frac{\hbar q}{2mc} \left(\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla \right) + \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q \Phi \right) . \quad (9.6.5)$$

Wir arbeiten in der Coulomb-Eichung, für die

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0 . \quad (9.6.6)$$

Dann kann man den Gradientenoperator an \vec{A} vorbeiziehen, und erhält insgesamt

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i \frac{\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \nabla + \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q \Phi \right) . \quad (9.6.7)$$

Nun betrachten wir den Fall eines reinen konstanten Magnetfeldes \vec{B} . Das zugehörige Vektorpotential kann man dann als

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x} \wedge \vec{B} \quad (9.6.8)$$

wählen; in der Tat gilt dann

$$\begin{aligned} (\text{rot}A)_i &= \epsilon_{ijk}\partial_j \left(-\frac{1}{2}\epsilon_{klm}x_l B_m \right) \\ &= -\frac{1}{2}\epsilon_{kij}\epsilon_{kl}\delta_{jl}B_m = B_i . \end{aligned}$$

Eingesetzt in (9.6.7) finden wir dann den Term

$$\begin{aligned} i\frac{\hbar q}{mc}\vec{A} \cdot \nabla &= i\frac{\hbar q}{mc} \left(-\frac{1}{2} \right) (\vec{x} \wedge \vec{B}) \cdot \nabla \\ &= i\frac{\hbar q}{2mc} (\vec{x} \wedge \nabla) \cdot \vec{B} \\ &= -\frac{q}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} , \end{aligned} \quad (9.6.9)$$

wobei wir benützt haben, dass $\vec{L} = -i\hbar(\vec{x} \wedge \nabla)$ ist. Wir erkennen also, dass das magnetische Moment des Teilchens gerade

$$\vec{M} = \frac{q}{2mc} \vec{L} \quad (9.6.10)$$

ist. Den Zusatzterm zum Hamiltonian

$$H_Z = -\vec{M} \cdot \vec{B} \quad (9.6.11)$$

nennt man den (normalen) Zeeman Term. Natürlich enthält der obige Hamiltonoperator (9.6.7) noch weitere Terme, nämlich

$$\Delta H = \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q\Phi \right) . \quad (9.6.12)$$

Im Fall eines reinen konstanten Magnetfeldes ist $\Phi = 0$; der Term proportional zu \vec{A}^2 ist für den Diamagnetismus verantwortlich, ist aber für die folgende Anwendung auf das Wasserstoffatom vernachlässigbar klein.

Der Zeemann Term (9.6.11) führt dazu, dass die für rotationssymmetrische Probleme typische Entartung der Energieniveaux aufgehoben wird. Um dies genauer zu verstehen betrachten wir das Wasserstoffatom nach Einschalten eines homogenen Magnetfeldes. Wie wir in Kapitel 8 diskutiert haben sind die Energieeigenzustände ohne Magnetfeld durch die Quantenzahlen (n, l, m) parametrisiert, wobei die Energie zunächst nur von n abhängt

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} . \quad (9.6.13)$$

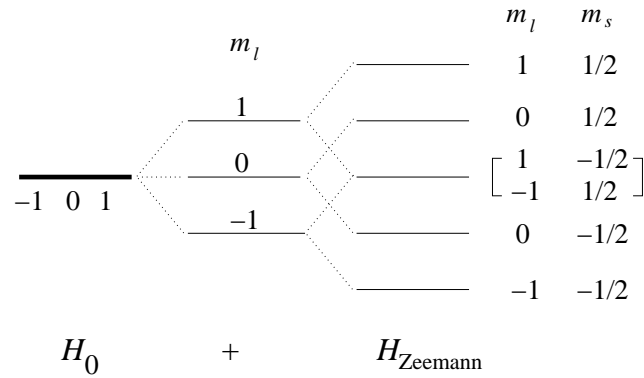


Abbildung 18: Zeeman Aufspaltung des $6 = 2 \times 3$ -fach (Spin \times Bahn) p -Zustandes im Wasserstoffatom. Das orbitale Moment produziert ein Triplett mit zweifach entarteten Zuständen (Spin). Der Landé Faktor $g \approx 2$ des Elektronspins kompensiert gerade die Halbzahligkeit des Spindrehmomentes, so dass Orbit und Spin die gleiche Energieaufspaltung ergeben und es resultiert eine Quintuplet mit zweifach entartetem zentralen Zustand.

Nach Einschalten des Magnetfeldes sind die Wellenfunktionen, die durch (n, l, m) charakterisiert sind, weiterhin Eigenfunktionen des Hamiltonoperators. Jedoch ist die Degenerierung der Energie aufgehoben: zusätzlich zu (9.6.13) gibt es nun den Korrekturterm (**(normalen) Zeeman Effekt**)

$$\Delta E_Z = \mu_B B_z m, \quad (9.6.14)$$

wobei μ_B das Bohr'sche Magneton ist, nämlich

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}. \quad (9.6.15)$$

Zum Beispiel spalten sich die Niveaus eines p -Zustandes ($l = 1$) gemäss Abbildung 18 auf.

9.7 Der anormale Zeeman Effekt

Der obige (normale) Zeemann Effekt ist jedoch nicht der einzige Effekt. Der Spin eines Teilchens erzeugt nämlich auch ein magnetisches Moment, sogar für ungeladene Teilchen (z.B. Neutronen, siehe unten). Für ein Elektron findet man

$$\vec{M}_{\text{el}} = -g \frac{e}{2mc} \vec{S}, \quad (9.7.16)$$

wobei g der Landé Faktor ist. In der Quantenelektrodynamik kann man g berechnen und findet

$$g = 2 + \frac{\alpha}{\pi} + \mathcal{O}(\alpha^2) \quad \text{wobei} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.04} \quad (9.7.17)$$

die Feinstrukturkonstante ist. In diesem Fall sind \vec{M} und \vec{S} antiparallel, da $q = -e < 0$. Für ein Proton ist andererseits

$$\vec{M}_{\text{prot}} = g_p \frac{e}{2M_p c} \vec{S}, \quad g_p \approx 5.59, \quad (9.7.18)$$

und für Neutronen

$$\vec{M}_{\text{neut}} = -g_n \frac{e}{2M_n c} \vec{S}, \quad g_n \approx 3.83. \quad (9.7.19)$$

Bewegt sich das Teilchen in einem externen Magnetfeld \vec{B} , dessen Komponente in die z -Richtung zeigt, so enthält man also den gesamten Zeemann Term (der ‘anormalen Zeemann Effekt’ beschreibt den Effekt, der von dem Spin erzeugt wird)

$$H_Z = \frac{qB_z}{2mc} (L_z + gS_z). \quad (9.7.20)$$

Unter Berücksichtigung des Spins sind die Quantenzahlen des Elektrons durch (n, l, m, m_s) gegeben, wobei $m_s = \pm \frac{1}{2}$ die Spinquantenzahl ist. Mit $g = 2$ erhält man also dann den Zusatzterm zu (9.6.13) nämlich (**Zeemann Effekt**)

$$\Delta E_Z = \mu_B B_z (m + 2m_s). \quad (9.7.21)$$

Dieser Effekt führt dann zu der Abspaltung (siehe Figur 18), aus der auf die Existenz des Elektronspins geschlossen wurde (Pauli). Die Einführung des Spins war konzeptionell ein gewaltiger Schritt: der Spin eines Quantensystems beschreibt einen Freiheitsgrad, der kein klassisches Analogon besitzt. Insofern stösst hier unsere klassische Anschauung an ihre Grenzen.

9.7.1 Spin-Bahn-Kopplung

Es gibt noch einen weiteren interessanten Effekt (die Spin-Bahn-Kopplung), der dazu führt, dass wir zur Beschreibung des Problems die zuvor entwickelte Clebsch-Gordon Technologie einsetzen können. Das sich im \vec{E} -Feld des Kernes bewegende Elektron spürt ein Magnetfeld $\vec{B} = -\vec{v} \wedge \vec{E}/c$ woran das Spin-Moment koppelt. Die resultierende Energie ist

$$-\frac{e}{mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E}). \quad (9.7.22)$$

Die Thomas Präzession führt eine weitere Korrektur von derselben Form ein: diese ist ein relativistisch kinematischer Effekt und berücksichtigt, dass das Ruhesystem des Elektrons sich relativ zum Laborsystem dreht, siehe zum Beispiel Jackson (Elektrodynamik), Seite 541 ff. Die Korrektur ergibt sich gerade zum $-1/2$ -fachen von (9.7.22) und wir erhalten

folgenden Ausdruck für die **Spin-Bahn Kopplung**:

$$\begin{aligned}
H_{\text{SO}} &= \frac{-e}{2mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E}) \\
&\downarrow e\vec{E} = \vec{\nabla}V = \hat{r}\partial_r V(r) \\
&= \frac{1}{2mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{v}) \frac{1}{r} \partial_r V \\
&= \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} .
\end{aligned} \tag{9.7.23}$$

Der Term $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ist nur unter der gemeinsamen Rotation von \vec{L} und \vec{S} invariant; in der Tat gilt

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left((\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right) . \tag{9.7.24}$$

In dem Zustand mit den Quantenzahlen (n, l, m, m_s) gilt

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= \hbar^2 l(l+1) \\
\vec{S}^2 &= \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \hbar^2 \frac{3}{4} \\
(\vec{L} + \vec{S})^2 &= \hbar^2 J(J+1) ,
\end{aligned}$$

wobei $J = l \pm \frac{1}{2}$ der Spin der Darstellung ist, in die sich das Tensorprodukt $D_l \otimes D_{\frac{1}{2}}$ zerlegt. [Beachte, dass \vec{L} und \vec{S} bis auf einen Faktor von \hbar gerade mit den infinitesimalen Rotationsgeneratoren übereinstimmen. Nach unserer Analyse von Kapitel 9.2 ist dann $\vec{L} + \vec{S}$ gerade die Wirkung dieser Generatoren auf dem Tensorprodukt.]

Falls $J = l + \frac{1}{2}$ gilt also

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \frac{\hbar^2}{2} l , \tag{9.7.25}$$

wohingegen wir für $J = l - \frac{1}{2}$ gerade

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = -\frac{\hbar^2}{2} (l+1) \tag{9.7.26}$$

haben. Da

$$\frac{1}{r} \partial_r V = \frac{e^2}{r^3} \tag{9.7.27}$$

können wir den Beitrag zur Energie durch

$$\Delta E_{SB} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \begin{cases} l & J = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & J = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{9.7.28}$$

abschätzen. Mit

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \tag{9.7.29}$$

und

$$\begin{aligned}\frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} &= \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^4}{e^2 m^2} = \alpha^2 e^2 a_0^2, \\ \frac{e^4 m}{2 \hbar^2} &= \frac{e^2}{2 a_0} = E_R = 13.6 \text{ eV},\end{aligned}\tag{9.7.30}$$

[zur Erinnerung: $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ ist der Bohr-Radius und $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ die Feinstrukturkonstante] ergibt sich die Aufspaltung

$$\Delta E_{\text{SB}} = \frac{\alpha^2 E_R}{2 n^3} \frac{1}{l (1 + \frac{1}{2}) (l + 1)} \begin{cases} l & J = l + \frac{1}{2} \\ -(l + 1) & J = l - \frac{1}{2} \end{cases} .\tag{9.7.31}$$

Für kleine externe Magnetfelder ist der Spin-Bahn-Kopplung Effekt relativ zum Zeeman-Effekt dominant.

10 Quantenmechanik und klassische Physik

Wie wir gesehen haben macht die Quantenmechanik nur Aussagen darüber, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein bestimmtes Messergebnis eintreffen wird. In der klassischen Physik gibt es natürlich auch Situationen, wo man effektiv nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen kann: zum Beispiel kann man die Lotto-Zahlen nicht wirklich vorhersagen, sondern lediglich (hoffentlich) die Aussage machen, dass alle Zahlen mit derselben Wahrscheinlichkeit gezogen werden werden. Natürlich interpretiert man das nicht dahingegen, dass die klassische Physik nicht deterministisch wäre: der Grund dafür, dass man die Lottozahlen nicht vorhersagen kann, liegt einfach darin, dass man die Anfangsbedingungen nicht genau genug kennt.

Man könnte also denken, dass der Grund dafür, dass wir in der Quantenmechanik nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen können ähnlicher Natur ist. Insbesondere könnte man sich vorstellen, dass der wirkliche Zustand eines (quantenmechanischen) Systems tatsächlich alle Messwerte eindeutig festlegt, dass wir aber den wirklichen Zustand nicht genau genug kennen, und deshalb nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen können. Diese Idee wird üblicherweise als ‘Theorie verborgener Variablen’ (‘hidden variables’) bezeichnet. Sie wäre auch aus abstrakten (philosophischen) Überlegungen sehr attraktiv, da eine solche Theorie die physikalische Wirklichkeit direkt abbilden würde. [Falls die Quantenmechanik keine Theorie verborgener Variablen ist, scheint sie zu suggerieren, dass es keine ‘physikalische Realität’ gibt: der Wert bestimmter Variablen ist dann (bevor sie gemessen werden) nicht eindeutig bestimmt!]

Wir wir im folgenden zeigen wollen, scheint die Quantentheorie jedoch **keine** lokale Theorie verborgener Variablen zu sein.

10.1 Das EPR Paradox

Der Unterschied zwischen der Quantenmechanik und einer Theorie verborgener Variablen kann im Kontext des sogenannten EPR Paradoxes verstanden werden. Dieses Paradox geht auf Einstein, Podolsky und Rosen (1935) zurück. Dazu betrachten wir zwei Spin 1/2 Teilchen, die sich in dem Spin-0 Zustand des Gesamtsystems befinden

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) . \quad (10.1.1)$$

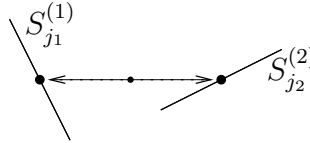
Dieser Zustand ist invariant unter gemeinsamen Rotationen der beiden Spin-Freiheitsgrade; er ist deshalb von der ursprünglichen Wahl der 3-Richtung (bezüglich derer $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ definiert sind) unabhängig. Man nennt einen solchen Zustand oft ein **EPR-Paar**. Er beschreibt zum Beispiel eine der Zerfallsmöglichkeiten des Pions, $\pi \rightarrow e^-e^+$, in ein Elektron und ein Positron.

Die Teilchen laufen danach frei auseinander, was ihren Spinzustand (10.1.1) nicht ändert. Je eine Spinkomponente $S_j^{(i)}$, ($j = 1, 2, 3$), der beiden Teilchen, ($i = 1, 2$), wird dann gemessen. Die beiden Messungen seien raumartig getrennte Ereignisse, so dass nach

vorher:

••
 $|\psi\rangle$

nachher:



der speziellen Relativitätstheorie eine kausale Beeinflussung ausgeschlossen ist. Die Messung von $S_j^{(1)}$ und $S_j^{(2)}$ (gleiche Richtung j) ergibt entweder $(\hbar/2, -\hbar/2)$ oder $(-\hbar/2, \hbar/2)$, je mit Wahrscheinlichkeit $1/2$. (Diese Wahrscheinlichkeit ist unabhängig davon, in welcher Richtung der Spin gemessen wird.) Also **kann** $S_1^{(1)}$ vorausgesagt werden, ohne das Teilchen (1) zu stören, nämlich durch Messung von $S_1^{(2)}$. Dies klingt paradox, da die beiden Messungen beliebig weit entfernt voneinander stattfinden können. Die dieser Beobachtung zu Grunde liegende Idee ist das Prinzip auf dem die moderne ‘Quanten Teleportation’ beruht (siehe Kapitel 10.3).

10.2 Die Bell’sche Ungleichung

Die Bell’sche Ungleichung bezieht sich nicht auf die Quantenmechanik, sondern gilt für beliebige *lokale* Theorien verborgener Variablen. In diesem Rahmen kann eine Ungleichung abgeleitet werden (Bell’sche Ungleichung), die in der Quantenmechanik nicht erfüllt ist.

In einer Theorie verborgener Variablen gibt es einen Wahrscheinlichkeitsraum Ω , auf dem die verborgenen Variablen $\omega \in \Omega$ leben. Da wir diese Variablen nicht kennen (bzw. nicht direkt messen können) beschränkt sich unser Kenntnis des Zustands des System auf ein Wahrscheinlichkeitsmass $d\rho$ auf Ω . Der Erwartungswert einer Observable A ist dann einfach

$$\langle A \rangle_\rho = \int_\Omega A(\omega) d\rho(\omega) . \quad (10.2.1)$$

Im weiteren wollen wir annehmen, dass die Theorie lokal ist: falls A und B zwei raumartig getrennte Observable sind, dann soll gelten

$$(AB)(\omega) = A(\omega) B(\omega) . \quad (10.2.2)$$

Hierbei bedeutet (AB) die Observable, bei der zuerst B und dann A (raumartig getrennt) gemessen wird. Insbesondere bedeutet diese Annahme, dass die beiden Messungen A und B miteinander vertauschen. Die physikalische Motivation hinter (10.2.2) ist dass in der mikroskopischen Beschreibung (durch alle relevanten Variable, inklusive jener auf Ω) sich raumartig getrennte Messungen nicht gegenseitig beeinflussen können.

Unter diesen Annahmen kann man nun die **Bell’sche Ungleichung** [Bell (1964), Clauser, Horne, Shimony, Holt (1969)] ableiten: Seien A, A' von B wie von B' raumartig getrennte Observable, die alle nur die Werte ± 1 annehmen können. Dann gilt

$$|\langle AB \rangle + \langle A'B \rangle + \langle AB' \rangle - \langle A'B' \rangle| \leq 2 . \quad (10.2.3)$$

Zum Beweis beobachtet man, dass

$$-2 \leq (A(\omega) + A'(\omega))B(\omega) + (A(\omega) - A'(\omega))B'(\omega) \leq 2 . \quad (10.2.4)$$

In der Tat gilt dass der Ausdruck (10.2.4) gerade $= \pm 2$ ist, denn

$$\begin{aligned} A(\omega) = A'(\omega) &\implies A(\omega) + A'(\omega) = \pm 2 , & A(\omega) - A'(\omega) = 0 , \\ A(\omega) = -A'(\omega) &\implies A(\omega) + A'(\omega) = 0 , & A(\omega) - A'(\omega) = \pm 2 . \end{aligned}$$

Bildung des Mittelwerts liefert dann (10.2.3).

Wir wollen nun zeigen, dass diese Ungleichung in der quantenmechanischen Beschreibung des EPR Versuches nicht erfüllt ist. Die Observablen, die wir betrachten, beschreiben einfach die Spin-Messung in Richtung von \vec{n} ($|\vec{n}| = 1$), eines Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchens, für die immer gilt, dass

$$\sigma_{\vec{n}}(\omega) = \pm 1 . \quad (10.2.5)$$

[Der tatsächliche Spin ist immer $\pm \hbar/2$; die obige Observable ist also die entsprechend skalierte Spin-Messung.] Konkret betrachten wir den Fall, wo wir (wie im EPR Experiment) zwei Teilchen haben, die raumartig getrennt voneinander sind. Die Observablen sind dann

$$A = \sigma_{\vec{n}_1}^{(1)} = \vec{n}_1 \cdot \vec{\sigma}^{(1)} , \quad A' = \sigma_{\vec{n}'_1}^{(1)} = \vec{n}'_1 \cdot \vec{\sigma}^{(1)} , \quad B = \sigma_{\vec{n}_2}^{(2)} = \vec{n}_2 \cdot \vec{\sigma}^{(2)} , \quad B' = \sigma_{\vec{n}'_2}^{(2)} = \vec{n}'_2 \cdot \vec{\sigma}^{(2)} ,$$

wobei sich (1) und (2) auf die beiden Teilchen bezieht. Die Messung von AB zum Beispiel entspricht dann der *Spin-Spin Korrelation*

$$\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) := \langle \sigma_{\vec{n}_1}^{(1)} \sigma_{\vec{n}_2}^{(2)} \rangle . \quad (10.2.6)$$

Falls das System durch eine lokale Theorie verborgener Variablen beschrieben wird, so folgt nun aus (10.2.3), dass

$$|\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) + \mathcal{C}(\vec{n}'_1, \vec{n}_2) + \mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}'_2) - \mathcal{C}(\vec{n}'_1, \vec{n}'_2)| \leq 2 . \quad (10.2.7)$$

Diese Vorhersage soll nun mit der QM verglichen werden. Dazu betrachten wir den Zustand $|\psi\rangle$, der das EPR Paar (10.1.1) beschreibt. Für jeden Vektor \vec{v} gilt dann (wir können die 3-Achse bezüglich derer das System geschrieben ist, jeweils in Richtung des Vektors \vec{v} wählen)

$$(\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)}) \cdot \vec{v} |\psi\rangle = 0 \quad (10.2.8)$$

$$\langle \psi | \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{v} | \psi \rangle = 0 . \quad (10.2.9)$$

Damit ist

$$\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \langle \psi | (\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1) (\vec{\sigma}^{(2)} \cdot \vec{n}_2) | \psi \rangle = - \langle \psi | \underbrace{(\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1) (\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_2)}_{\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 \mathbf{I} + i \vec{\sigma}^{(1)} \cdot (\vec{n}_1 \wedge \vec{n}_2)} | \psi \rangle = -\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 , \quad (10.2.10)$$

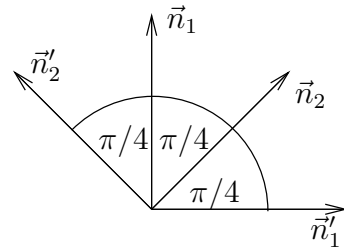
wobei wir in der dritten Gleichung (10.2.8) benützt haben, und in der letzten Gleichung (10.2.9). Ausserdem haben wir die Produktidentität der Pauli-Matrizen verwendet — siehe (7.5.7).

Entsprechend können wir die anderen Terme in (10.2.7) ausrechnen. Damit die Bell'sche Ungleichung gilt, müsste also jetzt gelten:

$$|\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}_1 \cdot \vec{n}'_2 - \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}'_2| \leq 2. \quad (10.2.11)$$

Im allgemeinen ist aber diese Ungleichung verletzt: für die Vektoren der Figur ist

$$\begin{aligned} \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 &= \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}_2 = \vec{n}_1 \cdot \vec{n}'_2 = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}'_2 &= \cos \frac{3\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}, \end{aligned}$$



die linke Seite in (10.2.11) also $= 2\sqrt{2} > 2$.

Diese Analyse zeigt, dass die Quantenmechanik (so wie wir sie formuliert haben) nicht zu einer lokalen Theorie verborgener Variablen äquivalent ist! Dies ist auch experimentell bestätigt worden. Die Experimente [Freedman-Clauser (1972); Aspect, Dalibard & Roger (1982)] benützen dabei polarisierte Photonen statt Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Die gefundenen Ergebnisse stimmen mit den Vorhersagen der Quantenmechanik sehr gut überein.

10.3 Quanten Teleportation

Wie wir schon in Kapitel 10.2 erwähnt haben, impliziert das EPR 'Paradox', dass es eine Art 'Fernwechselwirkung' zwischen den Spinfreiheitsgraden gibt. Diese Wechselwirkung kann dazu benützt werden, Quanteninformation zu teleportieren. Dazu betrachten wir die folgende Anordnung.

Alice und Bob besitzen je ein Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen eines EPR Paars (Teilchen 1 und 2)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (10.3.1)$$

Alice soll den unbekanntem Zustand $|\varphi\rangle$ eines weiteren Spin-1/2 Teilchens (Teilchen 0) an Bob übermitteln, und zwar unter Verwendung bloss klassischer Information, d.h. endlich vieler Bits. Insbesondere ist es deshalb nicht zugelassen, einfach das Teilchen von Alice zu Bob zu bewegen. Naiverweise scheint das unmöglich zu sein, da Alice nicht direkt $|\varphi\rangle$ messen kann, sondern lediglich den Spin in einer vorgegebenen Richtung. Dabei geht jedoch die genaue Information über den Vektor $|\varphi\rangle$ verloren (Kollaps der Wellenfunktion).

Mit Hilfe von (10.3.1) können Alice und Bob den Zustand des Teilchens 0 auf das Teilchen 2 dennoch übertragen (**Teleportation**). Dazu betrachtet man den Zustand aller drei Teilchen

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi, \uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\varphi, \downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle). \quad (10.3.2)$$

Alice kann Messungen an ihren Teilchen 0 und 1 vornehmen, wie z.B. die mit Zerlegung

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^4 P_i \equiv \sum_{i=1}^4 P_i \otimes \mathbf{1}, \quad (10.3.3)$$

wobei $P_i = |\chi_i\rangle\langle\chi_i|$ die Projektoren auf die orthonormierten Zustände

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle),$$

$$|\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle),$$

$$|\chi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow\rangle - |\downarrow, \downarrow\rangle),$$

$$|\chi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \uparrow\rangle + |\downarrow, \downarrow\rangle),$$

sind. Die Zustände nach der Messung entnimmt man aus

$$P_1|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{2}|\chi_1\rangle \otimes \left(-|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\varphi\rangle - |\uparrow\rangle\langle\uparrow|\varphi\rangle\right),$$

$$P_2|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{2}|\chi_2\rangle \otimes \left(+|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\varphi\rangle - |\uparrow\rangle\langle\uparrow|\varphi\rangle\right),$$

$$P_3|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{2}|\chi_3\rangle \otimes \left(|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\varphi\rangle + |\uparrow\rangle\langle\downarrow|\varphi\rangle\right),$$

$$P_4|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{2}|\chi_4\rangle \otimes \left(|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\varphi\rangle - |\uparrow\rangle\langle\downarrow|\varphi\rangle\right).$$

Alice übermittelt das Ergebnis $i = 1, 2, 3, 4$ (2 Bits) an Bob. Je nach Ergebnis übt er folgende unitäre Operatoren auf sein Teilchen 2 (realisierbar durch Spinpräzession) und erhält dessen Zustand:

Alices Ergebnis	Bobs Operation	Zustand
1	$\mathbf{1}_2$	$- \varphi\rangle$
2	σ_3	$- \varphi\rangle$
3	σ_1	$ \varphi\rangle$
4	σ_2	$-i \varphi\rangle$

Hier haben wir ausgenützt, dass

$$\begin{aligned} \sigma_3|\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, & \sigma_3|\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle, \\ \sigma_1|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, & \sigma_1|\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ \sigma_2|\uparrow\rangle &= i|\downarrow\rangle, & \sigma_2|\downarrow\rangle &= -i|\uparrow\rangle. \end{aligned}$$

In allen Fällen ist der Zustand $|\varphi\rangle$ (Phase ohne Bedeutung) wiederhergestellt! Quanten Teleportation ist mit Photonen experimentell realisiert worden [Zeilinger et al. (1997)].

11 Störungstheorie

Die meisten interessanten physikalischen Systeme lassen sich nicht exakt lösen. Man kann sie jedoch häufig als Störung eines lösbaren Systems auffassen. Dann kann man das Problem in ‘Störungstheorie’ behandeln. Wir wollen zunächst den Fall betrachten, wo der Hamiltonoperator zeit-unabhängig ist.

11.1 Nicht-entartete zeit-unabhängige Störungstheorie

Gegeben sei ein Hamiltonoperator H , für den wir die zeit-unabhängige Schrödinger-Gleichung lösen wollen, d.h. das Eigenwertproblem

$$H\Psi = E\Psi . \tag{11.1.1}$$

Wir wollen annehmen, dass sich H als

$$H = H_0 + H' \tag{11.1.2}$$

schreiben lässt, wobei H_0 exakt lösbar ist. Wir bezeichnen den vollständigen Satz von orthonormierten Eigenfunktionen von H_0 durch φ_n , $n \in \mathbb{N}$, wobei

$$H_0 \varphi_n = \mathcal{E}_n \varphi_n \tag{11.1.3}$$

und die Energie-Eigenwerte \mathcal{E}_n paarweise verschieden sind, $\mathcal{E}_m \neq \mathcal{E}_n$ für $m \neq n$. Diese letzte Bedingung bedeutet, dass die Energieeigenwerte nicht entartet sind; den Fall, dass manche Energie-Eigenwerte von H_0 entartet sind, werden wir später behandeln.

Wir wollen annehmen, dass H' in einem geeigneten Sinn ein ‘kleine Störung’ beschreibt. Um die Buchführung zu erleichtern, schreiben wir

$$H = H_0 + \lambda H' \tag{11.1.4}$$

und machen einen Störungsansatz in λ :

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_0 + \lambda\Psi_1 + \lambda^2\Psi_2 + \lambda^3\Psi_3 + \dots , \\ E &= E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \dots . \end{aligned} \tag{11.1.5}$$

Einsetzen von (11.1.5) in (11.1.1) mit (11.1.4) ergibt nun Ordnung für Ordnung

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad (H_0 - E_0)\Psi_0 = 0 , \\ \lambda^1 : & \quad (H_0 - E_0)\Psi_1 = (E_1 - H')\Psi_0 , \\ \lambda^2 : & \quad (H_0 - E_0)\Psi_2 = (E_1 - H')\Psi_1 + E_2\Psi_0 , \\ \lambda^3 : & \quad (H_0 - E_0)\Psi_3 = (E_1 - H')\Psi_2 + E_2\Psi_1 + E_3\Psi_0 . \end{aligned} \tag{11.1.6}$$

\uparrow
höchstes Ψ_n

\uparrow
höchstes E_n

Die Ordnung λ^0 ergibt sofort dass

$$\Psi_0 = \varphi_n , \quad E_0 = \mathcal{E}_n \quad (11.1.7)$$

für ein geeignetes $n \in \mathbb{N}$. Die weiteren Ψ_k für $k \geq 1$ können wir nun iterativ finden, da auf der rechten Seite der obigen Gleichungen jeweils nur Ψ_l mit $l < k$ auftreten. Allerdings bestimmen diese Gleichungen Ψ_k nur bis auf Vektoren, die von $(H_0 - E_0)$ vernichtet werden. Da wir angenommen haben, dass die verschiedenen Eigenwerte von H_0 nicht-entartet sind, ist jeder solche Vektor zu φ_n proportional. Ein entsprechender Term würde also lediglich die Normierung des ersten Terms $\Psi_0 = \varphi_n$ verändern. Wir legen diese Freiheit dadurch fest, dass wir verlangen, dass

$$\langle \Psi_0 | \Psi_k \rangle = \delta_{0k} . \quad (11.1.8)$$

Da $\Psi_0 = \varphi_n$ entspricht dies gerade der Normierungsbedingung

$$\langle \varphi_n | \Psi \rangle = 1 . \quad (11.1.9)$$

[Diese Normierungsbedingung führt dann aber dazu, dass Ψ nicht richtig normiert sein wird; am Ende der Störungsrechnung werden wir also das resultierende Ψ noch richtig normieren müssen.]

Nach diesen Vorbemerkungen wollen wir nun (11.1.6) systematisch lösen. Das Skalarprodukt mit Ψ_0 der Ordnung λ^s -Gleichung gibt

$$\underbrace{\langle \Psi_0 | H_0 - E_0 | \Psi_s \rangle}_0 = \underbrace{\langle \Psi_0 | E_1 - H' | \Psi_{s-1} \rangle}_{\delta_{s1} E_1 - \langle \Psi_0 | H' | \Psi_{s-1} \rangle} + \sum_{j=2}^s E_j \underbrace{\langle \Psi_0 | \Psi_{s-j} \rangle}_{\delta_{sj}} \quad (11.1.10)$$

woraus folgt, dass

$$E_s = \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle , \quad s \geq 1 . \quad (11.1.11)$$

Die Berechnung von E in Ordnung s setzt also die Berechnung von Ψ in der Ordnung $s-1$ voraus. Die Multiplikation von (11.1.11) mit λ^s und Addition der Terme $\propto \lambda^s$ ergibt

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_{s=1}^{\infty} \lambda^s E_s \\ &= E_0 + \lambda \sum_{s=1}^{\infty} \lambda^{s-1} \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle \\ &= \mathcal{E}_n + \lambda \langle \varphi_n | H' | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (11.1.12)$$

Um Ψ_s zu finden entwickeln wir nun

$$|\Psi_s\rangle = \sum_{l \neq n} \langle \varphi_l | \Psi_s \rangle |\varphi_l\rangle , \quad s \geq 1 . \quad (11.1.13)$$

Die obige Summe enthält keinen Term $l = n$, da nach Annahme $\langle \varphi_n | \Psi_s \rangle = \langle \Psi_0 | \Psi_s \rangle = 0$ für $s \geq 1$. Das Skalarprodukt von (11.1.6) in der Ordnung s mit $\langle \varphi_l |$ ergibt nun

$$\underbrace{\langle \varphi_l | H_0 | \Psi_s \rangle}_{\mathcal{E}_l \langle \varphi_l | \Psi_s \rangle} - E_0 \langle \varphi_l | \Psi_s \rangle = \sum_{j=1}^s E_j \langle \varphi_l | \Psi_{s-j} \rangle - \langle \varphi_l | H' | \Psi_{s-1} \rangle . \quad (11.1.14)$$

Damit finden wir

$$\langle \varphi_l | \Psi_s \rangle = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} \left[\langle \varphi_l | H' | \Psi_{s-1} \rangle - \sum_{j=1}^s E_j \langle \varphi_l | \Psi_{s-j} \rangle \right] , \quad (11.1.15)$$

wobei wir benützt haben, dass $E_0 = \mathcal{E}_n$.

Dieses Gleichungssystem lässt sich iterativ lösen: Sei E und Ψ bis einschliesslich der Ordnung $s-1$ bekannt, d.h. E_0, \dots, E_{s-1} und $\Psi_0, \dots, \Psi_{s-1}$ seien bereits gefunden. Dann ist für $s \geq 1$:

$$\begin{aligned} E_s &= \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle \\ |\Psi_s \rangle &= \sum_{l \neq n} \frac{\langle \varphi_l | H' | \Psi_{s-1} \rangle - \sum_{j=1}^{s-1} E_j \langle \varphi_l | \Psi_{s-j} \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |\varphi_l \rangle , \end{aligned} \quad (11.1.16)$$

wobei wir in der ersten Gleichung (11.1.11), und in der zweiten Gleichung (11.1.13) und (11.1.15) benützt haben. In der letzten Summe haben wir den Term $j = s$ weggelassen, da $\langle \varphi_l | \Psi_0 \rangle = 0$ nach Annahme.

Für $s = 0$ bilden $E_0 = \mathcal{E}_n$ und $|\Psi_0 \rangle = |\varphi_n \rangle$ den Startpunkt für die Iteration. Wir beobachten, dass (11.1.16) nur für den nicht-entarteten Fall Sinn machen, da ansonsten der Nenner der zweiten Gleichung nicht ungleich Null ist; wir werden auf den Spezialfall, wo diese Bedingung nicht erfüllt ist, im nächsten Kapitel zurückkommen.

Schliesslich geben wir die Resultate für $s \leq 2$ explizit an, wobei wir die Notation $|\varphi_l \rangle = |l \rangle$ verwenden:

$$\begin{aligned} \lambda^0 : \quad & E_0 = \mathcal{E}_n , \\ & |\Psi_0 \rangle = |n \rangle . \\ \lambda^1 : \quad & E_1 = \langle n | H' | n \rangle , \\ & |\Psi_1 \rangle = \sum_{l \neq n} \frac{\langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |l \rangle . \\ \lambda^2 : \quad & E_2 = \sum_{l \neq n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} , \\ & |\Psi_2 \rangle = \sum_{l \neq n} \left[\sum_{k \neq n} \frac{\langle l | H' | k \rangle \langle k | H' | n \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_k)} - \frac{\langle l | H' | n \rangle \langle n | H' | n \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)^2} \right] |l \rangle . \end{aligned}$$

Zu erster Ordnung in Störungstheorie, d.h. für den Vektor $\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1$ ist die Normierung dann

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 + \lambda^2 \sum_{l \neq n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)^2} . \quad (11.1.17)$$

11.1.1 Gestörter harmonischer Oszillator

Als Beispiel betrachten wir den gestörten 1-dimensionalen harmonischen Oszillator

$$H = H_0 + H' \quad (11.1.18)$$

mit

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2, \quad H' = -Fq. \quad (11.1.19)$$

Wie wir in Kapitel 6 gesehen haben, hat das ungestörte Problem die Lösung

$$H_0|n\rangle = \mathcal{E}_n|n\rangle, \quad \mathcal{E}_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (11.1.20)$$

Wie dort gehen wir zu dimensionslosen Variablen über, die wir durch Auf- und Absteigeoperatoren ausdrücken

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger). \quad (11.1.21)$$

Da

$$a|l\rangle = \sqrt{l}|l-1\rangle, \quad a^\dagger|l\rangle = \sqrt{l+1}|l+1\rangle \quad (11.1.22)$$

folgt dann für die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle l|H'|n\rangle &= -F\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}\langle l|n-1\rangle - F\sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}\langle l|n+1\rangle \\ &= -F\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}\delta_{l,n-1} - F\sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}\delta_{l,n+1}. \end{aligned} \quad (11.1.23)$$

Damit erhalten wir die folgenden Resultate bis zur 2-ten Ordnung

$$\begin{aligned} 0^{\text{te}} : \quad E_0 &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \\ |\Psi_0\rangle &= |n\rangle. \end{aligned} \quad (11.1.24)$$

$$\begin{aligned} 1^{\text{te}} : \quad E_1 &= \langle n|H'|n\rangle = 0, \\ |\Psi_1\rangle &= \sum_{l \neq n} \frac{\langle l|H'|n\rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |l\rangle \\ &= \frac{\langle n-1|H'|n\rangle}{\hbar\omega} |n-1\rangle + \frac{\langle n+1|H'|n\rangle}{-\hbar\omega} |n+1\rangle \\ &= -\frac{F}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}|n-1\rangle - \sqrt{n+1}|n+1\rangle \right) \\ &= \frac{-iF}{m\hbar\omega^2} p|n\rangle \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \frac{1}{i} (a - a^\dagger). \end{aligned} \quad (11.1.25)$$

$$\begin{aligned}
2^{\text{te}} : \quad E_2 &= \sum_{l \neq n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} \\
&= \frac{|\langle n-1 | H' | n \rangle|^2}{\hbar\omega} + \frac{|\langle n+1 | H' | n \rangle|^2}{-\hbar\omega} \\
&= F^2 \left(\frac{\hbar n}{2m\omega(\hbar\omega)} - \frac{\hbar(n+1)}{2m\omega(\hbar\omega)} \right) = -\frac{F^2}{2m\omega^2}, \\
|\Psi_2\rangle &= -\frac{1}{2} \left(\frac{F}{m\hbar\omega^2} \right)^2 \left(p^2 |n\rangle - \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)|n\rangle \right) \dots \quad (11.1.26)
\end{aligned}$$

[Der Korrekturterm in der letzten Zeile kommt daher, dass nach Voraussetzung $|\Psi_2\rangle$ orthogonal zu $|n\rangle$ ist — der Beitrag von $p^2|n\rangle$ zu $|n\rangle$ muss daher abgezogen werden.] Andererseits beschreibt der Hamiltonian

$$\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - Fq \\
&= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(q - \underbrace{\frac{F}{m\omega^2}}_{q_0} \right)^2 - \underbrace{\frac{F^2}{2m\omega^2}}_{E_2}
\end{aligned}$$

gerade einen um $q_0 = F/m\omega^2$ verschobenen harmonischen Oszillator; dessen Grundzustandsfunktion ist

$$\begin{aligned}
|\Psi_0\rangle &= \exp[-ipq_0/\hbar]|n\rangle = \exp[-ipF/m\hbar\omega^2]|n\rangle \\
&\cong |n\rangle - \frac{ipF}{m\hbar\omega^2}|n\rangle - \frac{1}{2} \left(\frac{Fp}{m\hbar\omega^2} \right)^2 |n\rangle. \quad (11.1.27)
\end{aligned}$$

Wir sehen, dass die Störungsreihe gerade den verschobenen harmonischen Oszillator als Potenzreihe in F ergibt — der Unterschied in dem F^2 -Term proportional zu $|n\rangle$ folgt daher, dass $|\Psi_0\rangle$ und das durch die Störungsreihe definierte $|\Psi\rangle$ unterschiedlich normiert sind: $|\Psi_0\rangle$ ist kanonisch normiert, $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle_0 = 1$ wohingegen die Norm von $|\Psi\rangle$ durch (11.1.17) gegeben ist, und sich zur Ordnung F^2 von 1 unterscheidet.

11.2 Entartete zeit-unabhängige Störungstheorie

Bisher haben wir angenommen, dass alle Eigenwerte des ungestörten Hamiltonoperators nicht-entartet waren. Diese Annahme ging explizit in die obige Analyse ein, da wir zum Beispiel in (11.1.15) durch $\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l$ geteilt haben, was nur Sinn macht, falls $\mathcal{E}_n \neq \mathcal{E}_l$ für alle $l \neq n$. Falls jedoch der Eigenwert $E_0 = \mathcal{E}_n$, um den wir stören entartet ist, bricht diese Analyse zusammen. Es ist jedoch nicht schwierig zu verstehen, wie dieses Problem umgangen werden kann.

11.2.1 Aufhebung einer zwei-fachen Entartung zu erster Ordnung

Bevor wir den allgemeinen Fall diskutieren wollen ist es instruktiv, den Fall zu betrachten, bei dem der relevante Eigenwert zweifach entartet ist. Sei also $E_0 = \mathcal{E}_n = \mathcal{E}_m$, wobei alle

anderen Eigenwerte $\mathcal{E}_k \neq \mathcal{E}_n$ für $k \neq n, m$ sind. Wir nehmen weiterhin an, dass φ_l wie zuvor eine Orthonormalbasis der zugehörigen Eigenvektoren beschreibt.

Es ist klar, dass die Formeln (11.1.6) weiterhin gelten. Wir können diese Gleichungen aber nun nicht mehr so einfach invertieren, da $H_0 - E_0$ nun einen zwei-dimensionalen Vektorraum von Vektoren vernichtet. Insbesondere ist Ψ_0 nun nicht mehr (bis auf Normierung) eindeutig festgelegt; statt dessen wissen wir lediglich, dass

$$\Psi_0 = a_m |m\rangle + a_n |n\rangle , \quad (11.2.1)$$

wobei a_m und a_n komplexe Konstanten sind. Um einen guten Startpunkt für die Störungsreihe zu erhalten, betrachten wir nun den Ordnung $s = 1$ Term von (11.1.6) und bilden die Matrixelemente mit $\langle m|$ und $\langle n|$. Im ersteren Fall findet man

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle m|H_0 - E_0|\Psi_1\rangle}_0 &= \langle m|E_1 - H'|\Psi_0\rangle \\ &= a_m \langle m|E_1|m\rangle + a_n \underbrace{\langle m|E_1|n\rangle}_0 \\ &\quad - a_m \langle m|H'|m\rangle - a_n \langle m|H'|n\rangle , \end{aligned} \quad (11.2.2)$$

und entsprechend für das Matrixelement mit $\langle n|$. Die beiden Gleichungen lassen sich in die folgende Matrix-Form bringen,

$$\begin{aligned} (\langle m|H'|m\rangle - E_1) a_m + \langle m|H'|n\rangle a_n &= 0 \\ \langle n|H'|m\rangle a_m + (\langle n|H'|n\rangle - E_1) a_n &= 0 . \end{aligned} \quad (11.2.3)$$

Wir definieren nun

$$\mathcal{E}'_m = \langle m|H'|m\rangle \quad \mathcal{E}'_n = \langle n|H'|n\rangle \quad \delta' = \langle m|H'|n\rangle , \quad \delta'^* = \langle n|H'|m\rangle . \quad (11.2.4)$$

Mit diesen Abkürzungen schreibt sich (11.2.3) als das Eigenwertproblem

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}'_m - E_1 & \delta' \\ \delta'^* & \mathcal{E}'_n - E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_m \\ a_n \end{pmatrix} = 0 . \quad (11.2.5)$$

Eine Lösung $\Psi_0 \neq 0$ existiert falls die Determinante gleich Null ist, also falls

$$(\mathcal{E}'_m - E_1)(\mathcal{E}'_n - E_1) - |\delta'|^2 = 0 , \quad (11.2.6)$$

woraus wir E_1 berechnen können zu

$$E_1^\pm = \frac{\mathcal{E}'_m + \mathcal{E}'_n}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}'_m - \mathcal{E}'_n}{2}\right)^2 + |\delta'|^2} . \quad (11.2.7)$$

Die zugehörigen Eigenvektoren sind durch die Bedingungen

$$\frac{a_m^\pm}{a_n^\pm} = \frac{\delta'}{E_1^\pm - \mathcal{E}'_m} \quad (11.2.8)$$

charakterisiert. In niedrigster Ordnung ist das Resultat $E_0 = \mathcal{E}$ und $|\Psi_0^\pm\rangle = a_m^\pm|m\rangle + a_n^\pm|n\rangle$, wobei a_m^\pm, a_n^\pm durch (11.2.8) bestimmt ist. Die nächste Ordnung ergibt die Korrektur $E_1 = E_1^\pm$ gemäss (11.2.7). Falls $\mathcal{E}'_m \neq \mathcal{E}'_n$ oder $\delta' \neq 0$ ist $E_1^+ \neq E_1^-$, und die Entartung ist aufgehoben; das ist der generische Fall.

Um die Korrektur $|\Psi_1^\pm\rangle$ für den Eigenvektor von H zu finden betrachten wir zuerst die Ordnung $s = 1$ von (11.1.6) und berechnen das Matrixelement mit $\langle l|, l \neq m, n$,

$$\begin{aligned} \langle l|H_0 - E_0|\Psi_1^\pm\rangle &= \langle l|E_1^\pm - H'|\Psi_0^\pm\rangle \\ (\mathcal{E}_l - \mathcal{E})\langle l|\Psi_1^\pm\rangle &= E_1^\pm \underbrace{\langle l|\Psi_0^\pm\rangle}_0 - \langle l|H'|\Psi_0^\pm\rangle, \end{aligned} \quad (11.2.9)$$

wobei wir $\mathcal{E} = \mathcal{E}_m = \mathcal{E}_n$ geschrieben haben. Diese Gleichung legt also die Komponenten von $|\Psi_1^\pm\rangle$ für die Vektoren im orthogonalen Komplement von $\text{span}(|m\rangle, |n\rangle)$ fest,

$$|P\Psi_1^\pm\rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{\langle l|H'|\Psi_0^\pm\rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} |l\rangle, \quad (11.2.10)$$

wobei $P = \mathbf{1} - |m\rangle\langle m| - |n\rangle\langle n|$ der Projektor auf diesen Unterraum ist. Um die Komponenten von Ψ_1 im Unterraum $\text{span}(|m\rangle, |n\rangle)$ zu bestimmen, wählen wir zunächst die Konvention — das ist analog zu (11.1.8) — dass $\langle \Psi_n^\pm|\Psi_0^\pm\rangle = 0$ für $n \geq 1$. Insbesondere müssen wir daher nur $\langle \Psi_1^\pm|\Psi_0^\mp\rangle$ bestimmen. Dazu benützen wir die Ordnung λ^2 Gleichung von (11.1.6). Für $|\Psi_1^+\rangle$ finden wir

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0^-| \cdot (H_0 - E_0)|\Psi_2^+\rangle &= (E_1^+ - H')|\Psi_1^+\rangle + E_2^+|\Psi_0^+\rangle \\ \underbrace{\langle \Psi_0^-|H_0 - E_0|\Psi_2^+\rangle}_0 &= \langle \Psi_0^-|E_1^+ - H'|\Psi_1^+\rangle + E_2^+ \underbrace{\langle \Psi_0^-|\Psi_0^+\rangle}_0, \end{aligned} \quad (11.2.11)$$

woraus

$$\langle \Psi_1^+|E_1^+ - H'|\Psi_0^-\rangle = 0 \quad (11.2.12)$$

folgt. Andererseits ist

$$\begin{aligned} (E_1^+ - H')|\Psi_0^-\rangle &= (E_1^+ - PH')|\Psi_0^-\rangle - (\mathbf{1} - P)H'|\Psi_0^-\rangle \\ &= (E_1^+ - E_1^-)|\Psi_0^-\rangle - PH'|\Psi_0^-\rangle. \end{aligned} \quad (11.2.13)$$

da $(\mathbf{1} - P)H'|\Psi_0^-\rangle = E_1^-|\Psi_0^-\rangle$ wie man durch direktes Nachrechnen zeigt. [Dies ist gerade die Eigenwertbedingung für Ψ_0^- .] Unter Benützung von (11.2.12) nehmen wir jetzt das innere Produkt mit $\langle \Psi_1^+|$ und finden dann (nach Konjugation)

$$0 = (E_1^+ - E_1^-)\langle \Psi_0^-|\Psi_1^+\rangle - \langle \Psi_0^-|H'P|\Psi_1^+\rangle \quad (11.2.14)$$

und damit, unter Verwendung von (11.2.10), die gesuchte Komponente $\langle \Psi_0^-|\Psi_1^+\rangle$. Wir beobachten, dass die

$$\langle \Psi_0^-|\Psi_1^+\rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{\langle \Psi_0^-|H'|l\rangle\langle l|H'|\Psi_0^+\rangle}{(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)(E_1^+ - E_1^-)} \sim \mathcal{O}(H') \quad (11.2.15)$$

ist. Eine analoge Rechnung gibt das korrespondierende Resultat für $|\Psi_1^-\rangle$. Fassen wir die obigen Resultate zusammen, so finden wir eine Störungsreihe startend mit

$$\begin{cases} E_0 &= \mathcal{E} \\ |\Psi_0^+\rangle &= a_m^+|m\rangle + a_n^+|n\rangle ; \end{cases} \quad \begin{cases} E_0 &= \mathcal{E} \\ |\Psi_0^-\rangle &= a_m^-|m\rangle + a_n^-|n\rangle ; \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_1 &= E_1^+ \\ |\Psi_1^+\rangle &= \sum_{l \neq m, n} \left[\frac{\langle \Psi_0^- | H' | l \rangle \langle l | H' | \Psi_0^+ \rangle}{(E_1^+ - E_l)(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)} |\Psi_0^-\rangle + \frac{\langle l | H' | \Psi_0^+ \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} |l\rangle \right] ; \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_1 &= E_1^- \\ |\Psi_1^-\rangle &= \sum_{l \neq m, n} \left[\frac{\langle \Psi_0^+ | H' | l \rangle \langle l | H' | \Psi_0^- \rangle}{(E_1^- - E_l)(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)} |\Psi_0^+\rangle + \frac{\langle l | H' | \Psi_0^- \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} |l\rangle \right]. \end{cases} \quad (11.2.16)$$

11.2.2 Der allgemeine Fall

Im allgemeinen Fall, d.h. falls der Eigenraum zu \mathcal{E}_n k -dimensional ist, bezeichnen wir mit $\{\varphi_n^1, \dots, \varphi_n^k\}$ eine Orthonormalbasis dieses Eigenraumes. Für Ψ_0 machen wir nun den Ansatz

$$\Psi_0 = \sum_{j=1}^k a_n^j \varphi_n^j. \quad (11.2.17)$$

Mit denselben Argumenten wie oben führt das nun statt (11.2.5) auf das Eigenwertproblem

$$\begin{pmatrix} (\langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^1 \rangle - E_1) & \langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^k \rangle \\ \langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^1 \rangle & (\langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^2 \rangle - E_1) & \cdots & \langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^k \rangle \\ \vdots & & & \vdots \\ \langle \varphi_n^k | H' | \varphi_n^1 \rangle & & \cdots & (\langle \varphi_n^k | H' | \varphi_n^k \rangle - E_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n^1 \\ a_n^2 \\ \vdots \\ a_n^k \end{pmatrix} = 0. \quad (11.2.18)$$

Wir bezeichnen die Eigenwerte mit $E_1^\alpha = \langle n^\alpha | H' | n^\alpha \rangle$, $\alpha = 1, \dots, k$, wobei die zugehörigen Eigenvektoren durch

$$|n^\alpha\rangle = \sum_{l=1}^k a_n^l(\alpha) |\varphi_n^l\rangle \quad (11.2.19)$$

gegeben sind. Die weitere Rechnung funktioniert analog wie das, was wir oben besprochen haben. Zum Beispiel findet man zu zweiter Ordnung für E

$$E = \mathcal{E}_n + \langle n^\alpha | H' | n^\alpha \rangle + \sum_{\mathcal{E}_l \neq \mathcal{E}_n} \frac{|\langle l | H' | n^\alpha \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l}, \quad (11.2.20)$$

und in erster Ordnung für Ψ

$$\begin{aligned}
|\Psi^\alpha\rangle &= |n^\alpha\rangle + \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{1}{E_1^{\alpha'} - E_1^\alpha} \sum_{\mathcal{E}_l \neq \mathcal{E}_n} \frac{\langle n^{\alpha'} | H' | l \rangle \langle l | H' | n^\alpha \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |n^{\alpha'}\rangle \\
&\quad + \sum_{\mathcal{E}_l \neq \mathcal{E}_n} \frac{\langle l | H' | n^\alpha \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |l\rangle .
\end{aligned} \tag{11.2.21}$$

In der zweiten Gleichung haben wir angenommen, dass die Entartung bereits zu erster Ordnung aufgehoben wurde, d.h. dass $E_1^\alpha \neq E_1^\beta$ für $\alpha \neq \beta$.

11.2.3 Aufhebung der Entartung zu zweiter Ordnung

Im allgemeinen kann es jedoch passieren, dass die Entartung zu erster Ordnung noch nicht aufgehoben wird. Zum Beispiel wird die Entartung für den Fall der zwei-fachen Entartung dann nicht aufgehoben, falls

$$\langle m | H' | m \rangle = \langle n | H' | n \rangle , \quad \langle m | H' | n \rangle = 0 , \tag{11.2.22}$$

siehe (11.2.7) mit (11.2.4). In diesem Fall muss man die Rechnung wiederum entsprechend anpassen. Dazu betrachten wir die $s = 2$ Ordnung von (11.1.6) und nehmen das Matrixelement mit $\langle m |$ und mit $\langle n |$,

$$\langle m | H_0 - E_0 | \Psi_2 \rangle = \langle m | E_1 - H' | \Psi_1 \rangle + E_2 \langle m | \Psi_0 \rangle . \tag{11.2.23}$$

Ferner benützen wir die 1-te Ordnung Resultate

$$\begin{aligned}
|\Psi_0\rangle &= a_m |m\rangle + a_n |n\rangle , \quad E_0 = \mathcal{E}_m = \mathcal{E}_n = \mathcal{E} \\
\langle n | H' | m \rangle &= \mathcal{E}' \delta_{nm} ,
\end{aligned} \tag{11.2.24}$$

$$P | \Psi_1 \rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{a_m \langle l | H' | m \rangle + a_n \langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} |l\rangle , \tag{11.2.25}$$

wobei die letzte Gleichung gerade (11.2.10) ist. Die 2-te Ordnung Gleichung (11.2.23) lässt sich nun als

$$0 = \langle m | E_1 - H' | P \Psi_1 \rangle + \underbrace{\langle m | E_1 - H' | (\mathbf{1} - P) \Psi_1 \rangle}_0 + E_2 \langle m | \Psi_0 \rangle \tag{11.2.26}$$

schreiben, wobei wir benutzt haben, dass die linke Seite verschwindet da $\langle m | (H_0 - E_0) = 0$. Der mittlere Term verschwindet da im Raum $(\mathbf{1} - P)\mathcal{H} = \{|m\rangle, |n\rangle\}$ die Entartung in 1-ter Ordnung nicht aufgehoben wird, d.h. $(\mathbf{1} - P)H'(\mathbf{1} - P) = E_1(\mathbf{1} - P)$. Wir finden daher also die Gleichung

$$\langle m | H' | P \Psi_1 \rangle = E_2 a_m , \tag{11.2.27}$$

und Einsetzen von (11.2.25) ergibt

$$\left[\underbrace{\sum_{l \neq m, n} \frac{|\langle l | H' | m \rangle|^2}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}}_{\mathcal{E}'_m} - E_2 \right] a_m + \underbrace{\sum_{l \neq m, n} \frac{\langle m | H' | l \rangle \langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}}_{\delta'} a_n = 0. \quad (11.2.28)$$

Ebenso finden wir durch Projektion auf $\langle n |$

$$(\mathcal{E}'_n - E_2) a_n + \delta'^* a_m = 0, \quad (11.2.29)$$

wobei \mathcal{E}'_n analog zu \mathcal{E}'_m definiert ist,

$$\mathcal{E}'_n = \sum_{l \neq m, n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}. \quad (11.2.30)$$

Die Gleichungen (11.2.3) und (11.2.29) haben genau dieselbe Form wie (11.2.5). Die Entartung wird also zu zweiter Ordnung aufgehoben, falls

$$\text{entweder } \mathcal{E}'_n \neq \mathcal{E}'_m \quad \text{oder } \delta' \neq 0. \quad (11.2.31)$$

11.2.4 Der Stark Effekt

Als Anwendung betrachten wir das Wasserstoffatom im elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$. Zusätzlich zu dem Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms haben wir also jetzt die Störung $H' = e\mathcal{E}z$. Wir untersuchen die Aufhebung der Entartung im $n = 2$ Niveau mit den Zuständen $|n, l, m\rangle = |2s_0\rangle, |2p_1\rangle, |2p_0\rangle, |2p_{-1}\rangle$. [Wir haben $4 = n^2$ entartete Zustände; hier bezeichnet $|2s_0\rangle$ den Zustand mit $l = m = 0$, und $|2p_m\rangle$ die Zustände mit $l = 1$.] Im Prinzip müssten wir also eine 4×4 Matrix betrachten, da aber $[L_z, z] = 0$ vertauscht H' mit L_z und die Matrixelemente von H' zwischen Zuständen mit unterschiedlichem L_z Eigenwert ($= m$) verschwinden

$$0 = \langle m' | [H', L_z] | m \rangle = (m - m') \langle m' | H' | m \rangle. \quad (11.2.32)$$

Somit bleiben nur die Matrixelemente $\langle 2s_0 | H' | 2p_0 \rangle = \delta'$, ihr komplex konjugiertes δ'^* , sowie die diagonalen Matrixelemente. Die Kugelfunktionen sind Eigenfunktionen des Paritätoperators P mit Parität $(-1)^l$. Andererseits hat der Operator z Parität -1 , und es folgt

$$(-1)^l \langle Y_{lm} | H' | Y_{lm} \rangle = \langle Y_{lm} | H' P | Y_{lm} \rangle = -\langle Y_{lm} | P H' | Y_{lm} \rangle = -(-1)^l \langle Y_{lm} | H' | Y_{lm} \rangle, \quad (11.2.33)$$

und daher verschwinden all diagonalen Matrixelemente von H' . Die Matrixelemente von H' auf dem entarteten Unterraum sind also durch die Matrix beschrieben

$$H' : \begin{matrix} s \\ p_1 \\ p_0 \\ p_{-1} \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \delta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.2.34)$$

Schliesslich berechnet sich δ zu $\delta = \langle 2s_0 | H' | 2p_0 \rangle = -3a_0 e \mathcal{E}$, wobei a_0 der Bohrradius ist. Es bleibt die 2×2 Matrix zu diagonalisieren

$$3a_0 e \mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \implies \text{EW} = \mp 3a_0 e \mathcal{E}, \quad \text{EV} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}. \quad (11.2.35)$$

Die Aufhebung des 4-fach entarteten Zustandes bei $e^2/8a_0$ ($n = 2$) in zwei nicht-entartete und einen 2-fach entarteten Zustand ist in Abb. 19 skizziert.

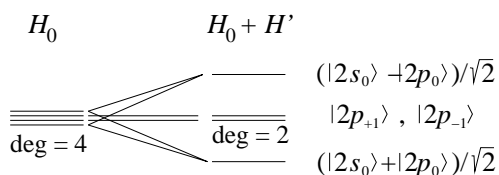


Abbildung 19: Stark Effekt: der 4-fach entartete Zustand zu $n = 2$ spaltet auf in 2 nicht-entartete und einen 2-fach entarteten Zustand.

11.3 Zeit-abhängige Störungstheorie

Bisher haben wir angenommen, dass sowohl der ungestörte Hamiltonoperator H_0 , wie auch die Störung H' zeit-unabhängig sind. Wir wollen nun den Fall betrachten, bei dem $H'(t)$ von der Zeit abhängt; wir wollen jedoch weiter annehmen, dass der ungestörte Hamiltonoperator zeit-unabhängig ist. Um dieses Problem zu lösen sollten wir ein wenig weiter ausholen und zunächst das sogenannte Heisenberg- und das Wechselwirkungsbild besprechen.

11.3.1 Der Propagator der Quantenmechanik

In unserer bisherigen Analyse haben wir das sogenannte Schrödingerbild benützt. Dabei sind die Operatoren (so wie der Ortsoperator oder Impulsoperator) zeit-unabhängig, und die Dynamik des Systems wird durch die Zeitabhängigkeit der Zustandsvektoren $\Psi(t)$ beschrieben. Diese wird durch die Schrödingergleichung bestimmt

$$i\hbar \partial_t \Psi(t) = H \Psi(t), \quad (11.3.1)$$

wobei H der Hamiltonoperator ist. Wie bereits im Kontext der Schwingungsprobleme der Mechanik beschrieben, können wir die Lösung der Schrödingergleichung durch einen *Propagator* beschreiben. Dazu definieren wir einen Operator $U(t, s)$ (den Propagator), der durch die drei Bedingungen charakterisiert ist

- (i) $U(t, t) = \mathbf{I}$.
- (ii) Additivität: es gilt $U(t, s)U(s, r) = U(t, r)$.

(iii) Der Operator $U(t, s)$ erfüllt die Differentialgleichung

$$i\hbar\partial_t U(t, s) = HU(t, s) . \quad (11.3.2)$$

Es ist dann leicht einzusehen, dass $U(t, s)$ die Zeitentwicklung generiert: sei der Zustandsvektor zur Zeit s als $\Psi(s)$ gegeben, dann ist der Zustandsvektor zur Zeit t gerade

$$\Psi(t) = U(t, s)\Psi(s) . \quad (11.3.3)$$

Falls H nicht von der Zeit abhängt (das ist das Analogon der autonomen Systeme in der Mechanik), kann man $U(t, s)$ direkt durch

$$U(t, s) = \exp\left(-iH\frac{(t-s)}{\hbar}\right) \quad (11.3.4)$$

bestimmen. Da der Hamiltonoperator H ein selbst-adjungierter Operator ist, folgt, dass $U(t, s)$ unitär ist — das muss natürlich (selbst wenn H von der Zeit abhängt) so sein, da die Zeitentwicklung die Normierung der Zustände erhalten muss.

Im allgemeinen Fall kann man den Propagator iterativ (so wie schon in der Mechanik beschrieben) berechnen. Dazu beobachtet man, dass $U(t, s)$ die Integralgleichung

$$U(t, s) = \mathbf{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_s^t dt' H(t')U(t', s) \quad (11.3.5)$$

erfüllt, deren Lösung durch eine konvergente Iterationsreihe (Neumann Reihe) dargestellt werden kann

$$U(t, s) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, s) , \quad (11.3.6)$$

wobei

$$U^{(n)}(t, s) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) .$$

Es ist wichtig, dass in (11.3.6) die t_j einer Zeitordnung unterliegen: $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq s$:

$$\begin{array}{ccccccc} H(t_1) & \cdots & H(t_n) & & & & \\ \uparrow & & \uparrow & & & & \\ \text{spätere} & & \text{frühere} & & \text{Zeiten.} & & \end{array} \quad (11.3.7)$$

Diese Zeitordnung ist unangenehm, aber formal behebbar: die Zeitordnung impliziert eine Integration über den Teil $t \geq t_1 \cdots \geq t_n \geq s$ des Hyperkubus im \mathbb{R}^n , vgl. Abb. 20 für $n = 2$. Als formales Werkzeug definieren wir den Zeitordnungs-Operator \mathcal{T} , der eine Sequenz von zeitabhängigen Operatoren zeitlich ordnet,

$$\mathcal{T}\left(A(t_1) B(t_2)\right) = \begin{cases} A(t_1) B(t_2) & t_1 > t_2 \\ B(t_2) A(t_1) & t_2 > t_1 . \end{cases} \quad (11.3.8)$$

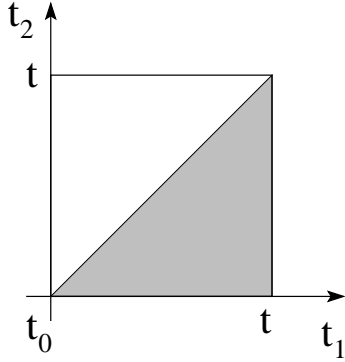


Abbildung 20:
Integrationsbereich (grau schraffiert) über den zeitgeordneten Sektor für den Fall $n = 2$.

Die Verallgemeinerung auf n Operatoren ist trivial,

$$\mathcal{T} \left(\prod_{i=1}^n A_i(t_i) \right) = A_{\pi_1}(t_{\pi_1}) \cdots A_{\pi_n}(t_{\pi_n}) , \quad (11.3.9)$$

wobei π jene Permutation ist, welche die Zeiten ordnet $t_{\pi_1} \geq t_{\pi_2} \geq \cdots \geq t_{\pi_n}$. Der Zeitordnungsoperator \mathcal{T} erlaubt uns die Integrale in (11.3.6) auf den vollen Kubus zu erweitern, für $n = 2$,

$$\begin{aligned} \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2) &= \frac{1}{2} \left(\int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2) \right. \\ &\quad \left. + \int_s^t dt_2 \int_s^{t_2} dt_1 H(t_2)H(t_1) \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_s^t dt_1 \int_s^t dt_2 \mathcal{T} (H(t_1)H(t_2)) . \end{aligned} \quad (11.3.10)$$

und entsprechend im allgemeinen Fall

$$\int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-1}} dt_n = \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \int_{t_0}^t dt_i \mathcal{T} . \quad (11.3.11)$$

Damit erhalten wir

$$U^{(n)}(t, s) = \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_s^t dt_1 \cdots \int_s^t dt_n \mathcal{T} (H(t_1) \cdots H(t_n)) \quad (11.3.12)$$

bzw. für den Propagator

$$U(t, s) = \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_s^t dt' H(t') \right] . \quad (11.3.13)$$

Wir bemerken, dass sich diese Formel vereinfacht, falls $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ für alle t_1, t_2 , da wir dann die Zeitordnung \mathcal{T} weglassen können.

11.3.2 Das Heisenberg-Bild

Nach diesen Vorbemerkungen können wir nun das Heisenberg-Bild erklären. Im Heisenberg-Bild wälzt man die Zeitevolution von den Zuständen auf die Operatoren ab. Diese beiden Beschreibungen sind durch den unitären Propagator $U(t, s)$ miteinander verbunden und daher äquivalent. Konkret definieren wir die Zustände im Heisenberg-Bild durch

$$\Psi_H \equiv \Psi(t_0) , \quad (11.3.14)$$

d.h. der Zustand ist einfach der Zustand im Schrödingerbild zu einer festen Zeit. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass

$$\Psi_H = U(t_0, t) \Psi(t) . \quad (11.3.15)$$

Die beiden Beschreibungen hängen also mit dem (zeit-abhängigen) unitären Operator $U(t_0, t)$ miteinander zusammen. Entsprechend werden dann auch die Observablen der ursprünglichen Beschreibung (d.h. des Schrödinger-Bildes) umtransformiert:

$$A_H = U(t_0, t) A U(t, t_0) . \quad (11.3.16)$$

Diese Definition garantiert dann, dass

$$\begin{aligned} (A\Psi(t))_H &= U(t_0, t) A \Psi(t) \\ &= U(t_0, t) A U(t, t_0) U(t_0, t) \Psi(t) = A_H \Psi_H . \end{aligned} \quad (11.3.17)$$

Insbesondere sind daher auch die Erwartungswerte in den beiden Beschreibungen gleich

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) A U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle , \end{aligned} \quad (11.3.18)$$

wobei wir benützt haben, dass $U(t, s)$ unitär ist, und daher

$$U(t, s)^\dagger = U(t, s)^{-1} = U(s, t) . \quad (11.3.19)$$

Die Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild ist eine Bewegungsgleichung für die Operatoren: sie ist von der Form

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) &= \underbrace{(i\hbar \partial_t U(t, t_0)^\dagger)}_{-(HU(t, t_0))^\dagger} A U(t, t_0) + U(t, t_0)^\dagger A \underbrace{i\hbar \partial_t U(t, t_0)}_{HU(t, t_0)} + \underbrace{U(t, t_0)^\dagger i\hbar \partial_t A U(t, t_0)}_{i\hbar \partial_t A_H} \\ &= -(HU(t, t_0))^\dagger A U(t, t_0) + U(t, t_0)^\dagger A HU(t, t_0) + i\hbar (\partial_t A)_H \\ &= [A, H]_H + i\hbar \partial_t A_H \\ &= [A_H, H_H] + i\hbar \partial_t A_H . \end{aligned} \quad (11.3.20)$$

Falls $\partial_t H = 0$ so ist $[H, U(t, t_0)] = 0$ und damit $H_H(t) = H_H = H$. Dann ist also H_H zeit-unabhängig, während für die anderen Operatoren die Zeitabhängigkeit durch

$$A_H(t) = e^{iH(t-t_0)/\hbar} A e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (11.3.21)$$

beschrieben ist. Insbesondere ist dann also A_H eine Erhaltungsgrösse, falls

$$\partial_t A = 0, \quad [H, A] = 0. \quad (11.3.22)$$

Dies ist das quantenmechanische Analogon der Aussage, dass eine Funktion des Phasenraumes und der Zeit $A(p, q, t)$ in der klassischen Physik dann erhalten ist, falls $\partial_t A = 0$ und die Poissonklammer $\{A, H\} = 0$ verschwindet. In der Tat stimmt die Bewegungsgleichung im Heisenbergbild gerade mit der klassischen Formel

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \partial_t A \quad (11.3.23)$$

überein — siehe Mechanikskript Kapitel 6.3. Diese Relation ist kein Zufall: eine Art die Quantisierung ein wenig formaler zu verstehen besteht darin, dass man die Poissonalgebra (die die Algebra der Observablen eines klassischen mechanischen Systems beschreibt) quantisiert. Dabei wird die Poissonklammer durch den Kommutator ersetzt (Dirac):

$$\{A, B\} \implies -\frac{i}{\hbar}[A, B]. \quad (11.3.24)$$

Zum Beispiel kann man in dieser Weise auch die ‘kanonischen’ Vertauschungsregeln zwischen Ort und Impuls erhalten, denn

$$\{q, p\} = 1 \implies -\frac{i}{\hbar}[q, p] = 1, \quad (11.3.25)$$

was gerade zu $[q, p] = i\hbar$ führt. Das Schrödinger-Bild ist zwar begrifflich einfacher, aber die Beziehung zur klassischen Physik ist im Heisenberg-Bild transparenter.

11.3.3 Das Wechselwirkungsbild

Für die Beschreibung der zeit-abhängigen Störungstheorie ist weder das Schrödinger- noch das Heisenberg-Bild, sondern das sogenannte Wechselwirkungsbild (oder Dirac-Bild) am angemessensten. Wir betrachten also den Fall, wo der Hamiltonoperator von der Form

$$H = H_0 + H'(t) \quad (11.3.26)$$

ist, wobei H_0 zeit-unabhängig und exakt lösbar ist, und $H'(t)$ eine ‘kleine’ Störung beschreibt. Die Idee des Wechselwirkungsbildes ist, dass wir die (triviale) Zeitentwicklung, die von H_0 herkommt von den Zuständen auf die Observablen hinüberschieben; das Wechselwirkungsbild ist also ein Kompromiss, wo sowohl die Zustände als auch die Observablen zeit-abhängig sind.

Konkret betrachten wir also die unitäre Transformation mit $U_0(t, t_0)$, wobei U_0 der Propagator des ungestörten Problems ist, also (11.3.2) mit H_0 erfüllt. Dann definieren wir

$$\Psi_D(t) = U_0(t_0, t)\Psi(t) = U_0(t_0, t)U(t, t_0)\Psi(t_0), \quad (11.3.27)$$

wobei U der Propagator für $H = H_0 + H'$ ist, und entsprechend

$$A_D(t) = U_0(t_0, t)AU_0(t, t_0). \quad (11.3.28)$$

Die Zeitentwicklung der Zustände Ψ_D ist dann durch

$$\Psi_D(t) = U_D(t, t_0)\Psi_D(t_0) \quad (11.3.29)$$

beschrieben, wobei

$$U_D(t, t_0) = U_0(t_0, t)U(t, t_0) \quad (11.3.30)$$

ist. Der zugehörige Hamiltonoperator ist

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t U_D &= i\hbar\partial_t [e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}U(t, t_0)] \\ &= U_0(t_0, t)\underbrace{(-H_0 + H)}_{H'}U_0(t, t_0)\underbrace{U_0(t_0, t)U(t, t_0)}_{U_D} \\ &= H'_D U_D \end{aligned} \quad (11.3.31)$$

mit

$$H'_D = U_0(t_0, t)H'U_0(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}H'e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}. \quad (11.3.32)$$

Als Neumann-Reihe gilt daher

$$U_D(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H'_D(t') \right]. \quad (11.3.33)$$

11.3.4 Erste Ordnung Störungstheorie

Wir sind nun in der Lage, diese Ideen auf das Problem der zeit-abhängigen Störungstheorie anzuwenden. Wie zuvor betrachten wir ein System, bei dem der Hamiltonoperator von der Form (11.3.26) ist. Wir nehmen an, dass für $t < t_0$ $H' = 0$ ist, d.h. dass die Störung erst zur Zeit $t = t_0$ eingeschaltet wird. Die Zeitentwicklung für $t < t_0$ ist also durch H_0 beschrieben. Weiterhin können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass das System zur Zeit $t = t_0$ in dem Eigenzustand $|i\rangle$ ('initial') von H_0 mit Eigenwert \mathcal{E}_i präpariert ist. Wir wollen die Wahrscheinlichkeit berechnen, mit der das System zu einem späteren Zeitpunkt $t > t_0$ im Zustand $|f\rangle$ ('final') ist, wobei wir annehmen wollen, dass $\langle f|i\rangle = 0$.

Wie wir im vorigen Unterkapitel erklärt haben ist der zugehörige Zustand im Wechselwirkungsbild durch

$$\Psi(t) = U_D(t, t_0)|i\rangle \quad (11.3.34)$$

beschrieben. Das relevante Matrixelement ist im Wechselwirkungsbild also zu erster Ordnung

$$\begin{aligned}
\langle f|\Psi(t)\rangle &= \langle f|U_D(t, t_0)|i\rangle \\
&\simeq \underbrace{\langle f|i\rangle}_{=0} - \frac{i}{\hbar} \langle f| \int_{t_0}^t dt' H'_D(t') |i\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle f| e^{i\mathcal{E}_f(t'-t_0)/\hbar} H'(t') e^{-i\mathcal{E}_i(t'-t_0)/\hbar} |i\rangle .
\end{aligned} \tag{11.3.35}$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir daher also zu dieser Ordnung

$$P_{i\rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)t'/\hbar} \langle f|H'(t')|i\rangle \right|^2 . \tag{11.3.36}$$

Als einfaches Beispiel betrachten wir eine Störung, die abrupt eingeschaltet wird,

$$H'(t) = V\theta(t - t_0) , \tag{11.3.37}$$

wobei θ die Stufenfunktion ist, d.h. $\theta(x) = 1$ für $x \geq 0$ und $\theta(x) = 0$ für $x < 0$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir $t_0 = 0$. Mit der Definition $\omega_{if} = (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)/\hbar$ gilt dann

$$\begin{aligned}
P_{i\rightarrow f} &= \left| \frac{e^{i\omega_{if}t} - 1}{\hbar\omega_{if}} \langle f|V|i\rangle \right|^2 \\
&= \left(\frac{\sin(\omega_{if}t/2)}{\hbar\omega_{if}/2} \right)^2 |\langle f|V|i\rangle|^2 .
\end{aligned} \tag{11.3.38}$$

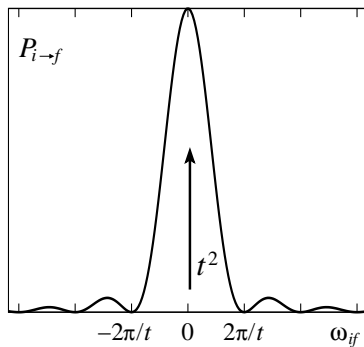


Abbildung 21: Übergangsamplitude $P_{i\rightarrow f}(\omega_{if})$. Die Fläche des zentralen Peaks wächst gemäss $t^2 \cdot (2\pi/t) \propto t$.

Der zeitabhängige Vorfaktor von (11.3.38) hat Nullstellen bei $\omega_{if}t = 2n\pi$ und verhält sich für $\omega_{if} \rightarrow 0$ wie

$$\frac{(\omega_{if}t/2)^2}{(\hbar\omega_{if}/2)^2} \approx \left(\frac{t}{\hbar} \right)^2 ,$$

vgl. Abb. 21. Für lange Zeiten $t \rightarrow \infty$ erhalten wir einen scharfen Peak bei $\omega_{if} = 0$ mit Gewicht proportional zu t .

Die Interpretation dieses Ergebnisses ist wie folgt: nach Einschalten der Störung können im Prinzip Übergänge zu allen Energien erfolgen. Die relevanten Übergänge (diese treten mit grosser Wahrscheinlichkeit auf und oszillieren nicht in der Zeit) sind diejenigen welche die Energie erhalten, $\omega_{if} = 0$, d.h. $\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_f$. Die Bandbreite der Energieerhaltung ist durch das Heisenbergsche Unschärfe Prinzip gegeben,

$$\Delta\omega_{if} \cdot t \sim 2\pi . \quad (11.3.39)$$

Das Gewicht dieser energieerhaltenden Prozesse nimmt linear mit der Zeit zu,

$$\int_{2\pi/t} P_{i \rightarrow f}(\omega) d\omega \sim t . \quad (11.3.40)$$

In der Folge betrachten wir ein Kontinuum von Zuständen oder eine Gruppe von Finalzuständen welche dicht liegen. Die Dichte dieser Zustände im Energieraum sei beschrieben durch $\rho(\mathcal{E}_f)$, das heisst, wir können Summen über Zustände $|f\rangle$ ersetzen durch Integrale über \mathcal{E}_f ,

$$\sum_f \rightarrow \int d\mathcal{E}_f \rho(\mathcal{E}_f) . \quad (11.3.41)$$

Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang in einen Zustand um $|f\rangle$ herum ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \Gamma t = \sum_f P_{i \rightarrow f}(t) &= \int d\mathcal{E}_f \rho(\mathcal{E}_f) \frac{\sin^2(\omega_{if}t/2)}{(\hbar\omega_{if}/2)^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} t \rho(\mathcal{E}_f) |\langle f|V|i\rangle|^2 \Big|_{\mathcal{E}_i=\mathcal{E}_f} . \end{aligned} \quad (11.3.42)$$

Dabei haben wir benützt, dass $\sin^2(\omega t)/\pi t \omega^2 \rightarrow \delta(\omega)$ für $t \rightarrow \infty$, sowie $d\mathcal{E}_f = \hbar d\omega_{if}$. Schliesslich haben wir angenommen, dass die Zustandsdichte $\rho(\mathcal{E}_f)$ und das Matrixelement $|\langle f|V|i\rangle|^2$ in der Umgebung von \mathcal{E}_f stetig sind. Damit erhalten wir für die Übergangsrate $dP_{i \rightarrow f}/dt = \Gamma$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \rho(\mathcal{E}_f) , \quad \text{Fermis Goldene Regel,} \quad (11.3.43)$$

wobei $2\pi\hbar/\Delta\mathcal{E}_f < t \ll 2\pi\hbar/\delta\varepsilon$, vgl. Abb. 22.

Die Zeitrestriktionen haben folgenden Ursprung:

- Der Peak in $P_{i \rightarrow f}$ muss innerhalb der Gruppe von Zuständen um f liegen. Wir bezeichnen die Breite dieser Gruppe mit $\Delta\mathcal{E}_f$, insbesondere sei das Matrixelement $|\langle i|V|f\rangle|$ innerhalb von $\Delta\mathcal{E}_f$ in etwa konstant. Dann muss $\Delta\mathcal{E}_f > 2\pi\hbar/t$ sein, vgl. Abb. 22.
- Die Dichte unter dem Peak muss genügend gross sein, d.h., die Energieseparation $\delta\varepsilon$ zwischen Zuständen klein, so dass viele Zustände innerhalb des zentralen Peaks zu liegen kommen, $\delta\varepsilon \ll 2\pi\hbar/t$, vgl. Abb. 22.

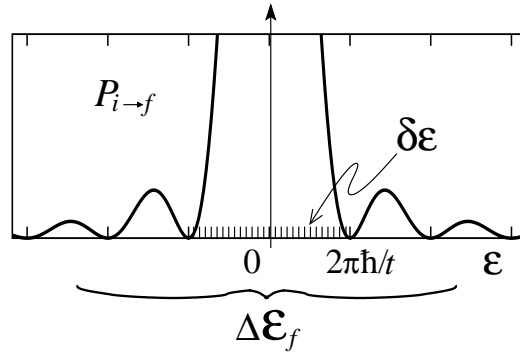


Abbildung 22: Details zur Übergangsamplitude $P_{i \rightarrow f}(\epsilon)$. Das Intervall $\Delta \mathcal{E}_f$ um den Finalzustand $|f\rangle$ mit Matrixelementen $|\langle f|V|i\rangle|_{\epsilon_f \in [\Delta \mathcal{E}_f]} \approx \text{const.}$ muss genügend breit sein, $\Delta \mathcal{E}_f > 2\pi\hbar/t$ (d.h., das Matrixelement darf sich auf der Skala $2\pi\hbar/t$ nicht stark ändern). Ein kleiner Abstand zwischen Zuständen $\delta\epsilon \ll 2\pi\hbar/t$ (grosse Zustandsdichte) garantiert korrektes ‘sampling’ des Peaks.

Literatur

- [D] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th edition, Clarendon Press, Oxford (1958).
- [H] K. Hannabuss, *An Introduction to Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford (1997).
- [DB] P.C.W. Davies, D.S. Betts, *Quantum Mechanics*, Chapman & Hall (1994).
- [M] A. Messiah, *Quantum Mechanics I*, North Holland, Amsterdam (1961).
- [LMR] P.V. Landshoff, A. Metherell, G. Rees, *Essential Quantum Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- [I] C.J. Isham, *Lectures on Quantum Theory*, Imperial College Press, London (1995).