

Quantenphysik

M. Zirnbauer
Institut für Theoretische Physik,
Universität zu Köln

SS 2013

Contents

1 Konflikte zwischen der klassischen Physik und experimentellen Beobachtungen	4
1.1 Stabilität von Atomen	4
1.2 Existenz scharfer Spektrallinien in elektromagnetischen Übergängen von Atomen .	4
1.3 Hohlraumstrahlung	5
1.4 Photoelektrischer Effekt	5
1.5 Stern-Gerlach Experiment (1922)	6
1.6 Compton-Effekt (1924)	6
2 Matrizen- und Wellenmechanik	7
2.1 Matrizenmechanik (Heisenberg, Born, Jordan)	7
2.2 Wellenmechanik (Schrödinger, 1926)	9
3 Freie Materiewellen	10
3.1 Fourier-Transformation (eine Zusammenfassung)	10
3.1.1 Eigenschaften	11
3.1.2 Unschärferelation	12
3.2 Freies Teilchen im \mathbb{R}	13
4 Quantenmechanik: Hilbertraum	14
4.1 Hilbertraum-Axiome	14
4.2 Stone-von Neumann Theorem	16
4.3 Dirac-Notation	18
4.3.1 Vollständigkeitsrelation	18
4.3.2 Matrixdarstellung linearer Operatoren	19
4.3.3 Basiswechsel	19
4.3.4 Eselsbrücken	20
4.4 Adjungierter Operator	21
4.5 Harmonischer Oszillator	22

4.6	Kohärente Zustände	24
4.6.1	Bargmann-Darstellung der Quantenmechanik	27
5	Pfadintegral und klassischer Limes	29
5.1	Propagator	29
5.2	Hamiltonsches Prinzip	30
5.3	Pfadintegral	30
5.3.1	Feynmansches Pfadintegral	34
5.4	Semiklassische Näherung	34
5.5	Hamilton-Jacobi-Gleichung	37
5.5.1	KM	37
5.5.2	QM	39
5.6	WKB-Näherung für stationäre Zustände	41
6	Geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld	44
6.1	Eichtransformationen	44
6.1.1	Klassische Mechanik	44
6.1.2	Quantenmechanik	46
6.2	Homogenes Magnetfeld: Landau-Niveaus	46
6.2.1	Landau-Eichung	47
6.2.2	Symmetrische Eichung	48
6.3	Aharonov-Bohm Effekt	51
7	Teilchen im Zentralpotential	53
7.1	Kanonische Transformationen & unitäre Operatoren	53
7.2	Reduktion durch Symmetrien	54
7.2.1	Tensorprodukt	56
7.2.2	Zerlegung nach isotypischen Komponenten	58
7.2.3	Blockdiagonalisierung	59
7.3	Darstellungen von $SO(3)$	61
7.4	Zerlegung von $L^2(\mathbb{R}^3)$	65
7.4.1	Laplace-Operator in sphärischen Polarkoordinaten	66
7.5	Teilchen im sphärischen Käfig	67
7.6	Zweikörpersystem	69
7.6.1	KM	69
7.6.2	QM	70
7.7	Energiespektrum des Wasserstoffatoms	70
7.8	Elektronenspin	72
7.8.1	Pauli-Gleichung	72
7.8.2	Drehinvarianz	73

7.8.3	Bahn- und Spindrehimpuls	75
7.8.4	Spin im homogenen Magnetfeld	76
8	Störungsrechnung	77
8.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	77
8.1.1	Motivation	77
8.1.2	Nichtentarteter Fall	77
8.1.3	Beispiel: Grundzustand von Helium	79
8.1.4	Entarteter Fall	80
8.1.5	Beispiel: Stark-Effekt für Wasserstoff	81
8.2	Zeitabhängige Störungsrechnung	83
8.2.1	Beispiel: Rabi-Oszillationen	84
8.2.2	Getriebene Übergänge	86
8.2.3	Spontane Übergänge	86
9	Verstehen wir die Quantenmechanik?	88
9.1	Formale Prinzipien der Quantenmechanik	89
9.2	Diskussionsauszüge vom Solvay-Kongress	90
9.3	Bemühungen um vollständige Formulierung	92
9.3.1	Verborgene Variablen	92
9.3.2	Viele-Welten-Interpretation	93
9.3.3	Consistent Histories	93
9.4	Bell'sche Ungleichungen und ihre Verletzung in der QM	93

Literatur – Klassiker:

- P.A.M. Dirac (1931) The Principles of Quantum Mechanics (Oxford University Press 1958)
- J. von Neumann (1932) Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (Springer Verlag 1968)

Lehrbücher:

- A. Messiah, Quantenmechanik, vol.1, de Gruyter (*ausführlich*)
- J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley (*pädagogisch*)
- Landau & Lifshitz (*Standard*)

1 Konflikte zwischen der klassischen Physik und diversen experimentellen Beobachtungen

1.1 Stabilität von Atomen

Experimente von Rutherford (1906 – 1911) zur Streuung von α -Teilchen (also Heliumkernen) an Materie ergaben, dass Atome aus Atomkern und Elektronenhülle bestehen. Nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik müsste die (beschleunigte) Bewegung der Elektronen in der Atomhülle zur kontinuierlichen Abstrahlung von elektromagnetischen Wellen und somit zu andauerndem Energieverlust führen.

Wir machen eine grobe Abschätzung der **Strahlungsverluste** für den Fall von Wasserstoff. Dazu modellieren wir das H -Atom als Elementarladung e (Elektron), die den Atomkern auf einer Kreisbahn mit Radius $R(t)$ und Frequenz $\omega(t)$ umläuft:

$$m\omega^2 R = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \implies \omega = \left(\frac{e^2/m}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right)^{1/2}.$$

Die Bewegung des Elektrons ergibt ein zeitlich veränderliches Dipolmoment. Die Strahlungsleistung eines elektrischen Dipols mit Dipolmoment $|\mu| = eR$ und Frequenz ω ist bekanntlich

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{|\mu|^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{\omega^4}{3c^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right)^3 \frac{c/R}{(mc^2)^2}.$$

Mit der vereinfachenden Annahme, dass die Bewegung des Elektrons immer kreisförmig verläuft, erhalten wir

$$-\frac{dE}{dt} = -\frac{d}{dt} \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R(t)} \right) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \frac{\dot{R}}{R}.$$

Durch Trennung der Variablen entsteht

$$\frac{(e^2/4\pi\epsilon_0)^2}{(mc^2)^2} c dt = -\frac{3}{2} R^2 dR = -\frac{1}{2} d(R^3).$$

Man sieht nun sofort, dass das Elektron in endlicher Zeit in die Singularität $R = 0$ fällt. Für den Anfangsradius $R(0) = a_{\text{Bohr}} \equiv a_0$ ist diese Zeitdauer T gegeben durch

$$T = \left(\frac{mc^2}{e^2/4\pi\epsilon_0 a_0} \right)^2 \frac{a_0}{2c} \approx \left(\frac{0,511 \text{ MeV}}{2 \cdot 13,6 \text{ eV}} \right)^2 \frac{0,5 \times 10^{-10} \text{ m}}{2 \cdot 3 \times 10^8 \text{ m/s}} \approx 3 \times 10^{-11} \text{ s}.$$

Die auf der Grundlage der klassischen Physik erwartete Lebensdauer liegt also im Pikosekundenbereich, was im Widerspruch zur beobachteten Stabilität von Atomen ist.

1.2 Existenz scharfer Spektrallinien in elektromagnetischen Übergängen von Atomen

Empirisch beobachtet man, dass die Emission und Absorption von Strahlung durch Atome bei festen, atomspezifischen Frequenzen stattfindet. Diese Frequenzen ω_{mn} lassen sich für jede Atomsorte als Differenzen "elementarer" Frequenzen ω_n ausdrücken:

$$\omega_{mn} = |\omega_m - \omega_n| \quad (\text{Ritz'sches Variationsprinzip, 1905}).$$

Für Wasserstoff ist das Schema besonders einfach (**“Balmer-Formel”**):

$$\omega_{mn} = \omega_0 \left| \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right| \quad (m, n \in \mathbb{N}),$$

mit $\omega_0 \approx 2.06 \times 10^{16} \text{s}^{-1}$. Für diese Beobachtung gibt es keine Erklärung im Rahmen der klassischen Physik.

1.3 Hohlraumstrahlung

Wir betrachten einen kubischen Hohlraum der Kantenlänge L . Durch simples Abzählen erhält man für die Dichte der elektromagnetischen Schwingungsmoden (mit Wellenzahl k) im Hohlraum den Ausdruck $\propto L^3 k^2 dk$.

Nach dem Äquipartitionsprinzip der Thermodynamik trägt jede Mode im thermischen Gleichgewicht mit Temperatur T die thermische Energie $\frac{1}{2}k_B T$ (mit k_B der Boltzmann-Konstante). Außerdem haben wir $k = \omega/c$. Die Energiedichte folgt demnach dem **Rayleigh-Jeans Gesetz**:

$$\text{Energiedichte} \propto k_B T c^{-3} \omega^2 d\omega.$$

Problem: wenn man diesen Ausdruck über alle Frequenzen integriert, um die in den elektromagnetischen Schwingungsmoden enthaltene Gesamtenergie zu ermitteln, erhält man Unendlich.

Experimentelle Beobachtungen (Stefan) und theoretische Überlegungen (**Wien, 1896**) ergaben folgendes Verhalten für hohe Frequenzen:

$$\text{Energiedichte} \propto e^{-\text{const} \times \omega/T} \omega^3 d\omega.$$

Unter einer Hypothese von “Quantelung” der Strahlungsenergie konnte Planck (1900) motivieren:

$$\text{Energiedichte} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{e^{\hbar \omega/k_B T} - 1} \quad (\text{Planck'sche Strahlungsformel})$$

mit der Planck'schen Konstanten $\hbar \approx 1,05 \times 10^{-34} \text{Js}$. Diese Formel interpoliert zwischen dem Rayleigh-Jeans Gesetz bei niedrigen Frequenzen ($\hbar \omega \ll k_B T$) und dem Wien'schen Gesetz bei hohen Frequenzen ($\hbar \omega \gg k_B T$).

Mehr hierzu findet man z.B. in N. Straumann, Physikalische Blätter, Dezember 2000.

1.4 Photoelektrischer Effekt

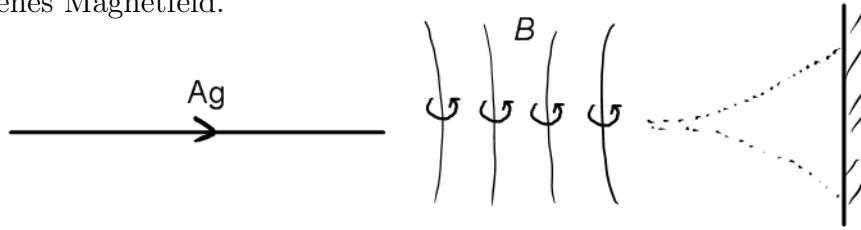
Hallwachs (1888) und Lenard (1902) beobachteten, dass Alkali-Metalle, die mit UV-Licht bestrahlt werden, Elektronen emittieren, wobei der resultierende Ladungsstrom zur eingestrahnten Intensität proportional ist. Allerdings hängt die Geschwindigkeit der emittierten Elektronen *nicht* von der Intensität (sondern nur von der Strahlungsfrequenz ω) ab!

Basierend auf der Annahme, dass Licht aus “Korpuskeln” (heute: **“Photonen”**) besteht, machte Einstein (1905) einen Erklärungsvorschlag: die Photonen “schlagen” jeweils ein Elektron aus dem Metall heraus. Energiebilanz:

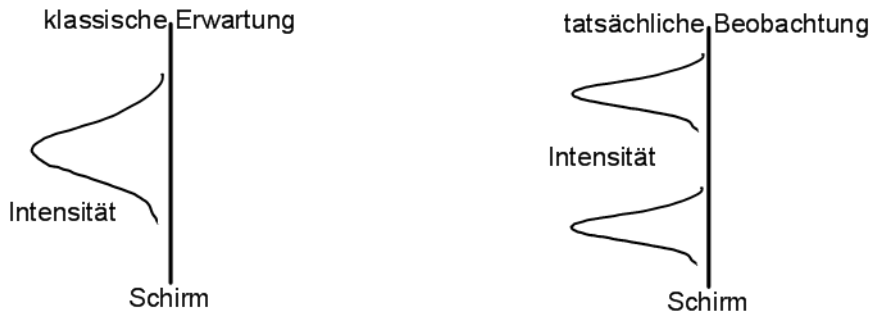
$$\frac{1}{2} m v^2 = \hbar \omega - W = \text{Energie eines Photons minus Austrittsarbeit.}$$

1.5 Stern-Gerlach Experiment (1922)

Man präpariert einen Strahl magnetischer Dipole (z.B. Ag-Atome) und sendet den Strahl durch ein inhomogenes Magnetfeld.



Die Energie eines magnetischen Dipols \vec{m} im Magnetfeld \vec{B} ist $-\vec{m} \cdot \vec{B}$. Nun sind die Dipolmomente der Ag-Atome nach Präparation isotrop verteilt. Je nach Ausrichtung eines Dipols kommt es durch die Kraftwirkung des Magnetfelds zu einer entsprechenden Ablenkung der Flugrichtung.



Quantenmechanische Erklärung. Das magnetische Dipolmoment eines Ag-Atoms (Spin $S = 1/2$) ist "quantisiert": es existieren nur zwei mögliche "Zustände".

1.6 Compton-Effekt (1924)

Es geht um die Streuung von Röntgenstrahlen an freien Elektronen. Im (einfachsten) Fall anfänglich ruhender Elektronen findet man für die Änderung $\Delta\lambda$ der Wellenlänge als Funktion des Streuwinkels θ das Ergebnis

$$\Delta\lambda = 4\pi\lambda_c \sin^2(\theta/2) \quad \text{mit} \quad \lambda_c = \frac{\hbar}{mc} = 3,86 \times 10^{-12} \text{m}$$

der **Compton-Wellenlänge** des Elektrons.

Zu beachten ist hier, dass $\Delta\lambda$ von der Wellenlänge der Röntgenstrahlung unabhängig ist (obschon die Berechnung im Rahmen der klassischen Elektrodynamik eine solche Abhängigkeit liefert)!

Der Compton-Effekt lässt sich im Einstein'schen Korpuskelbild mit Photonenenergie $E = \hbar\omega$ und Photonenimpuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (und $\omega = c|\vec{k}|$) verstehen. Obige Formel resultiert aus der Kinematik von

$$\text{Energiesatz (E):} \quad \hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \sqrt{(mc^2)^2 + p_e^2 c^2},$$

$$\text{Impulssatz (I):} \quad \hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}_e,$$

wie folgt. Man setzt (I) in (E) ein (um den Impuls \vec{p}_e des Elektrons zu eliminieren) und erhält mit $\omega_0 := mc^2/\hbar$:

$$(\omega - \omega' + \omega_0)^2 = \omega_0^2 + c^2(\vec{k} - \vec{k}')^2 = \omega_0^2 + \omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \theta.$$

Es folgt

$$2\omega_0(\omega - \omega') = 4\omega\omega' \sin^2(\theta/2)$$

und schließlich

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{2}{\omega_0} \sin^2(\theta/2).$$

Mit $\lambda = 2\pi/k = 2\pi c/\omega$ resultiert die behauptete Formel für die Änderung der Wellenlänge.

2 Matrizen- und Wellenmechanik

2.1 Matrizenmechanik (Heisenberg, Born, Jordan)

In der klassischen Physik geht man davon aus, dass man dem Ort x und Impuls p eines Teilchens gleichzeitig *scharf* bestimmte Werte zuordnen kann. Mathematisch gesprochen sind physikalische Observable f wie Ort und Impuls Funktionen im Phasenraum M ($f : M \rightarrow \mathbb{R}$), und die Algebra solcher Funktionen ist **kommutativ**; insbesondere gilt: $xp = px$.

Heisenberg, Bohr (1927): die der klassischen Physik immanente Annahme, Phänomene könnten beobachtet werden, ohne sie zu beeinflussen, ist nicht haltbar. Gravierender noch: die Messgeräte für Ort und Impuls schließen sich gegenseitig aus. Angesichts der unerklärlichen experimentellen Ergebnisse (siehe Kapitel 1) ist das klassische Postulat der gleichzeitigen Bestimmtheit (oder Bestimmbarkeit) von Ort und Impuls aufzugeben!

Heisenberg (1925): Modelliere Ort x und Impuls p (wie auch andere physikalische Größen) als Matrizen, \hat{x} und \hat{p} , mit Vertauschungsrelationen

$$(H) : \quad \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \quad (i = \sqrt{-1} = e^{i\pi/2}).$$

Mathematisch gesprochen geht Heisenberg von der durch x und p erzeugten kommutativen Funktionalgebra über zu der durch \hat{x} und \hat{p} erzeugten **nichtkommutativen** Algebra mit Vertauschungsrelationen (H).

Gebrauchsanweisung der Matrizenmechanik für ein Hamiltonsches System mit kanonischen Variablen $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$ und Energiefunktion $H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$: Suche ein System von $2N$ Matrizen Q_1, \dots, Q_N und P_1, \dots, P_N auf, das erstens den Relationen

$$Q_m Q_n - Q_n Q_m = 0, \quad P_m P_n - P_n P_m = 0, \quad P_m Q_n - Q_n P_m = -i\hbar \delta_{mn} \mathbf{1}$$

($m, n = 1, \dots, N$) genügt, und für welches zweitens die Matrix $\mathcal{E} := H(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N)$ eine Diagonalmatrix wird. Die Diagonalelemente von \mathcal{E} , sagen wir E_1, E_2, \dots , sind dann die verschiedenen möglichen Energieniveaus des Systems. Aus den Matrixelementen von Q_1, \dots, Q_N berechnen sich Übergangswahrscheinlichkeiten usw.

Bemerkungen. (i) Nach dem Satz von Darboux hat man für jedes Hamiltonsche System die lokale Existenz kanonischer Koordinaten $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$. (ii) In der Definition von \mathcal{E} gibt es i.a. eine Anordnungswillkür, auf die wir aber an dieser Stelle nicht eingehen.

Beispiel: eindimensionaler harmonischer Oszillator:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2.$$

Lösung der Gebrauchsanweisung (Heisenberg, 1925):

$$Q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$P = \left(\frac{m\hbar\omega}{2} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1}i & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1}i & 0 & -\sqrt{2}i & 0 & \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{3}i & \\ 0 & 0 & \sqrt{3}i & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{E} = \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 Q^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Die quantenmechanischen Energieniveaus des eindimensionalen harmonischen Oszillators sind also $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ für $n = 0, 1, 2, \dots$.

Bemerkung 1. Im allgemeinen ist es zweckmäßig, die Gebrauchsanweisung in zwei Schritte zu zerlegen:

1. Stelle Matrizen $Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N$ auf, welche die geforderten Vertauschungsrelationen erfüllen.
2. Suche nach einer unitären Transformation

$$Q_n \mapsto UQ_nU^\dagger, \quad P_n \mapsto UP_nU^\dagger,$$

die $\mathcal{E} = H(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N)$ diagonalisiert.

Bemerkung 2. Die gegebene Formulierung setzt voraus, dass wir eine konkrete Wahl von kanonischen Phasenraumkoordinaten $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$ getroffen haben. Eine invariante Formulierung bedient sich der **Poisson-Klammer** des klassischen Phasenraums wie folgt. Seien f, g Funktionen im Phasenraum mit Poisson-Klammer $\{f, g\} =: h$. Dann lautet die Gebrauchsanweisung der Matrizenmechanik: suche zu jedem Tripel f, g und $h = \{f, g\}$ Matrizen \hat{f}, \hat{g} und \hat{h} , die den Kommutatorrelationen

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = i\hbar \widehat{\{f, g\}} + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

genügen (modulo der notorischen Willkür in der Anordnung der Operatoren, die aber von höherer Ordnung in \hbar ist). Im Standardfall $f = q$ und $g = p$ haben wir die Poisson-Klammer $\{q, p\} = 1$, und so ergibt sich $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar \hat{1} = i\hbar \mathbf{1}$.

2.2 Wellenmechanik (Schrödinger, 1926)

Gegeben sei wieder ein Hamiltonsches System mit kanonischen Koordinaten $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$ und Hamiltonfunktion $H(q_1, \dots, p_N)$.

Gebrauchsanweisung der Wellenmechanik: Stelle für eine unbekannte komplexwertige Funktion $\psi(q_1, \dots, q_N)$ die Differentialgleichung (die sogenannte **stationäre Schrödinger-Gleichung**)

$$H \left(q_1, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \psi(q_1, \dots, q_N) = E \cdot \psi(q_1, \dots, q_N)$$

auf. Löse dieses Eigenwertproblem! Die Dichte

$$\rho := |\psi(q_1, \dots, q_N)|^2 dq_1 dq_2 \cdots dq_N$$

ist die ‘‘Wahrscheinlichkeitsdichte’’ (oder für geladene Teilchen im Ortsraum: die Ladungsdichte pro Elementarladung), wobei die Normierung $\int \rho = 1$ zu wählen ist.

Zusatz: Schrödingers Wellenmechanik macht auch Aussagen über Systeme, die sich in keinem stationären Zustand befinden. In diesem Fall ist ψ zeitabhängig und genügt der Differentialgleichung (**zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_N; t) = H \left(q_1, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \psi(q_1, \dots, q_N; t).$$

Beispiel. Wir betrachten wieder den eindimensionalen harmonischen Oszillator. Die stationäre Schrödinger-Gleichung hierfür lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \right) \psi(q) = E \psi(q).$$

Durch die Einführung einer charakterischen Längenskala $\ell := \sqrt{\hbar/m\omega}$, der sogenannten **Oszillatortlänge**, machen wir die Ortsvariable $q =: \ell x$ dimensionslos. Außerdem setzen wir $E =: \hbar\omega\nu$. Die dimensionslos gemachte Schrödinger-Gleichung für $\varphi(x) := \sqrt{\ell}\psi(\ell x)$ lautet dann

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \right) \varphi(x) = \nu \varphi(x)$$

oder, äquivalent:

$$\left(-\frac{d}{dx} + x \right) \left(\frac{d}{dx} + x \right) \varphi(x) = (2\nu - 1) \varphi(x).$$

Wegen $(d/dx + x)e^{-x^2/2} = 0$ empfiehlt sich der Ansatz $\varphi(x) = f(x)e^{-x^2/2}$. Einsetzen ergibt

$$(2\nu - 1)f = e^{x^2/2} \left(-\frac{d}{dx} + x \right) \left(f' e^{-x^2/2} \right) = -f'' + 2xf'.$$

Der Potenzreihenansatz $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$ führt jetzt auf eine simple Rekursionsbeziehung:

$$a_{k+2} = \frac{2k - 2\nu + 1}{(k+2)(k+1)} a_k.$$

Falls die Rekursion nicht abbricht (was sie nur für spezielle Werte von ν tut), haben wir für $k \rightarrow \pm\infty$ die Asymptotik $a_{k+2}/a_k \sim 2/k$, was die Asymptotik $f(x) \sim e^{+x^2}$ und $\varphi(x) \sim e^{+x^2/2}$ nach sich zieht. Eine im Unendlichen anwachsende Wellenfunktion $\varphi(x)$ ist physikalisch wie mathematisch unzulässig: wegen der Interpretation von $|\varphi(x)|^2 dx$ als Ladungsdichte (pro Elementarladung) wäre die Gesamtladung $\propto \int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 dx$ unendlich. Eine akzeptable Lösung als stationärer Zustand entsteht nur dann, wenn die Rekursion abbricht, so dass $f(x)$ lediglich polynomial anwächst. In diesem Fall muss ein $k = n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ existieren mit $2n - 2\nu + 1 = 0$. Die physikalisch akzeptablen Werte für den dimensionslosen Energie-Eigenwert ν sind demnach $\nu = \frac{1}{2}(2n + 1)$, und wir erhalten die gleichen Energieniveaus wie in der Heisenbergschen Matrizenmechanik:

$$E_n = \hbar\omega \nu_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

(Ende Beispiel.)

Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Wir besprechen hier einen Spezialfall (der allgemeine Fall wird an anderer Stelle behandelt). Zugrunde gelegt wird die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 mit Masse m und Potentialfunktion V :

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

wobei Δ den **Laplace-Operator** bezeichnet:

$$\Delta = \text{div} \circ \text{grad} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Wir multiplizieren auf beiden Seiten mit der Funktion $2\hbar^{-1}\bar{\psi}$ und nehmen den Imaginärteil. Dann entsteht eine Gleichung vom Typ einer **Kontinuitätsgleichung**:

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\psi|^2) = \bar{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi + \psi \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi} = 2 \text{Re} \left(\bar{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) = 2 \text{Im} \left(i\bar{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) = -\frac{\hbar}{m} \text{Im} (\bar{\psi} \Delta \psi) = -\text{div } j$$

mit der (Wahrscheinlichkeits-)Stromdichte

$$j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\bar{\psi} \text{grad } \psi).$$

Hieraus folgt in der üblichen Weise, nämlich durch Integration über \mathbb{R}^3 und Anwendung des Satzes von Gauss, die zeitliche Konstanz der Gesamtwahrscheinlichkeit:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z; 0)|^2 dx dy dz \equiv 1.$$

Für ein Teilchen mit Ladung e und Wellenfunktion ψ ist wie schon erwähnt $e |\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz$ als die elektrische Ladungsdichte des Teilchens zu interpretieren. Dementsprechend ist die vektorielle Größe $(e\hbar/m) \text{Im}(\bar{\psi} \text{grad } \psi)$ das Vektorfeld der zugehörigen elektrischen Stromdichte.

3 Freie Materiewellen

3.1 Fourier-Transformation (eine Zusammenfassung)

Für $f \in L^1(\mathbb{R})$, d.h. falls $\int_{\mathbb{R}} |f(x)| dx < \infty$, existiert die **Fourier-Transformierte**

$$\tilde{f}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-ikx} dx.$$

Die Umkehr-Transformation (falls existent) wird ausgedrückt durch

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{+ikx} dk.$$

3.1.1 Eigenschaften

(i) **PQ-Regel.** Für

$$\begin{aligned} (Qf)(x) &:= xf(x) && \text{(Multiplikationsoperator),} \\ (Pf)(x) &:= \frac{1}{i} \frac{d}{dx} f(x) && \text{(Ableitungsoperator),} \end{aligned}$$

gilt

$$\widetilde{Qf} = -P\tilde{f}, \quad \widetilde{Pf} = Q\tilde{f}.$$

Durch Iteration folgen die allgemeineren Relationen

$$\widetilde{Q^n f} = (-P)^n \tilde{f}, \quad \widetilde{P^n f} = Q^n \tilde{f}.$$

(ii) “Je glatter f ist, desto schneller fällt \tilde{f} im Unendlichen ab (und umgekehrt)”.

Beweis. Aus $Q^n \tilde{f} = \widetilde{P^n f}$ folgt mittels Dreiecks-Ungleichung

$$\sqrt{2\pi} |k^n \tilde{f}(k)| = \left| \int_{\mathbb{R}} (P^n f)(x) e^{-ikx} dx \right| \leq \int_{\mathbb{R}} |f^{(n)}(x)| dx,$$

wobei $f^{(n)}$ die n -te Ableitung von f bezeichnet (falls diese existiert). Also haben wir die Implikation

$$f^{(n)} \in L^1(\mathbb{R}) \implies |\tilde{f}(k)| \leq \text{const} \times |k|^{-n}.$$

(iii) **Faltungssatz.** Für das Faltungsintegral

$$(f * g)(x) := \int_{\mathbb{R}} f(x-y)g(y)dy$$

gilt

$$\widetilde{f * g} = \sqrt{2\pi} \tilde{f} \cdot \tilde{g}, \quad \widetilde{f \cdot g} = \sqrt{2\pi}^{-1} \tilde{f} * \tilde{g}.$$

Unter Fourier-Transformation geht also das Faltungsintegral in das Produkt der Fourier-Transformierten über (und umgekehrt).

(iv) **Plancherel-Formel.** Die Fourier-Transformation $f \mapsto \tilde{f}$ ist eine Isometrie der L^2 -Norm, d.h.

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\tilde{f}(k)|^2 dk.$$

Allgemeiner gilt für zwei Funktionen $f, g \in L^2(\mathbb{R})$

$$\int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}g(x)dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\tilde{f}(k)}\tilde{g}(k)dk.$$

3.1.2 Unschärferelation

Falls die Normierungsbedingung $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1$ erfüllt ist, nennen wir

$$\text{var}(x) := \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 := \int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx - \left(\int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 dx \right)^2$$

das Quadrat der **Orts-Unschärfe** der Wellenfunktion ψ . Nach der Plancherel-Formel haben wir auch die Normierung $\int_{\mathbb{R}} |\tilde{\psi}(k)|^2 dk = 1$, und wir nennen

$$\text{var}(k) := \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 := \int_{\mathbb{R}} k^2 |\tilde{\psi}(k)|^2 dk - \left(\int_{\mathbb{R}} k |\tilde{\psi}(k)|^2 dk \right)^2$$

das Quadrat der **Wellenzahl-Unschärfe**. Mittels einer Kombination von PQ -Regel und der allgemeinen Form der Plancherel-Formel erhält man

$$\text{var}(k) = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 \psi(x) dx - \left(\int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(x) \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx \right)^2.$$

Aus den genannten Eigenschaften der Fourier-Transformation folgt, dass das Produkt der Unschärfen $\Delta x := \sqrt{\text{var}(x)}$ und $\Delta k := \sqrt{\text{var}(k)}$ nach unten beschränkt ist:

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1/2 \quad (\text{Unschärferelation}).$$

Beweis. Für beliebigen Längenparameter $L \neq 0$ gilt

$$\begin{aligned} 0 \leq \int_{\mathbb{R}} |(L^{-1}Q + iLP)\psi(x)|^2 dx &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} (L^{-1}Q - iLP) (L^{-1}Q + iLP) \psi(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} (L^{-2}Q^2 + L^2P^2 - iPQ + iQP) \psi(x) dx. \end{aligned}$$

Nun ist $-iPQ + iQP = -1$ und die Ungleichung vereinfacht sich zu

$$1 = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} \psi(x) dx \leq \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} (L^{-2}Q^2 + L^2P^2) \psi(x) dx.$$

Ohne Verlust dürfen wir jetzt annehmen:

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 dx = 0 = \int_{\mathbb{R}} k |\tilde{\psi}(x)|^2 dk = \langle k \rangle.$$

(Der allgemeine Fall lässt sich leicht hierauf zurückführen.) Dann erhalten wir

$$1 \leq L^{-2} \text{var}(x) + L^2 \text{var}(k).$$

Diese Ungleichung gilt für alle L , insbesondere gilt sie auch am Minimum der rechten Seite. Da das Minimum für $L^2 = \sqrt{\text{var}(x)/\text{var}(k)}$ angenommen wird, folgt die Behauptung.

Bemerkung 1. Die Unschärferelation passt zum Argument von Heisenberg und Bohr, dass sich die Messgeräte für Ort und Impuls gegenseitig ausschließen.

Bemerkung 2. Obwohl wir hier die Fourier-Transformation nur für Funktionen einer einzigen Veränderlichen betrachtet haben, sollte die Verallgemeinerung / Übertragung zum Fall von vielen Veränderlichen keine Schwierigkeiten bereiten.

3.2 Freies Teilchen im \mathbb{R}

Betrachte die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen in einer Raumdimension:

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

Mittels Fourier-Transformation und Anwendung der PQ -Regel geht diese Gleichung über in

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(k, t) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k, t).$$

Die Lösung hierzu für vorgegebene Anfangsfunktion $\psi(x, t = 0)$ ist

$$\tilde{\psi}(k, t) = e^{-it \frac{\hbar k^2}{2m}} \tilde{\psi}(k, 0).$$

Fourier-Umkehr liefert das Ergebnis

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-it \frac{\hbar k^2}{2m} + ikx} \tilde{\psi}(k, 0) dk.$$

Mit dem Faltungssatz (dessen Anwendung hier leider mathematisch heikel ist, da die Funktion $k \mapsto \exp\left(-it \frac{\hbar k^2}{2m}\right)$ nicht in $L^1(\mathbb{R})$ liegt; es funktioniert aber trotzdem) erhält man

$$\psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}} K(x - y; t) \psi(y, 0) dy.$$

Der “Propagator” genannte Kern des Faltungsintegrals wird ausgedrückt durch

$$K(x - y; t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-it \frac{\hbar k^2}{2m}} e^{ik(x-y)} dk = (2\pi i t \hbar / m)^{-1/2} e^{i \frac{m}{2\hbar} \frac{(x-y)^2}{t}}.$$

Gruppengeschwindigkeit. Die obige Lösung für $\psi(x, t)$ lässt sich mit $\omega(k) := \hbar k^2 / 2m$ (“Dispersionsrelation”) auch wie folgt schreiben:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{i(kx - \omega(k)t)} \tilde{\psi}(k, 0) dk.$$

Nun machen wir die Annahme, dass $\tilde{\psi}(k, t = 0)$ um eine bestimmte Wellenzahl $k = k_0$ konzentriert sei. Dann tragen nur Wellenzahlen in der Nähe von k_0 zum Integral bei, und wir dürfen $\omega(k)$ durch seine Taylor-Entwicklung um die Stelle k_0 ersetzen:

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0)\omega'(k_0) + \dots$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\approx e^{-i(\omega(k_0) - k_0 \omega'(k_0)t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ik(x - \omega'(k_0)t)} \tilde{\psi}(k, 0) dk \\ &= e^{i\nu t} \psi(x - \omega'(k_0)t, 0), \end{aligned}$$

wobei $\nu = -\omega(k_0) + k_0 \omega'(k_0) = \hbar k_0^2 / 2m$. In dieser Näherung bewegt sich das Wellenpaket (abgesehen von der Phasenänderung durch den Vorfaktor $e^{i\nu t}$) einfach als Ganzes durch Verschiebung mit der durch $x - \omega'(k_0)t = \text{const}$ bestimmten Geschwindigkeit

$$v_g := \omega'(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (\text{Gruppengeschwindigkeit}).$$

4 Quantenmechanik: Hilbertraum

4.1 Hilbertraum-Axiome

Zu den formalen Grundlagen der Quantenmechanik gehört der "abstrakte" Hilbertraum. Hier soll zunächst einmal definiert werden, was mit dem Begriff "Hilbertraum" überhaupt gemeint ist.

Ein komplexer Hilbertraum \mathcal{H} ist eine Menge mit den folgenden Eigenschaften:

- (i) \mathcal{H} ist ein komplexer Vektorraum, d.h. mit $f, g \in \mathcal{H}$ und $a, b \in \mathbb{C}$ liegt auch die Linearkombination $af + bg$ in \mathcal{H} .
- (ii) In \mathcal{H} ist ein Hermitesches Skalarprodukt erklärt, d.h. eine Abbildung $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ mit den Eigenschaften:

– Linearität bezüglich des zweiten Arguments:

$$(f, a_1g_1 + a_2g_2) = a_1(f, g_1) + a_2(f, g_2);$$

– Hermitesche Symmetrie: $(f, g) = \overline{(g, f)}$;

– Positive Semidefinitheit: $(f, f) \geq 0$ und $((f, f) = 0 \Leftrightarrow f = \mathbf{0})$.

(iii) \mathcal{H} ist vollständig, d.h. jede Cauchy-Folge in \mathcal{H} konvergiert gegen einen Grenzwert in \mathcal{H} .

(iv) \mathcal{H} ist separabel, d.h. es existiert eine Folge $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ in \mathcal{H} , die in \mathcal{H} überall dicht ist.

Bemerkung 1. Natürlich gelten in \mathcal{H} alle aus der linearen Algebra bekannten Rechengesetze, wie $f + g = g + f$, $a(f + g) = af + ag$, $(a + b)f = af + bf$, $1 \cdot f = f$, $0 \cdot f = \mathbf{0}$ (Nullvektor). Der Begriff der linearen Unabhängigkeit von Vektoren (und darauf aufbauend: die Dimension von Unterräumen) ist wie üblich erklärt.

Bemerkung 2. Das Hermitesche Skalarprodukt bestimmt auf \mathcal{H} eine Norm durch $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$. Damit haben wir auf \mathcal{H} eine Topologie und einen Konvergenzbegriff.

Bemerkung 3. Eine Folge $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ heißt Cauchy-Folge, falls zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $N \in \mathbb{N}$ existiert, so dass für all Zahlenpaare $m, n \geq N$ gilt: $\|f_m - f_n\| < \varepsilon$. Die Aussage von Axiom (iii) ist, dass in einem Hilbertraum \mathcal{H} jede Cauchy-Folge f_1, f_2, \dots einen Grenzwert $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n$ besitzt, der in \mathcal{H} liegt.

Bemerkung 4. Eine Folge f_1, f_2, \dots heißt "dicht", wenn zu jedem $f \in \mathcal{H}$ komplexe Zahlen $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ existieren mit $\sum_{k=1}^{\infty} a_k f_k = f$.

Bemerkung 5. Die Dimension von \mathcal{H} kann endlich oder unendlich sein. Im Fall von $\mathcal{H} < \infty$ erübrigen sich die Axiome (iii) und (iv), denn sie folgen dann schon aus der Struktur des normierten Vektorraums \mathcal{H} .

Beispiel. Betrachte die Menge $\ell^2(\mathbb{N})$ aller Zahlensequenzen $f = \{a_1, a_2, \dots, a_n, \dots\}$ mit komplexen Einträgen a_k und $\|f\|^2 := \sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 < \infty$. Diese Menge bildet in der natürlichen Weise

einen komplexen Vektorraum: Mit $f \in \ell^2(\mathbb{N})$ ist für $c \in \mathbb{C}$ auch $c \cdot f := \{ca_1, ca_2, \dots, ca_n, \dots\}$ in $\ell^2(\mathbb{N})$ enthalten und wegen

$$\sum_{k=1}^{\infty} |a_k + b_k|^2 \leq \sum_{k=1}^{\infty} (|a_k + b_k|^2 + |a_k - b_k|^2) = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (|a_k|^2 + |b_k|^2)$$

liegt mit f und f' auch die Summe

$$f + f' := \{a_1 + a'_1, a_2 + a'_2, \dots, a_n + a'_n, \dots\}$$

in $\ell^2(\mathbb{N})$. Nun gilt

$$\left| \sum_{k=1}^{\infty} \bar{a}_k b_k \right| \leq \sum_{k=1}^{\infty} |a_k b_k| \leq \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} (|a_k|^2 + |b_k|^2).$$

Deshalb wird auf $\ell^2(\mathbb{N})$ durch

$$(f, f') := \sum_{k=1}^{\infty} \bar{a}_k a'_k$$

ein Hermitesches Skalarprodukt erklärt.

Wenn f_1, f_2, \dots eine Cauchy-Folge in $\ell^2(\mathbb{N})$ ist, dann bilden die n -ten Einträge der Zahlensequenzen f_1, f_2, \dots für jedes $n \in \mathbb{N}$ eine Cauchy-Folge in \mathbb{C} . Aus der Vollständigkeit von \mathbb{C} folgt dann sofort die Vollständigkeit von $\ell^2(\mathbb{N})$.

Schließlich ist $\ell^2(\mathbb{N})$ separabel, denn die Folge $f_1 = \{1, 0, \dots\}$, $f_2 = \{0, 1, 0, \dots\}$, ..., $f_n = \{0, \dots, 0, 1, 0, \dots\}$ (1 an der n -ten Position) liegt in $\ell^2(\mathbb{N})$ überall dicht. Also ist $\ell^2(\mathbb{N})$ ein Hilbertraum. (Es handelt sich um den Hilbertraum der **Matrizenmechanik**.)

Beispiel 2. Betrachte die Menge aller Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx < \infty$, wobei Integration im Lebesgue'schen Sinn zu verstehen ist. Zwei Funktionen f und g , die fast überall gleich sind (d.h. $f(x) = g(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}$ außer einer Menge vom **Lebesgue-Maß** Null), werden miteinander identifiziert: sie entsprechen demselben Vektor in dem zu konstruierenden Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$. Addition, Skalarmultiplikation und Hermitesches Skalarprodukt in $L^2(\mathbb{R})$ werden folgendermaßen erklärt:

$$\begin{aligned} (f + g)(x) &:= f(x) + g(x), \\ (a \cdot f)(x) &:= a f(x), \\ (f, g) &:= \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)} g(x) dx. \end{aligned}$$

Die Schlussfolgerungen

$$f, g \in L^2(\mathbb{R}) \implies f + g \in L^2(\mathbb{R}) \quad \text{und} \quad (f, g) < \infty$$

zieht man wie unter Beispiel 1. Zur positiven Semi-Definitheit des Skalarprodukts: aus $0 = (f, f) = \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx$ folgt $f(x) = 0$ fast überall; und jede fast überall verschwindende Funktion repräsentiert den Nullvektor in $L^2(\mathbb{R})$.

Mit etwas Aufwand (6 Seiten in J. von Neumanns Buch) lässt sich auch die Vollständigkeit und Separabilität von $L^2(\mathbb{R})$ zeigen. $L^2(\mathbb{R})$ ist der Hilbertraum der Wellenmechanik in einer Raumdimension (Ende Beispiel).

Einige grundlegende Aussagen über Hilberträume sind

Satz 1 (Cauchy-Schwartz-Ungleichung):

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|, \quad \text{und}$$

$$|(f, g)| = \|f\| \cdot \|g\| \iff f = a \cdot g \quad (a \in \mathbb{C}).$$

Satz 2 (Dreiecks-Ungleichung):

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\| \quad \text{und}$$

$$\|f + g\| = \|f\| + \|g\| \iff f = rg \quad (r \in \mathbb{R}_+).$$

Satz 3: Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$, ein **Orthonormalsystem** in \mathcal{H} , d.h. $(\varphi_k, \varphi_l) = \delta_{kl}$. Dann sind die folgenden Aussagen untereinander äquivalent:

$$\begin{aligned} &\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots, \text{ ist vollständig,} \\ &\iff \text{span}_{\mathbb{C}}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots\} = \mathcal{H}, \\ &\iff \forall f \in \mathcal{H}: f = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k(\varphi_k, f), \\ &\iff \forall f, g \in \mathcal{H}: (f, g) = \sum_{k=1}^{\infty} (f, \varphi_k)(\varphi_k, g). \end{aligned}$$

4.2 Stone-von Neumann Theorem

Thema dieses Abschnitts ist die ‘‘Darstellungsunabhängigkeit’’ der Quantenmechanik, insbesondere die Äquivalenz von Matrizen- und Wellenmechanik. Dazu führen wir zunächst einige grundlegende Begriffe ein.

Definition. Sei G eine Gruppe, V ein (komplexer) Vektorraum und **GL(V)** die Gruppe aller bijektiven linearen Transformationen $g: V \rightarrow V$. Eine Abbildung

$$\mathcal{D}: G \rightarrow \text{GL}(V)$$

heißt eine **Darstellung** von G auf V , falls gilt

$$\mathcal{D}(g_1 g_2) = \mathcal{D}(g_1) \mathcal{D}(g_2) \quad (\text{für alle } g_1, g_2 \in G).$$

Ist V ein Hilbertraum mit Hermiteschem Skalarprodukt (\cdot, \cdot) und gilt

$$(\mathcal{D}(g)f_1, \mathcal{D}(g)f_2) = (f_1, f_2)$$

für alle $g \in G$ und $f_1, f_2 \in V$, so heißt die Darstellung **unitär**.

Beispiel. Sei $\text{SO}(2)$ die Gruppe aller Drehungen (mit dem Ursprung als Fixpunkt) in der Euklidischen Ebene \mathbb{R}^2 . Die Drehung um den Winkel θ sei mit g^θ bezeichnet. (Bezüglich einer kartesischen Basis wird g^θ durch die Drehmatrix $\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ ausgedrückt.) Es sei nun $V \equiv \mathbb{C}$ mit dem Hermiteschen Skalarprodukt $(f_1, f_2) := \bar{f}_1 f_2$ ausgestattet. Dann ist für jedes $m \in \mathbb{Z}$ die Abbildung

$$\mathcal{D} : \text{SO}(2) \rightarrow \text{GL}(\mathbb{C}), \quad g^\theta \mapsto \mathcal{D}(g^\theta) = e^{im\theta},$$

eine unitäre Darstellung von $\text{SO}(2)$ auf dem eindimensionalen Vektorraum \mathbb{C} (Ende Beispiel).

Definition. Unter der *Heisenberg-Gruppe* (zum Phasenraum \mathbb{R}^{2n}) versteht man die Gruppe von Matrizen

$$g_{a,b,c} := \begin{pmatrix} 1 & a_1 & a_2 & \dots & a_n & c \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & b_1 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & b_n \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & a & c \\ \mathbf{0} & \text{Id}_n & b \\ 0 & \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix},$$

für $a \in (\mathbb{R}^n)^*$ (Zeilenvektor), $b \in \mathbb{R}^n$ (Spaltenvektor) und $c \in \mathbb{R}$. Man verifiziert leicht, dass solche Matrizen dem folgenden Verknüpfungsgesetz (unter Multiplikation) genügen:

$$g_{a,b,c} g_{a',b',c'} = g_{a+a',b+b',c+c'+a \cdot b'}, \quad a \cdot b' = \sum_{k=1}^n a_k b'_k.$$

Bemerkung. Man stelle sich vor, dass $g_{a,0,0}$ einer Translation um den Vektor a im Ortsraum entspricht und $g_{0,b,0}$ einer Translation im Impulsraum um den Impulsvektor b . Wie wir gleich sehen werden, gibt das nichtkommutative Verhalten im dritten Argument ($c \in \mathbb{R}$) die quantenmechanische Nichtvertauschbarkeit von Translationen in Ort und Impuls wieder.

Lemma. Sei $L^2(\mathbb{R}^n)$ der Hilbertraum der Wellenmechanik, also der Raum aller Lebesgue-quadratintegrierbaren Funktionen auf \mathbb{R}^n mit dem Hermiteschen Skalarprodukt $(f_1, f_2) = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f_1(x)} f_2(x)$. Die Heisenberg-Gruppe (zum Phasenraum \mathbb{R}^{2n}) wird auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ unitär dargestellt durch

$$(\mathcal{D}(g_{a,b,c})f)(x) = e^{i(b \cdot x - c)/\hbar} f(x - a).$$

Aufgabe. Verifiziere die Unitarität $(\mathcal{D}(g_{a,b,c})f_1, \mathcal{D}(g_{a,b,c})f_2) = (f_1, f_2)$ und die Darstellungseigenschaft $\mathcal{D}(g_{a,b,c} g_{a',b',c'}) = \mathcal{D}(g_{a,b,c})\mathcal{D}(g_{a',b',c'})$.

Definition. Sei $\mathcal{D} : G \rightarrow \text{GL}(V)$ eine Darstellung. Ein Unter-Vektorraum $U \subset V$ heißt *invariant*, falls gilt

$$u \in U \implies (\forall g \in G : \mathcal{D}(g)u \in U).$$

\mathcal{D} heißt *irreduzibel*, falls es keine invarianten Unter-Vektorräume außer $U \equiv V$ und $U = \mathbf{0}$ gibt. Zwei Darstellungen $\mathcal{D}_1 : G \rightarrow \text{GL}(V_1)$ und $\mathcal{D}_2 : G \rightarrow \text{GL}(V_2)$ heißen *äquivalent*, falls eine bijektive lineare Abbildung $T_{21} : V_1 \rightarrow V_2$ existiert mit

$$\mathcal{D}_2(g)T_{21} = T_{21}\mathcal{D}_1(g) \quad (\text{für alle } g \in G).$$

Satz (Stone-von Neumann). Alle irreduziblen unitären Darstellungen (außer der trivialen) der Heisenberg-Gruppe (zu festem Wert der Planck'schen Konstanten \hbar) sind zueinander äquivalent.

Korollar. Insbesondere sind die in der Wellenmechanik und Matrizenmechanik verwendeten Darstellungen der Heisenberg-Gruppe zueinander äquivalent. Den Isomorphismus $T : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow \ell^2(\mathbb{N})$ (Übergang von der Wellenmechanik zur Matrizenmechanik) erhält man wie folgt. Sei $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots$ eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R})$, für welche die **“Matrixelemente”**

$$Q_{kl} := \int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi_k(x)} x \varphi_l(x) dx,$$

$$P_{kl} := \int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi_k(x)} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi_l(x) dx$$

existieren. (Diese Forderung wird z.B. von den normierten stationären Zuständen des harmonischen Oszillators erfüllt. Wir werden diese im nächsten Abschnitt konstruieren.) Dann stellt $T : L^2(\mathbb{R}) \ni f \mapsto \{(\varphi_1, f), (\varphi_2, f), \dots, (\varphi_n, f), \dots\} \in \ell^2(\mathbb{N})$ den gewünschten Isomorphismus her.

4.3 Dirac-Notation

Auf der Grundlage des Stone-von Neumann Theorems macht die Vorstellung von einem “abstrakten” Hilbertraum \mathcal{H} Sinn. Damit meint man die Äquivalenzklasse aller Hilberträume, auf denen die Heisenberg-Gruppe unitär und irreduzibel dargestellt wird, und die somit nach Stone-von Neumann zueinander isomorph sind. Für den Hilbertraum \mathcal{H} im abstrakten Sinn gelten also die Hilbertraum-Axiome (i)–(iv), aber die konkrete Realisierung der Vektoren und des Hermiteschen Skalarprodukts bleibt unspezifiziert.

In der Notation von P.A.M. Dirac (1931) schreibt man $|\psi\rangle$ für die Elemente des abstrakten Hilbertraums \mathcal{H} . Solche abstrakten Hilbertvektoren heißen nach Dirac **“ket-Vektoren”**. Für das Hermitesche Skalarprodukt zweier abstrakter Hilbertvektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ schreibt man $\langle\psi|\phi\rangle$. Jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist durch

$$\langle\psi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\phi\rangle \mapsto \langle\psi|\phi\rangle$$

eine stetige lineare Funktion auf \mathcal{H} zugeordnet. Diese Funktion $\langle\psi|$ heißt nach Dirac ein **“bra-Vektor”**. Die bra-Vektoren bilden einen zweiten Hilbertraum, \mathcal{H}^* , den sogenannten Dualraum zu \mathcal{H} . Als reeller Vektorraum (jedoch nicht als komplexer Vektorraum!) ist \mathcal{H}^* zu \mathcal{H} isomorph: dem ket-Vektor $a|\psi\rangle + b|\phi\rangle$ (für $a, b \in \mathbb{C}$) entspricht der bra-Vektor $\bar{a}\langle\psi| + \bar{b}\langle\phi|$.

4.3.1 Vollständigkeitsrelation

Da \mathcal{H} laut Axiom (iv) separabel ist, existieren vollständige Orthonormalsysteme, sagen wir

$$|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle, \dots$$

Nach Satz 3 von Abschnitt 4.1 gilt für jedes solche System (und alle ψ, ψ_1 und ψ_2 in \mathcal{H})

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|\psi\rangle$$

und

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_1 | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi_2 \rangle.$$

Diesen Sachverhalt drückt man in der Dirac-Notation auch wie folgt aus:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbf{1} \quad (\text{“Vollständigkeit”}). \quad (4.1)$$

Wenn aus dem Kontext klar hervorgeht, um welche Orthonormalbasis es sich handelt, benützen wir auch die schlichte Notation

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}.$$

4.3.2 Matrixdarstellung linearer Operatoren

Sei $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eine komplex lineare Abbildung (kurz: ein “Operator”). Die durch

$$A|\varphi_l\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k\rangle A_{kl}^{(\varphi)} \quad (4.2)$$

bestimmten komplexen Zahlen $A_{kl}^{(\varphi)}$ heißen die **Matrixelemente** von A bzgl. der Basis $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$. Ist diese Basis nun eine Orthonormalbasis und schieben wir die Vollständigkeitsrelation ein,

$$A|\varphi_l\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k | A | \varphi_l \rangle,$$

so suggeriert der Vergleich mit (4.2) die Dirac’sche Schreibweise für Matrixelemente:

$$A_{kl}^{(\varphi)} \equiv \langle \varphi_k | A | \varphi_l \rangle.$$

4.3.3 Basiswechsel

Nun seien zwei Orthonormalbasen gegeben:

$$|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, \quad \text{und} \quad |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots .$$

Dann gelten die Relationen

$$\begin{aligned} \delta_{ab} &= \langle \psi_a | \psi_b \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_a | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi_b \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \overline{\langle \varphi_n | \psi_a \rangle} \langle \varphi_n | \psi_b \rangle, \\ \delta_{kl} &= \langle \varphi_k | \varphi_l \rangle = \sum_{c=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \psi_c \rangle \langle \psi_c | \varphi_l \rangle = \sum_{c=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \psi_c \rangle \overline{\langle \varphi_l | \psi_c \rangle}. \end{aligned}$$

Folglich sind die komplexen Zahlen $U_{na} := \langle \varphi_n | \psi_a \rangle$ die Matrixelemente einer **unitären Matrix**:

$$\delta_{ab} = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{U}_{na} U_{nb}, \quad \delta_{kl} = \sum_{c=1}^{\infty} U_{kc} \bar{U}_{lc}.$$

Diese Matrix ist die Matrixdarstellung (bzgl. der Basis $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$) des durch

$$|\psi_a\rangle = U |\varphi_a\rangle \quad (a = 1, 2, \dots)$$

bestimmten unitären Operators U .

Wie transformieren sich nun die Matrixelemente eines linearen Operators A beim Wechsel zwischen den Orthonormalbasen $\{|\varphi_k\rangle\}$ und $\{|\psi_a\rangle\}$? Hierzu betrachten wir die Gleichung

$$\langle\psi_a|A|\psi_b\rangle = \sum_{k,l=1}^{\infty} \langle\psi_a|\varphi_k\rangle \langle\varphi_k|A|\varphi_l\rangle \langle\varphi_l|\psi_b\rangle,$$

auf deren rechter Seite wir die Vollständigkeitsrelation für die φ -Basis gleich zweimal eingeschoben haben. In der obigen (prä-Dirac) Notation lautet diese Gleichung

$$A_{ab}^{(\psi)} = \sum_{k,l=1}^{\infty} U^{-1}_{ak} A_{kl}^{(\varphi)} U_{lb}.$$

Beachte: $U^{-1}_{ak} = U^{\dagger}_{ak} = \bar{U}_{ka}$ aufgrund der Unitarität von U . Für die umgekehrte Richtung gilt

$$A_{kl}^{(\varphi)} = \sum_{a,b=1}^{\infty} U_{ka} A_{ab}^{(\psi)} U^{-1}_{bl}.$$

4.3.4 Eselsbrücken

In der Dirac-Notation benützt man auch Konventionen, die nicht mathematisch sinnvoll sind, aber dennoch einen guten Zweck erfüllen. Hier ist zu nennen:

$$\int_{\mathbb{R}} dq |q\rangle\langle q| = \mathbf{1} = \int_{\mathbb{R}} dp |p\rangle\langle p|. \quad (4.3)$$

Diese “Vollständigkeitsrelationen” sind (4.1) nachempfunden, verwenden aber anstößige Objekte: die sogenannten **“Ortseigenzustände”** $|q\rangle$ sollen die Eigenschaft $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ haben, können aber als solche nicht im Hilbertraum der Quantentheorie liegen. Das gleiche gilt für die sog. “Impulseigenzustände”, $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$.

Trotzdem führen die mathematisch inakzeptablen Gleichungen (4.3) bei passendem Gebrauch zu hilfreichen und akzeptablen Relationen. Das funktioniert wie folgt. Drücken wir das Hermitesche Skalarprodukt von f_1 mit f_2 einerseits in der Schrödinger’schen Wellenmechanik und andererseits mit Hilfe von (4.3) aus, so erhalten wir:

$$\int_{\mathbb{R}} \overline{f_1(q)} f_2(q) dq = (f_1, f_2) = \langle f_1 | f_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dq \langle f_1 | q \rangle \langle q | f_2 \rangle.$$

Hieraus liest man ab, dass dem Ausdruck $\langle q | f \rangle$ die Bedeutung der Wellenfunktion der Schrödinger-Wellenmechanik (kurz: **“Ortsdarstellung”**) zukommt:

$$\langle q | f \rangle \equiv f(q), \quad \langle f | q \rangle \equiv \overline{f(q)}.$$

Ähnlich läuft es bei **Anwesenheit linearer Operatoren**. Sei \hat{A} ein abstrakter Operator, der in der Ortsdarstellung (Wellenmechanik) durch A dargestellt wird. Insbesondere ist $A = (\hbar/i)d/dq$ für $\hat{A} = \hat{p}$ und $A = q$ (Multiplikation mit q) für $\hat{A} = \hat{q}$. Dann

$$\int_{\mathbb{R}} \overline{f_1(q)} A f_2(q) dq = (f_1, A f_2) = \langle f_1 | \hat{A} | f_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dq \langle f_1 | q \rangle \langle q | \hat{A} | f_2 \rangle.$$

Durch Vergleich der rechten mit der linken Seite ergibt sich

$$\langle q | \hat{A} | f \rangle = A f(q).$$

Insbesondere hat man

$$\langle q | \hat{q} | f \rangle = q f(q), \quad \langle q | \hat{p} | f \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} f(q). \quad (4.4)$$

Eine mögliche und m.E. gute Sichtweise ist es, diese letzten Relationen als Definitionen (jeweils der linken Seite) zu sehen und (4.3) als eine ‘‘Eselsbrücke’’, mit der man sich diese Definitionen leicht merkt.

4.4 Adjungierter Operator

Es seien zwei komplexe Vektorräume V und W (zunächst endlicher Dimension) gegeben, die jeweils mit einem Hermiteschen Skalarprodukt, $(\cdot, \cdot)_V$ bzw. $(\cdot, \cdot)_W$, ausgestattet sind. Zudem sei auch noch eine komplex lineare Abbildung $A : V \rightarrow W$ gegeben.

Definition. Die zu A (Hermitesch) **adjungierte** komplex lineare Abbildung $A^\dagger : W \rightarrow V$ ist erklärt durch

$$\forall v, w \in V \times W : (A^\dagger w, v)_V = (w, Av)_W.$$

Eine komplex lineare Abbildung $A : V \rightarrow V$ mit der Eigenschaft $A^\dagger = A$ heißt **selbst-adjungiert**.

Bemerkungen. (i) Für den Sinn dieser Definition spielt es eine Rolle, dass jedes Hermitesche Skalarprodukt nichtentartet ist. (ii) Für $z \in \mathbb{C}$ folgt

$$(zA)^\dagger = \bar{z}A^\dagger.$$

(iii) Falls die Hilberträume V und W unendliche Dimension haben und der lineare Operator A (wie z.B. die Operatoren für Ort und Impuls) unbeschränkt ist, verlangt die Definition von A^\dagger mehr Aufwand. Wir erwähnen nur, dass in diesem Fall der jeweilige Definitionsbereich zu berücksichtigen ist, gehen darauf aber nicht näher ein. (iv) Die Operatoren für Ort und Impuls sind selbst-adjungiert:

$$q = q^\dagger, \quad p = p^\dagger. \quad (4.5)$$

4.5 Harmonischer Oszillator

Seien \hat{q} und \hat{p} die Operatoren für Ort und Impuls im abstrakten Hilbertraum (für 1 Raumdimension, $d = 1$). Den bekannten Hamilton-Operator H des harmonischen Oszillators schreiben wir wie folgt um:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{q}^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{\hbar}\hat{q}^2 \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{i\ell}{\hbar}\hat{p} + \ell^{-1}\hat{q} \right) \left(\frac{i\ell}{\hbar}\hat{p} + \ell^{-1}\hat{q} \right) + \frac{i\omega}{2}[\hat{p}, \hat{q}], \end{aligned}$$

wobei $\ell := \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ die Oszillatorlänge bezeichnet. Der letzte Summand ist wegen $[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar\mathbf{1}$ einfach $\hbar\omega/2$ mal dem Einsoperator $\mathbf{1}$. Nun empfiehlt es sich, die folgenden Operatoren einzuführen:

$$\sqrt{2}b := \frac{i\ell}{\hbar}\hat{p} + \ell^{-1}\hat{q}, \quad \sqrt{2}b^\dagger := -\frac{i\ell}{\hbar}\hat{p} + \ell^{-1}\hat{q}.$$

Die Operatoren b und b^\dagger sind offenbar dimensionslos, zueinander adjungiert und erfüllen die Vertauschungsrelation

$$[b, b^\dagger] = \mathbf{1}. \quad (4.6)$$

Mit ihrer Hilfe lässt sich der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators wie folgt ausdrücken:

$$H = \hbar\omega (b^\dagger b + \mathbf{1}/2).$$

Dieser Ausdruck ist die Grundlage für die sog. **“algebraische” Lösung** des harmonischen Oszillators, die wir jetzt vorführen werden.

Wir gehen aus von der Relation

$$\left(\ell \frac{d}{dq} + \ell^{-1}q \right) \varphi_0(q) = 0, \quad \varphi_0(q) = (\pi\ell^2)^{-1/4} e^{-q^2/(2\ell^2)}.$$

(Durch den Normierungsfaktor $(\pi\ell^2)^{-1/4}$ wird erreicht, dass $\int_{\mathbb{R}} |\varphi_0(q)|^2 dq = 1$ gilt.) Aus Abschnitt 2.2 kennen wir $\varphi_0(q)$ als die Wellenfunktion des stationären Zustands zur kleinstmöglichen Energie. φ_0 ist also die **Grundzustands-Wellenfunktion**. Sie entspricht einem abstrakten Hilbertvektor, den man in der Dirac-Notation mit $|\varphi_0\rangle \equiv |0\rangle$ bezeichnet. Nun schreibt sich die obige Gleichung für φ_0 mit Hilfe von (4.4) wie

$$0 = \left(\ell \frac{d}{dq} + \ell^{-1}q \right) \varphi_0(q) = \langle q|b|\varphi_0\rangle = \langle q|b|0\rangle \quad \text{oder} \quad b|0\rangle = \mathbf{0}.$$

Der Grundzustand $|0\rangle$ wird also bei Anwendung von b in den Nullvektor abgebildet.

Behauptung. Der Hilbertvektor $(b^\dagger)^n|0\rangle$ ist Eigenvektor von $H = \hbar\omega(b^\dagger b + \mathbf{1}/2)$ zum Eigenwert $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Beweis. Wir führen den Nachweis durch explizite Überprüfung, die folgendermaßen beginnt:

$$\begin{aligned} b^\dagger b \cdot (b^\dagger)^n &= b^\dagger (bb^\dagger - b^\dagger b + b^\dagger b) (b^\dagger)^{n-1} \\ &= b^\dagger [b, b^\dagger] (b^\dagger)^{n-1} + (b^\dagger)^2 b (b^\dagger)^{n-1}. \end{aligned}$$

Wegen $[b, b^\dagger] = \mathbf{1}$ ist der erste Summand gleich dem Ausgangsobjekt $(b^\dagger)^n$. Mit dem zweiten Summanden, $(b^\dagger)^2 b (b^\dagger)^{n-1}$, verfahren wir wie vormals mit $b^\dagger b (b^\dagger)^n$ und erhalten im nächsten Schritt:

$$(b^\dagger)^2 b (b^\dagger)^{n-1} = (b^\dagger)^2 (b b^\dagger - b^\dagger b + b^\dagger b) (b^\dagger)^{n-2} = (b^\dagger)^n + (b^\dagger)^3 b (b^\dagger)^{n-2}.$$

Durch mehrfache Iteration entsteht

$$b^\dagger b (b^\dagger)^n = \dots = k (b^\dagger)^n + (b^\dagger)^{k+1} b (b^\dagger)^{n-k} = \dots = n (b^\dagger)^n + (b^\dagger)^{n+1} b,$$

oder, anders aufgeschrieben,

$$[b^\dagger b, (b^\dagger)^n] = n (b^\dagger)^n.$$

Diese Relation wenden wir nun auf den Grundzustand $|0\rangle$ an. Mit der Vernichtungseigenschaft $b|0\rangle = \mathbf{0}$ erhalten wir dann

$$b^\dagger b \cdot (b^\dagger)^n |0\rangle = n (b^\dagger)^n |0\rangle.$$

Der Vektor $(b^\dagger)^n |0\rangle$ ist also Eigenvektor von $b^\dagger b$ zum Eigenwert n . Folglich ist der gleiche Vektor Eigenvektor von $H = \hbar\omega(b^\dagger b + 1/2)$ zum Eigenwert $\hbar\omega(n + 1/2)$.

Aufgabe. Zeige mit der gleichen Strategie wie oben $[b, (b^\dagger)^n] = n(b^\dagger)^{n-1}$. Folgere hieraus

$$\langle 0|b^m (b^\dagger)^n |0\rangle = n! \delta_{m,n}.$$

Resümee. Für den harmonischen Oszillator haben wir also das folgende Orthonormalsystem von Eigenvektoren (oder stationären Zuständen):

$$|n\rangle := (n!)^{-1/2} (b^\dagger)^n |0\rangle.$$

Es ist nicht schwer zu zeigen, dass dieses System vollständig ist:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}.$$

Wie sehen nun die Wellenfunktionen $\varphi_n(q) = \langle q|n\rangle$ dieser Vektoren in der Ortsdarstellung aus? Dazu berechnen wir

$$\varphi_n(q) := \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle q|(b^\dagger)^n |0\rangle = (2^n n!)^{-1/2} \left(-\ell \frac{d}{dq} + \ell^{-1} q \right)^n \varphi_0(q).$$

Definition. Das **Hermite-Polynom** n -ter Ordnung, $H_n(x)$, ist erklärt durch

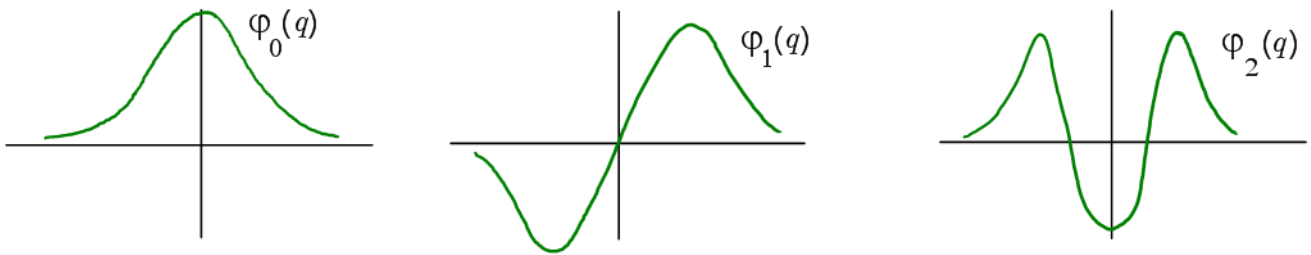
$$H_n(x) := e^{x^2/2} \left(-\frac{d}{dx} + x \right)^n e^{-x^2/2}.$$

Die Hermite-Polynome niedrigster Ordnung sind

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad \text{usw.}$$

Unter Verwendung der Hermite-Polynome lassen sich die normierten Oszillator-Eigenzustände wie folgt ausdrücken:

$$\varphi_n(q) = (2^n n! \sqrt{\pi} \ell)^{-1/2} H_n(q/\ell) e^{-q^2/2\ell^2}.$$



Zur Sprechweise. Man nennt $|n\rangle$ den Zustandsvektor mit n Oszillatorquanten (oder den n -ten angeregten Zustand). Der Operator b^\dagger heißt der **Erzeugungsoperator** für Oszillatorquanten, b der **Vernichtungsoperator**. Es gelten die Relationen

$$b|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad b^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle.$$

Der **Besetzungszahloperator** $\hat{n} \equiv b^\dagger b$ zählt die Zahl der Oszillatorquanten:

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Ausblick. Quantisierung des elektromagnetischen Feldes.

4.6 Kohärente Zustände

Als Motivation und Ausgangspunkt für diesen Abschnitt dient die folgende Tatsache.

Fakt. Im Grundzustand des harmonischen Oszillators ist das Produkt der quantenmechanischen Unschärfen von Ort und Impuls minimal.

Beweis. Man sieht leicht, dass im Oszillator-Grundzustand die Erwartungswerte für Ort und Impuls verschwinden:

$$\langle 0|\hat{q}|0\rangle = 0 = \langle 0|\hat{p}|0\rangle.$$

Die Varianzen von Ort und Impuls berechnen sich somit zu

$$\begin{aligned} \text{var}(q) &= \langle 0|\hat{q}^2|0\rangle = \frac{\ell^2}{2} \langle 0|(b+b^\dagger)^2|0\rangle = \ell^2/2, \\ \text{var}(p) &= \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} \langle 0|(b-b^\dagger)^2|0\rangle = \hbar^2/2\ell^2. \end{aligned}$$

Das Produkt der Unschärfen ist folglich

$$\Delta q \cdot \Delta p = \sqrt{\text{var}(q)} \sqrt{\text{var}(p)} = \hbar/2.$$

Dies ist der kleinste Wert, der nach der Heisenbergschen Unschärferelation vorliegen kann. \square

Die sog. **kohärenten Zustände**, die wir nun einführen werden, haben mit dem Oszillator-Grundzustand die Eigenschaft minimaler Unschärfe gemeinsam. Sie spielen eine wichtige Rolle in

der Quantenoptik und allgemein gesprochen für Systeme im semiklassischen Limes. Man gewinnt sie, indem man den Oszillator-Grundzustand einer Galilei-Transformation unterzieht, also in ein Inertialsystem wechselt, in dem der Oszillator nicht in Ruhe ist.

Definition. Unter dem **kohärenten Zustand** (in $d = 1$) mit Ortserwartungswert q_0 und Impulserwartungswert p_0 verstehen wir den Zustand mit der Schrödinger-Wellenfunktion

$$F_{q_0, p_0}(q) = e^{ip_0 q/\hbar} \varphi_0(q - q_0) e^{-ip_0 q_0/2\hbar}.$$

Hierbei ist $\varphi_0(q) = (\pi\ell^2)^{-1/4} e^{-q^2/2\ell^2}$ wie zuvor die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators mit Oszillatorlänge ℓ . (Die Anwesenheit des rechts stehenden konstanten Phasenfaktors wird durch das folgende Lemma motiviert.)

Die Überprüfung der Erwartungswerte für Ort und Impuls ergibt tatsächlich

$$\langle \hat{q} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{F_{q_0, p_0}(q)} q F_{q_0, p_0}(q) dq = q_0, \quad \langle \hat{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{F_{q_0, p_0}(q)} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} F_{q_0, p_0}(q) dq = p_0.$$

Lemma. Die durch

$$F_{q_0, p_0}(q) \equiv e^{-(q_0/2\ell)^2 - (\ell p_0/2\hbar)^2} S_{q_0, p_0}(q)$$

erklärte Funktion $S_{q_0, p_0}(q)$ ist **holomorph** im komplexen Parameter

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_0}{\ell} + i \frac{\ell p_0}{\hbar} \right).$$

Beweis. Wir zeigen, dass $S_{q_0, p_0}(q)$ der **Cauchy-Riemannschen** Differentialgleichung für z genügt.

Wir haben

$$\begin{aligned} S_{q_0, p_0}(q) &= e^{(q_0/2\ell)^2 + (\ell p_0/2\hbar)^2} \psi_{q_0, p_0}(q) \\ &= (\sqrt{\pi}\ell)^{-1/2} e^{(q_0/2\ell)^2 + (\ell p_0/2\hbar)^2 + ip_0 q/\hbar - ip_0 q_0/2\hbar - (q - q_0)^2/2\ell^2} \end{aligned} \quad (4.7)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\ell \frac{\partial}{\partial q_0} + i \frac{\hbar}{\ell} \frac{\partial}{\partial p_0} \right).$$

Nun gilt

$$\ell \frac{\partial}{\partial q_0} \ln S_{q_0, p_0}(q) = \frac{q_0}{2\ell} - i \frac{\ell p_0}{2\hbar} + \frac{q - q_0}{\ell}$$

und

$$i \frac{\hbar}{\ell} \frac{\partial}{\partial p_0} \ln S_{q_0, p_0}(q) = i \frac{\ell p_0}{2\hbar} - \frac{q}{\ell} + \frac{q_0}{2\ell}.$$

Wie man sieht, addieren sich die beiden Beiträge zur anti-holomorphen Ableitung zu Null:

$$S_{q_0, p_0}(q)^{-1} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} S_{q_0, p_0}(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\ell \frac{\partial}{\partial q_0} + i \frac{\hbar}{\ell} \frac{\partial}{\partial p_0} \right) \ln S_{q_0, p_0}(q) = 0.$$

Folglich ist $S_{q_0, p_0}(q)$ (für jeden Wert von q) eine holomorphe Funktion des Parameters $z \in \mathbb{C}$. \square

Der Vergleich mit der wellenmechanischen Darstellung der Heisenberg-Gruppe (siehe Abschnitt 4.2) ergibt

$$F_{q_0, p_0}(q) = (\mathcal{D}(g_{q_0, p_0, q_0 p_0/2})\varphi_0)(q),$$

was uns zur abstrakten (also darstellungsunabhängigen) Definition kohärenter Zustände führt.

Definition. Der abstrakte unitäre Operator, dessen Darstellung in der Schrödinger-Wellenmechanik durch $\mathcal{D}(g_{q_0, p_0, q_0 p_0/2})$ gegeben ist, sei mit den Konventionen

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_0}{\ell} + i \frac{\ell p_0}{\hbar} \right) \quad \text{und} \quad \hat{g}_{0,0,c} = e^{-ic/\hbar} \mathbf{1}$$

durch

$$T_z \equiv T_{(q_0, p_0)} \equiv \hat{g}_{q_0, p_0, q_0 p_0/2}$$

bezeichnet. Unter dem (abstrakten) **kohärenten Zustand** zum Parameter z verstehen wir dann das Resultat der Anwendung von T_z auf den Oszillator-Grundzustand $|0\rangle$:

$$|z\rangle = T_z |0\rangle. \quad \square$$

Bemerkung. Per Definition translatiert der unitäre Operator T_z den Ort um $q_0 = \sqrt{2}\ell \operatorname{Re}(z)$ und den Impuls um $p_0 = \sqrt{2}\hbar \operatorname{Im}(z)/\ell$.

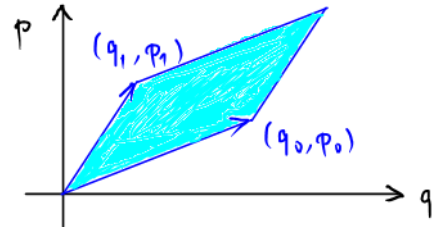
Für die Operatoren T_z gilt eine **Multiplikationsregel**, die direkt aus dem Verknüpfungsgesetz der Heisenberg-Gruppe folgt:

$$\begin{aligned} T_{(q_0, p_0)} T_{(q_1, p_1)} &= \hat{g}_{q_0, p_0, \frac{1}{2} q_0 p_0} \hat{g}_{q_1, p_1, \frac{1}{2} q_1 p_1} = \hat{g}_{q_0+q_1, p_0+p_1, \frac{1}{2} q_0 p_0 + \frac{1}{2} q_1 p_1 + q_0 p_1} \\ &= \hat{g}_{q_0+q_1, p_0+p_1, \frac{1}{2} (q_0+q_1)(p_0+p_1) + \frac{1}{2} (q_0 p_1 - p_0 q_1)} = T_{(q_0+q_1, p_0+p_1)} \hat{g}_{0,0, \frac{1}{2} (q_0 p_1 - p_0 q_1)}, \end{aligned}$$

also

$$T_{(q_0, p_0)} T_{(q_1, p_1)} = T_{(q_0+q_1, p_0+p_1)} e^{-i(q_0 p_1 - p_0 q_1)/2\hbar} \quad \text{oder} \quad T_z T_w = T_{w+z} e^{(z\bar{w} - w\bar{z})/2}.$$

Deutung. Der den Phasenfaktor bestimmende Ausdruck $q_0 p_1 - p_0 q_1$ ist die **(symplektische) Fläche** des Parallelogramms mit den Kantenvektoren (q_0, p_0) und (q_1, p_1) in der Phasenebene \mathbb{R}^2 . \square



Aus der wellenmechanischen Darstellung der Heisenberg-Gruppe lesen wir ab:

$$T_{(0, p_0)} = \hat{g}_{0, p_0, 0} = e^{ip_0 \hat{q}/\hbar}, \quad T_{(q_0, 0)} = \hat{g}_{q_0, 0, 0} = e^{-iq_0 \hat{p}/\hbar}.$$

Hiermit und mittels der obigen Multiplikationsregel erhalten wir für den unitären Operator $T_{(q_0, p_0)}$ die expliziten Ausdrücke

$$\begin{aligned} T_{(q_0, p_0)} &= T_{(q_0, 0)} T_{(0, p_0)} e^{iq_0 p_0/2\hbar} = e^{iq_0 p_0/2\hbar} e^{-iq_0 \hat{p}/\hbar} e^{ip_0 \hat{q}/\hbar} \\ &= T_{(0, p_0)} T_{(q_0, 0)} e^{-iq_0 p_0/2\hbar} = e^{-iq_0 p_0/2\hbar} e^{ip_0 \hat{q}/\hbar} e^{-iq_0 \hat{p}/\hbar}. \end{aligned}$$

Aufgabe. Etabliere für zwei Matrizen A und B mit Kommutator $[A, B] \propto \mathbf{1}$ (Einheitsmatrix) die Identitäten

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] \quad \text{und} \quad e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A, B]}.$$

Folgere hiermit (heuristisch) die folgenden **Relationen:**

1. $T_{(q_0, p_0)}^{-1} \hat{q} T_{(q_0, p_0)} = \hat{q} + q_0, \quad T_{(q_0, p_0)}^{-1} \hat{p} T_{(q_0, p_0)} = \hat{p} + p_0,$
2. $T_{(q_0, p_0)} = e^{i(p_0 \hat{q} - q_0 \hat{p})/\hbar} = e^{z b^\dagger - \bar{z} b} = T_z,$
3. $\langle 0 | T_z | 0 \rangle = e^{-|z|^2/2}. \quad \square$

Die kohärenten Zustände $|z\rangle$ haben die folgenden wichtigen **Eigenschaften:**

1. Das Produkt der Orts- und Impulsunschärfen in einem kohärenten Zustand $|z\rangle$ ist gleich dem Minimalwert $\hbar/2$ (unabhängig von z).
2. Das Hermitesche Skalarprodukt (**“Überlapp”**) zweier kohärenter Zustände ist

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

3. Es gilt die Vollständigkeitsrelation (**“Zerlegung der Eins”**):

$$\int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z}{2\pi} |z\rangle \langle z| = \mathbf{1}, \quad d^2 z := 2 d\text{Re}(z) d\text{Im}(z).$$

Beweis von 3. Sei $\Pi := \int_{\mathbb{C}} d^2 z |z\rangle \langle z|$. Dann haben wir

$$T_w \Pi T_w^{-1} = \int_{\mathbb{C}} d^2 z T_w T_z |0\rangle \langle 0| T_z^{-1} T_w^{-1} = \int_{\mathbb{C}} d^2 z T_{w+z} |0\rangle \langle 0| T_{w+z}^{-1} = \Pi.$$

Der Operator Π vertauscht also mit T_w für jedes $w \in \mathbb{C}$. Da die Operatoren T_w die Heisenberg-Gruppe irreduzibel darstellen, folgt nach einem fundamentalen Prinzip der Darstellungstheorie (dem sogenannten **Schur’schen Lemma**), dass Π ein Vielfaches des Einsoperators sein muss. Die Proportionalitätskonstante berechnet man aus

$$\langle 0 | \Pi | 0 \rangle = \int_{\mathbb{C}} d^2 z \langle 0 | z \rangle \langle z | 0 \rangle = \int_{\mathbb{C}} d^2 z |\langle 0 | T_z | 0 \rangle|^2 = \int_{\mathbb{C}} d^2 z e^{-|z|^2} = 2\pi.$$

4.6.1 Bargmann-Darstellung der Quantenmechanik

Die Zerlegung der Eins mittels kohärenter Zustände kann benutzt werden, um die Bargmann-Darstellung, eine dritte, von der Heisenberg’schen Matrizenmechanik und Schrödingers Wellenmechanik “qualitativ” verschiedene Realisierung des quantenmechanischen Hilbertraums zu konstruieren. Die Bargmann-Darstellung ist insbesondere für die Zwecke der semiklassischen Physik (**“mikrolokale Analysis”**) nützlich.

Zur Herleitung der Bargmann-Darstellung beginnen wir mit

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{1} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z}{2\pi} \langle \phi | \bar{z} \rangle \langle z | \psi \rangle$$

(wobei z zwecks späterer Einfachheit durch \bar{z} ersetzt wurde) und interpretieren $\langle \bar{z} | \psi \rangle$ wie folgt als “Wellenfunktion”. Wir formen das Hermitesche Skalarprodukt um:

$$\langle \bar{z} | \psi \rangle = \langle 0 | T_{\bar{z}}^\dagger | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | T_{\bar{z}} | 0 \rangle}.$$

Drücken wir dann $\langle \psi | T_{\bar{z}} | 0 \rangle$ in der Ortsdarstellung aus, so erhalten wir

$$\overline{\langle \psi | T_{\bar{z}} | 0 \rangle} = \int_{\mathbb{R}} dq \overline{\langle \psi | q \rangle \langle q | T_{\bar{z}} | 0 \rangle} = \int_{\mathbb{R}} dq \overline{\langle q | T_{\bar{z}} | 0 \rangle} \psi(q).$$

Nun kennen wir vom Anfang dieses Abschnitts den Ausdruck

$$\overline{\langle q | T_{\bar{z}} | 0 \rangle} = \overline{F_{(q_0, -p_0)}(q)} = e^{-|z|^2/2} \overline{S_{\bar{z}}(q)} = e^{-|z|^2/2} S_z(q),$$

wobei $S_z(q)$ holomorph von z abhängt. Dies führt zur folgenden Definition und Aussage.

Definition. Der Hilbertraum $B_{\mathbb{C}}$ aller holomorphen Funktionen $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit der Eigenschaft

$$\int_{\mathbb{C}} |f(z)|^2 e^{-|z|^2} d^2z < \infty$$

wird **Bargmann-Raum** genannt. Unter der **Segal-Bargmann-Transformation** versteht man die komplex lineare Abbildung

$$\mathcal{B} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow B_{\mathbb{C}}, \quad (\mathcal{B}\psi)(z) = \int_{\mathbb{R}} S_z(q) \psi(q) dq,$$

die jede quadrat-integrable Funktion $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ in eine holomorphe Funktion $\mathcal{B}\psi \in B_{\mathbb{C}}$ überführt.

Bemerkungen. (i) Die obige Rechnung zeigt, dass die Segal-Bargmann-Transformation eine unitäre Abbildung ist:

$$\int_{\mathbb{R}} \overline{\phi(q)} \psi(q) dq = \langle \phi | \psi \rangle = (2\pi)^{-1} \int_{\mathbb{C}} \overline{(\mathcal{B}\phi)(z)} (\mathcal{B}\psi)(z) e^{-|z|^2} d^2z.$$

(ii) Der explizite Ausdruck für $S_z(q)$ von Eq. (4.7) lässt sich auch kürzer schreiben:

$$S_z(q) = (\sqrt{\pi}\ell)^{-1/2} e^{-z^2/2} e^{\sqrt{2}zq/\ell} e^{-q^2/2\ell^2}.$$

(iii) Im Vergleich zum Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ der Wellenmechanik ist der Hilbertraum $B_{\mathbb{C}}$ insofern dem Studenten schneller zugänglich, als sein Hermitesches Skalarprodukt mit Hilfe des Riemann-Integrals definiert werden kann, also ohne das Lebesgue-Integral auskommt.

Wie sieht nun die Darstellung der Heisenberg-Gruppe auf dem Bargmann-Raum $B_{\mathbb{C}}$ aus?

Antwort. Die Translationsoperatoren T_w der Heisenberg-Gruppe wirken auf die holomorphen Funktionen $f \in B_{\mathbb{C}}$ der Bargmann-Darstellung durch

$$(T_w f)(z) = e^{-|w|^2/2 + wz} f(z - \bar{w}).$$

Insbesondere werden die selbst-adjungierten Operatoren für den Ort \hat{q} und den Impuls \hat{p} folgendermaßen dargestellt:

$$(\hat{q}f)(z) = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(z + \frac{\partial}{\partial z} \right) f(z), \quad (\hat{p}f)(z) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i\ell} \left(\frac{\partial}{\partial z} - z \right) f(z).$$

Beweis als Übungsaufgabe.

5 Pfadintegral und klassischer Limes

5.1 Propagator

Falls ein "autonomes System" vorliegt, also der Hamiltonoperator \hat{H} nicht explizit von der Zeit abhängt, hat die Schrödinger-Gleichung (abstrakte Version)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle$$

die formale Lösung

$$|\psi_t\rangle = e^{-it\hat{H}/\hbar} |\psi_{t=0}\rangle.$$

Ist $|\psi_0\rangle$ ein Eigenvektor von \hat{H} mit Eigenwert $E = \hbar\omega$, so ist $|\psi_t\rangle = |\psi_0\rangle e^{-i\omega t}$. Ein solcher Zustand heißt stationär, denn in ihm sind die Erwartungswerte aller Operatoren zeitunabhängig:

$$\langle \psi_t | \hat{A} | \psi_t \rangle = e^{i\omega t} \langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle e^{-i\omega t} = \langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle.$$

Sei nun $|\psi_0\rangle$ irgendein abstrakter Hilbertvektor. Dann haben wir in der Ortsdarstellung

$$\langle q | \psi_t \rangle = \langle q | e^{-it\hat{H}/\hbar} | \psi_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dq' \langle q | e^{-it\hat{H}/\hbar} | q' \rangle \langle q' | \psi_0 \rangle$$

oder

$$\psi(q; t) = \int_{\mathbb{R}} K(q, q'; t) \psi(q'; t) dq'$$

mit

$$K(q, q'; t) = \langle q | e^{-it\hat{H}/\hbar} | q' \rangle.$$

Der zeitabhängige Integralkern $K(q, q'; t)$ heißt der Propagator des quantenmechanischen Systems. Wir erinnern daran, dass für freie Teilchen ($\hat{H} = \hat{p}^2/2m$) gilt

$$K(q, q'; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(q - q')^2}{t}\right).$$

Ganz allgemein hat der Propagator eines autonomen quantenmechanischen Systems die Eigenschaften ($d = 1$)

$$K(q, q'; t_2 + t_1) = \int_{\mathbb{R}} K(q, q''; t_2) K(q'', q'; t_1) dq''$$

und $\lim_{t \rightarrow 0^+} K(q, q'; t) = \delta(q - q')$.

Beispiel. Der Propagator des harmonischen Oszillators ist

$$K(q, q'; t) = \frac{\ell^{-1}}{\sqrt{2\pi i \sin \omega t}} \exp\left(\frac{i(q^2 + q'^2)}{2\ell^2} \frac{\cos \omega t}{\sin \omega t} - \frac{iqq'}{\ell^2} \frac{1}{\sin \omega t}\right).$$

(Die Berechnung mittels kohärenter Zustände wird nachgeliefert.)

5.2 Hamiltonsches Prinzip

Wir erinnern an einen aus der Hamiltonschen Mechanik bekannten Sachverhalt. Für ein Hamiltonsches System (der klassischen Mechanik) mit Phasenraum $M = \mathbb{R}^2$, Hamiltonfunktion H und kanonischen Koordinaten q, p hat man die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}.$$

Sie folgen aus dem **Hamiltonschen Prinzip** (auch bekannt als Prinzip der kleinsten Wirkung; besser: Prinzip der stationären Wirkung). Dazu betrachtet man das Wirkungsfunktional

$$S = \int_0^T (p \dot{q} - H) dt,$$

wobei längs Kurven im Phasenraum integriert wird. Durch Variation von S erhält man

$$\delta S = \int_0^T \left(\dot{q} \delta p + p \delta \dot{q} - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p \right) dt.$$

Integriert man nun den zweiten Summanden partiell und fordert $\delta q(0) = 0$ und $\delta q(T) = 0$ (der Ort wird also zur Anfangs- und Endzeit nicht variiert, sondern festgehalten), so entsteht

$$\delta S = \int_0^T \left(\dot{q} \delta p - \dot{p} \delta q - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p \right) dt.$$

Die Forderung der Extremalität des Wirkungsfunktionals (**$\delta S = 0$**) für Phasenbahnen der klassischen Bewegung liefert dann sofort die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen.

Was ist aber der tiefere Grund für dieses Variationsprinzip (außer, dass es das gewünschte Ergebnis liefert)? Und wie kann man die aus der Sicht der klassischen Mechanik sonderbare Randbedingung

$$\delta q(0) = \delta q(T) = 0$$

verstehen? Die Quantenmechanik bietet hierauf eine Antwort.

5.3 Pfadintegral

Wir leiten jetzt eine sog. **Pfadintegraldarstellung** für den Propagator $K(q, q'; T)$ her. (Wir bleiben der Einfachheit halber beim Fall eines Systems mit einem Ortsfreiheitsgrad.) Dazu verwenden wir die Zerlegung der Eins mittels kohärenter Zustände, was auf Pfade im Phasenraum führt. Unterwegs werden wir auch das Feynmansche Pfadintegral über Pfade im Ortsraum kennenlernen.

Unser Ausgangspunkt ist die unitäre **Einparametergruppe** $\mathbb{R} \ni t \mapsto U_t = \exp(-itH/\hbar)$ der Zeitentwicklung eines autonomen quantenmechanischen Systems mit Hamiltonoperator H . Per Definition von U_t haben wir die Identität

$$U_T = U_{T/2} U_{T/2} = U_{T/3} U_{T/3} U_{T/3} = (U_{T/N})^N.$$

Diese werden wir letztendlich im Limes $N \rightarrow \infty$ verwenden. Für den Propagator $K(q, q'; T) = \langle q|U_T|q' \rangle$ erhalten wir durch wiederholtes Einschleiben von $\mathbf{1} = \int_{\mathbb{C}} (d^2 z / 2\pi) |z\rangle\langle z|$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle q|U_T|q' \rangle &= \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z}{2\pi} \langle q|U_{T/2}|z\rangle \langle z|U_{T/2}|q' \rangle \\ &= \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z_1}{2\pi} \cdots \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z_{N-1}}{2\pi} \langle q|U_{T/N}|z_{N-1}\rangle \langle z_{N-1}|U_{T/N}|z_{N-2}\rangle \cdots \langle z_2|U_{T/N}|z_1\rangle \langle z_1|U_{T/N}|q' \rangle. \end{aligned}$$

In diesen Schritt geht durch die Definition der kohärenten Zustände $|z\rangle = T_z|0\rangle$ die willkürliche Wahl einer charakteristischen **Länge ℓ** ein. (Im vorigen Abschnitt war ℓ die Oszillatorlänge. Hier behandeln wir aber nicht den harmonischen Oszillator sondern ein allgemeines System.)

Die Umformung zum obigen Ausdruck wird durch die **Erwartung** motiviert, dass die Kurzzeit-Propagatoren $\langle z_{k+1}|U_t|z_k\rangle$ für $t = T/N \rightarrow 0$ berechenbar sind (und auch durch die Hoffnung, dass der Limes $N \rightarrow \infty$ beherrscht werden kann). Wenn man die Fehler der Kurzzeit-Näherung unter mathematischer Kontrolle behalten will, lässt sich diese Berechnung im allgemeinen nur systembezogen durchführen. Ist der Phasenraum M jedoch kompakt (und somit die Energie beschränkt), so können wir problemlos wie folgt verfahren ($t \equiv T/N$):

$$\begin{aligned} \langle z_{k+1}|U_t|z_k\rangle &= \langle z_{k+1}|e^{-itH/\hbar}|z_k\rangle = \langle z_{k+1}|\mathbf{1} - itH/\hbar + \mathcal{O}(t^2)|z_k\rangle \\ &= \langle z_{k+1}|z_k\rangle - (it/\hbar)\langle z_{k+1}|H|z_k\rangle + \mathcal{O}(t^2) = \langle z_{k+1}|z_k\rangle \left(1 - \frac{it}{\hbar} \frac{\langle z_{k+1}|H|z_k\rangle}{\langle z_{k+1}|z_k\rangle} + \mathcal{O}(t^2)\right). \end{aligned}$$

Offenbar ist es zweckmäßig, die folgende Abkürzung einzuführen:

$$\frac{\langle z_{k+1}|H|z_k\rangle}{\langle z_{k+1}|z_k\rangle} =: \mathcal{H}(\bar{z}_{k+1}, z_k).$$

Hiermit haben wir dann

$$\langle z_{k+1}|U_t|z_k\rangle = \langle z_{k+1}|z_k\rangle e^{-it\mathcal{H}(\bar{z}_{k+1}, z_k)/\hbar + \mathcal{O}(t^2)}.$$

Im günstigen Fall, dass der Hamiltonoperator beschränkt ist (sagen wir durch E_{\max}), hat die Summe ($k = 1, \dots, N-1$) aller Fehlerterme $\mathcal{O}(t^2)$ die Größenordnung $N \cdot (TE_{\max}/N\hbar)^2 \sim N^{-1}$ und wird durch den Limes $N \rightarrow \infty$ beseitigt. Im allgemeinen Fall (so auch hier für un spezifizierten Hamiltonoperator und $M = \mathbb{C} = \mathbb{R}^2$) ist die **Fehlergröße nicht a priori klar** und die obige Rechnung und folgende Argumentation bedarf einer weitergehenden mathematischen Rechtfertigung. Wir gehen hierauf nicht näher ein und verweisen neugierige Studierende auf die Andrejewski-Vorlesungen von J. Feldman, <http://www.math.ubc.ca/~feldman/andrejewski.html>

Insgesamt erhalten wir jetzt

$$\langle q|U_T|q' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z_1}{2\pi} \cdots \int_{\mathbb{C}} \frac{d^2 z_{N-1}}{2\pi} \langle q|U_{T/N}|z_{N-1}\rangle \prod_{k=1}^{N-2} \langle z_{k+1}|z_k\rangle e^{-iT\mathcal{H}(\bar{z}_{k+1}, z_k)/N\hbar} \langle z_1|U_{T/N}|q' \rangle.$$

Für den ersten und letzten Zeitschritt dürfen wir $U_{T/N}$ im Limes $N \rightarrow \infty$ durch den Einsoperator ersetzen:

$$\begin{aligned} \langle z_1|U_{T/N}|q' \rangle &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \overline{\langle q'|z_1\rangle} = e^{-|z_1|^2/2} S_{\bar{z}_1}(q') \\ &= (\sqrt{\pi}\ell)^{-1/2} e^{-|z_1|^2/2 - z_1^2/2 + \sqrt{2}\bar{z}_1 q'/\ell - q'^2/2\ell^2} \\ &= (\sqrt{\pi}\ell)^{-1/2} e^{-(q_1 - q')^2/2\ell^2 + ip_1(q_1 - q')/2\hbar - ip_1 q'/2\hbar}, \end{aligned}$$

wobei $S_z(q)$ die in Gleichung (4.7) eingeführte Funktion ist. Im letzten Schritt haben wir z_1 durch seinen Realteil ($q_1/\sqrt{2\ell}$) und Imaginärteil ($\ell p_1/\sqrt{2\hbar}$) ausgedrückt. Ähnlich haben wir

$$\begin{aligned}\langle q|U_{T/N}|z_{N-1}\rangle &\xrightarrow{N\rightarrow\infty} \langle q|z_{N-1}\rangle = e^{-|z_{N-1}|^2/2} S_{z_{N-1}}(q) \\ &= (\sqrt{\pi\ell})^{-1/2} e^{-|z_{N-1}|^2/2 - z_{N-1}^2/2 + \sqrt{2}z_{N-1}q/\ell - q^2/2\ell^2} \\ &= (\sqrt{\pi\ell})^{-1/2} e^{-(q-q_{N-1})^2/2\ell^2 + ip_{N-1}(q-q_{N-1})/2\hbar + ip_{N-1}q/2\hbar}.\end{aligned}$$

Das Produkt aller Skalarprodukte $\langle z_{k+1}|z_k\rangle$ lässt sich wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned}\prod_{k=1}^{N-2} \langle z_{k+1}|z_k\rangle &= \prod_{k=1}^{N-2} \exp\left(-\frac{1}{2}|z_{k+1}|^2 - \frac{1}{2}|z_k|^2 + \bar{z}_{k+1}z_k\right) \\ &= e^{-(1/4)\sum_{k=1}^{N-2} \left((q_k - q_{k+1})^2/\ell^2 + \ell^2(p_k - p_{k+1})^2/\hbar^2\right)} \\ &\quad \times e^{-(i/4\hbar)\sum_{k=1}^{N-2} \left((p_k + p_{k+1})(q_k - q_{k+1}) - (q_k + q_{k+1})(p_k - p_{k+1})\right)}.\end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir dann das folgende **Ergebnis** für den Propagator:

$$\langle q|U_T|q'\rangle = (\sqrt{\pi\ell})^{-1} \lim_{N\rightarrow\infty} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{dp_1 dq_1}{2\pi\hbar} \dots \int_{\mathbb{R}^2} \frac{dp_{N-1} dq_{N-1}}{2\pi\hbar} \exp\left(-S_{\text{reg}} + \frac{i}{\hbar}S\right)$$

mit

$$\begin{aligned}S &= \sum_{k=1}^{N-2} \left(\frac{1}{4}(p_k + p_{k+1})(q_{k+1} - q_k) - \frac{1}{4}(q_k + q_{k+1})(p_{k+1} - p_k) - \frac{T}{N}\mathcal{H}(\bar{z}_{k+1}, z_k)\right) \\ &\quad + \frac{1}{2}\left(p_{N-1}(q - q_{N-1}) + p_{N-1}q + p_1(q_1 - q') - p_1q'\right)\end{aligned}$$

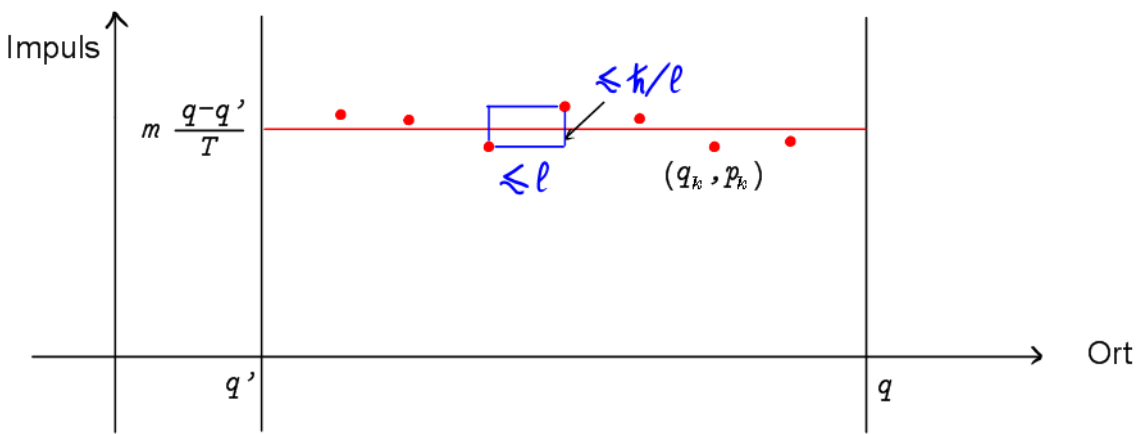
und

$$S_{\text{reg}} = \frac{(q - q_{N-1})^2}{2\ell^2} + \sum_{k=1}^{N-2} \left(\frac{(q_{k+1} - q_k)^2}{4\ell^2} + \frac{\ell^2(p_{k+1} - p_k)^2}{4\hbar^2}\right) + \frac{(q_1 - q')^2}{2\ell^2}.$$

Diskussion. Der zweite Term, S_{reg} , ist reell und positiv (falls $q \neq q'$). Er wird signifikant (von der Größenordnung Eins und größer) wenn die Differenzen zeitlich aufeinander folgender Orte und Impulse die jeweilige charakteristische Skala (ℓ bzw. \hbar/ℓ) übersteigen, also für

$$|q_{k+1} - q_k| \gtrsim \ell = \sqrt{\hbar/m\omega}, \quad |p_{k+1} - p_k| \gtrsim \hbar/\ell = \sqrt{\hbar m\omega}.$$

Der Beitrag zum Integral von Konfigurationen $(q_1, p_1; q_2, p_2; \dots; q_{N-1}, p_{N-1})$ mit großem S_{reg} wird durch den Faktor $e^{-S_{\text{reg}}}$ im Integranden unterdrückt. Auf diese Weise bewirkt S_{reg} eine Art von **“Regularisierung”** des Pfadintegrals. Beachte auch, dass die Anwesenheit des ersten und letzten Terms in S_{reg} dafür sorgt, dass reguläre Konfigurationen (also solche ohne exponentielle Unterdrückung durch $e^{-S_{\text{reg}}}$) in der Nähe von $q' \simeq q_1$ beginnen und in der Nähe von $q \simeq q_{N-1}$ enden. Dagegen variieren die Impulswerte p_1 und p_{N-1} frei, sofern sie sich nur hinreichend wenig von ihren Nachbarn in der durch $k = 1, \dots, N-1$ indizierten Sequenz unterscheiden. Eine typische **Konfiguration** (für den Fall **freier Bewegung**) könnte also wie folgt aussehen.



Symbolik (“Zeitkontinuumslices”). Zum Integral im Limes $N \rightarrow \infty$ tragen also nur solche Konfigurationen bei, für welche die Differenzen $|q_k - q_{k+1}|$ und $|p_k - p_{k+1}|$ sehr klein im Vergleich zu typischen Längen- und Impulsskalen der klassischen Dynamik sind. Es ist daher plausibel, dass die Summe ($\sum_{k=1}^{N-2}$) für den ersten Term, S , als **diskrete Approximation** zu einem Integral ($\int dt$) im Zeitkontinuum aufgefasst werden kann. Wir stellen uns also vor, (q_k, p_k) seien die Werte auf einer differenzierbaren Kurve $t \mapsto (q(t), p(t))$ mit $q_k = q(t_k)$, $p_k = p(t_k)$ und schreiben die Summe symbolisch als Integral:

$$\sum_{k=1}^{N-2} \frac{1}{4} (p_k + p_{k+1})(q_{k+1} - q_k) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-2} \frac{p(t_k) + p(t_{k+1})}{2} (q(t_{k+1}) - q(t_k)) \approx \frac{1}{2} \int_0^T p(t) \dot{q}(t) dt.$$

(“Symbolisch” will sagen, dass es sich beim “Integral” um einen in diesem Kontext eigentlich sinnlosen Ausdruck handelt. Die wirkliche Bedeutung des “Integrals” ist durch die Summe auf der linken Seite im Limes $N \rightarrow \infty$ gegeben.) Das gleiche Vorgehen für den Gesamtausdruck von S gibt das symbolische Ergebnis

$$S \approx \frac{1}{2} \int_0^T (p \dot{q} - q \dot{p}) dt - \int_0^T H dt + \frac{1}{2} (p(T) q(T) - p(0) q(0)).$$

Hierbei ist H die klassische Hamiltonfunktion, ausgewertet längs der gedachten Kurve $t \mapsto (q(t), p(t))$. Die Randterme $p(T) q(T)$ und $p(0) q(0)$ symbolisieren die Terme $p_{N-1} q$ bzw. $-p_1 q'$ im exakten Ausdruck für S .

Ein erster praktischer Nutzen der symbolischen Darstellung von S als Integral ist, dass wir die Randterme durch partielle Integration beseitigen und so einen besonders einfachen Endausdruck für S erhalten können:

$$S = \int_0^T (p \dot{q} - H) dt \equiv S[q(t), p(t)].$$

Die letzte Schreibweise betont, dass S als Funktional auf dem Raum von Kurven $t \mapsto (q(t), p(t))$ betrachtet wird. Die **symbolische Pfadintegraldarstellung** des Propagators sieht somit wie folgt aus:

$$\langle q | e^{-iTH/\hbar} | q' \rangle = \int_{q(0)=q'}^{q(T)=q} D[q(t), p(t)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[q(t), p(t)] \right).$$

Der Regulatorterm S_{reg} wurde hier weggelassen in der Annahme, dass seine Rolle lediglich darin besteht, irreguläre Pfade zu unterdrücken, und er auf den zum Pfadintegral beitragenden Konfigurationen so gut wie immer Null ist. Das Symbol $D[q(t), p(t)]$ steht für $(\sqrt{\pi\ell})^{-1} \prod_{k=1}^{N-1} dp_k dq_k / 2\pi\hbar$ im Limes $N \rightarrow \infty$.

Stationäre Phase. Wir sind jetzt in der Lage, die Verbindung zum Hamiltonschen Prinzip der klassischen Mechanik herzustellen. Dazu nehmen wir an, dass die Wirkung S von typischen, zum Pfadintegral beitragenden Konfigurationen $t \mapsto (q(t), p(t))$ viel größer als die Plancksche Konstante ist ($S/\hbar \gg 1$, semiklassischer Limes). In diesem Fall erwartet man, dass das Aufsummieren der unitären Werte $e^{iS/\hbar}$ des Integranden zu weitestgehender Auslöschung führt. Eine Ausnahme bilden Konfigurationen $\gamma : [0, T] \ni t \mapsto (q(t), p(t))$, die Extrema von S sind. Für solche γ führt eine kleine Änderung $\gamma \rightarrow \gamma + \delta\gamma$ in erster (Taylor-)Näherung zu keiner Änderung des Integranden, und die Werte $e^{iS/\hbar}$ addieren sich konstruktiv. Im semiklassischen Limes regiert also das Prinzip der **stationären Phase**: die wesentlichen Beiträge zum Pfadintegral kommen von Konfigurationen γ mit verschwindender erster Variation von S .

Genau gesagt sind Lösungen von $\delta \int_0^T (p \dot{q} - H) dt = 0$ gefordert, welche den Randbedingungen $q(0) = q'$ und $q(T) = q$ genügen; man variiert also mit $\delta q(0) = 0 = \delta q(T)$. Nach Abschnitt 5.2 ist dies genau das Hamiltonsche Prinzip der klassischen Mechanik! So führt die Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik zu einem tieferen Verständnis dieses Prinzips.

5.3.1 Feynmansches Pfadintegral

Die oben beschriebene Pfadintegraldarstellung mittels kohärenter Zustände stellt keine besonderen Forderungen an die Hamiltonfunktion H und steht daher in großer Allgemeinheit zur Verfügung. Für Hamiltonfunktionen der speziellen Form

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

existiert eine reduzierte Form von Pfadintegral. Sie entsteht aus der uns bekannten Pfadintegraldarstellung, indem man die Gaußsche Abhängigkeit von den Impulsvariablen ausintegriert. Es verbleibt dann das nach **Feynman** benannte Pfadintegral über Pfade im Ortsraum. Symbolisch schreibt man

$$\langle q | e^{-iTH/\hbar} | q' \rangle = \int_{q(0)=q'}^{q(T)=q} D[q(t)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T L(q(t), \dot{q}(t)) dt \right).$$

Hierbei ist

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q)$$

die **Lagrangefunktion** des Systems mit Hamiltonfunktion $H = p^2/2m + V(q)$.

5.4 Semiklassische Näherung

Eine wichtige Aufgabe physikalischer Theoriebildung ist es zu zeigen, dass und wie die Gesetze der klassischen Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik resultieren. Man erwartet die Anwendbarkeit der klassischen Mechanik im sogenannten “semiklassischen Limes” – grob gesprochen Situationen, wo das quantenmechanische Wirkungsquantum (die Plancksche Konstante \hbar) klein

ist im Vergleich zu den relevanten Wirkungen des quantenmechanischen Systems. Für die Herleitung von Näherungen im semiklassischen Limes ist die Pfadintegraldarstellung des Propagators als Ausgangspunkt bestens geeignet. Im Folgenden stellen wir eine nach van Vleck (1928) benannte Näherungsformel vor. Anschließend skizzieren wir die wesentlichen Ideen der Herleitung.

Van-Vleck-Propagator. Zur semiklassischen Berechnung des quantenmechanischen Propagators $K(q, q'; T)$ eines Hamiltonschen Systems mit Hamiltonfunktion H und kanonischen Phasenraumkoordinaten q, p gehen wir wie folgt vor. Für die vorgegebene Zeitdauer T lösen wir die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

zu den Randbedingungen

$$q(0) = q', \quad q(T) = q.$$

(Beachte, dass die Lösbarkeit dieser Randwertaufgabe offen ist: je nach Situation kann es eine, mehrere oder gar keine Lösung geben.) Ist $\gamma_{\text{cl}}(t) = (q_{\text{cl}}(t), p_{\text{cl}}(t))$ eine solche Lösung, so setzen wir

$$S_{\gamma_{\text{cl}}}(q, q'; T) := \int_0^T \left(p_{\text{cl}}(t) \dot{q}_{\text{cl}}(t) - H(q_{\text{cl}}(t), p_{\text{cl}}(t)) \right) dt.$$

Offensichtlich ist $S_{\gamma_{\text{cl}}}$ eine Funktion von T und den vorgegebenen Anfangs- und Endorten q' und q . Der semiklassische **Propagator nach van Vleck** ist eine Summe über alle Lösungen γ_{cl} :

$$K(q, q'; T) = \langle q | e^{-iTH/\hbar} | q' \rangle = \sum_{\gamma_{\text{cl}}} \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S_{\gamma_{\text{cl}}}}{\partial q \partial q'}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\gamma_{\text{cl}}}(q, q'; T)\right).$$

Existiert keine Lösung γ_{cl} , so gilt der Propagator als Null. (Tatsächlich ist er dann, den semiklassischen Limes vorausgesetzt, sehr klein.)

Aufgabe. Verifiziere, dass die bekannten Ergebnisse für den Propagator eines freien Teilchens und des (eindimensionalen) harmonischen Oszillators mit der van-Vleck-Formel exakt übereinstimmen. (Die semiklassische Näherung ist in diesen Fällen also exakt.)

Mitteilung. Es mag passieren, dass die klassische Phasenbahn γ_{cl} Punkte besucht, wo die Voraussetzungen für die Gültigkeit der semiklassischen Näherung verletzt sind (z.B. Umkehrpunkte der klassischen Bewegung). In solchen Fällen ist die Bewegung in der Nähe des singulären Punkts voll quantenmechanisch zu behandeln, was zu einer Korrektur $S_{\gamma_{\text{cl}}} \rightarrow S_{\gamma_{\text{cl}}} - \hbar\nu\pi/2$ durch eine zusätzliche, lokal konstante Phase (mit ν dem sogenannten **Maslov-Index**) führt. \square

Es geht weiter mit ein paar Erläuterungen zur **Begründung** der van-Vleck-Formel ausgehend von der Pfadintegraldarstellung des Propagators mittels kohärenter Zustände.

Aus der elementaren Analysis kennt man die Methode der **Sattelpunktnäherung**: Ist $x \mapsto e^{-f(x)}$ eine integrierbare C^∞ -Funktion mit einem globalen Maximum in $x = x_0$, so hat das Integral $\int_{\mathbb{R}} e^{-Nf(x)} dx$ für große Werte von N die asymptotische Entwicklung

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-Nf(x)} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)} \left(1 + \frac{5}{24N} \frac{(f'''(x_0))^2}{(f''(x_0))^3} - \frac{1}{8N} \frac{f''''(x_0)}{(f''(x_0))^2} + \mathcal{O}(1/N^2) \right).$$

Für komplexwertige Funktionen wird die Sattelpunktmethode zur Methode der **“stationären Phase”**, und für Linienintegrale holomorpher Funktionen zur Methode des **“steilsten Abstiegs”** (englisch: **steepest descent**). Ohne diesen als bekannt vorausgesetzten methodischen Hintergrund näher zu erläutern, übertragen wir ihn auf das Phasenraum-Pfadintegral mit der Identifikation $N \equiv (i\hbar)^{-1}$ und $f(x) \hat{=} S[(q(t), p(t))]$.

Sei nun $\gamma_{cl} = (q_{cl}, p_{cl})$ eine der Phasenbahnen, über die in der van-Vleck-Formel summiert wird. Analog zur Taylor-Entwicklung $f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$ entwickelt man das Wirkungsfunktional um eine solche Bahn:

$$S = \int_0^T dt ((p_{cl} + \delta p)(\dot{q}_{cl} + \delta \dot{q}) - H(q_{cl} + \delta q, p_{cl} + \delta p)) \\ = S_{\gamma_{cl}} + 0 + \frac{1}{2} \int_0^T dt \left(2\delta p \delta \dot{q} - \delta q \frac{\partial^2 H}{\partial q^2} \Big|_{\gamma_{cl}} \delta q - \delta p \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \Big|_{\gamma_{cl}} \delta p - 2\delta q \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} \Big|_{\gamma_{cl}} \delta p \right) + \delta^3 S + \dots$$

Die erste Variation $\delta S|_{\gamma_{cl}}$ verschwindet per Definition von γ_{cl} . Den Term $2\delta p \delta \dot{q}$ symmetrisieren wir zu $\delta p \delta \dot{q} - \delta q \delta \dot{p}$ mittels partieller Integration und Verwendung von $\delta q(0) = 0 = \delta q(T)$. Die zweite Variation schreiben wir als **quadratische Form**:

$$\delta^2 S|_{\gamma_{cl}} = - \int_0^T dt (\delta p \ \delta q) \begin{pmatrix} M_{pp} & M_{pq} \\ M_{qp} & M_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p \\ \delta q \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{pmatrix} M_{pp} & M_{pq} \\ M_{qp} & M_{qq} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} & -\frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} \\ \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} & \frac{\partial^2 H}{\partial q^2} \end{pmatrix} \Big|_{\gamma_{cl}} \equiv M.$$

Wenn wir die Entwicklung nach der zweiten Variation abbrechen, verbleibt die Berechnung eines Gaußschen Pfadintegrals. Die unendlich-dimensionale Version der Formel

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\pi \sum_{k,l=1}^n x_k A_{kl} x_l} d^n x = 1/\sqrt{\text{Det} A}$$

liefert dann den folgenden Beitrag von γ_{cl} zum Propagator:

$$e^{iS_{\gamma_{cl}}/\hbar} / \sqrt{\text{Det} M} \times \sqrt{\text{Det} \begin{pmatrix} 0 & -d/dt \\ d/dt & 0 \end{pmatrix} \Big|_{\text{frei}}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}}.$$

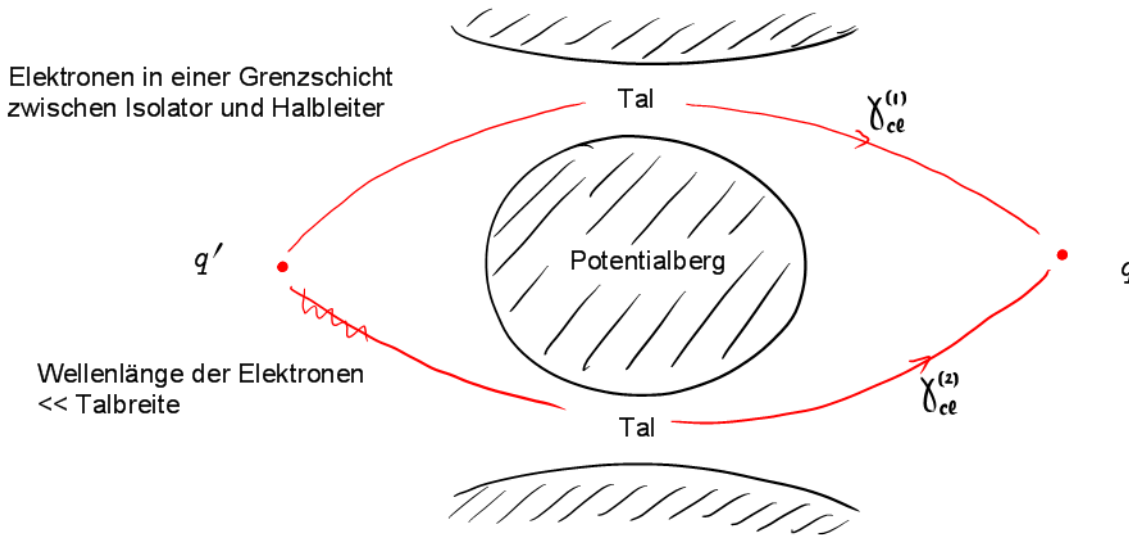
Die **Determinante** $\text{Det} M$ lässt sich als Produkt der Eigenwerte des (Matrix-)Differentialoperators M auffassen. Allerdings würde diese Determinante in Isolation keinen Sinn ergeben, denn das Produkt der Eigenwerte ist nicht endlich. Sinnvoll ist jedoch das Verhältnis der Determinanten $\text{Det} M / \text{Det} M(0)$, wobei $M(0)$ der Differentialoperator M der freien Bewegung ($H \equiv 0$) ist. Die zweite Determinante resultiert aus einer sorgfältigen Behandlung des Integrationsmaßes des Pfadintegrals (inklusive Regularisierung). Das Verhältnis der (regularisierten) Determinanten lässt sich (im Limes verschwindender Regularisierung) explizit berechnen und ergibt den Wurzelfaktor in der van-Vleck-Formel.

Existieren mehrere Lösungen γ_{cl} , so ist die Summe zu nehmen.

Literatur. Weiterführende Literatur für Interessierte ist: M. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer Verlag, 1990).

Würdigung. Die Van Vleck Formel ist paradigmatisch für semiklassische Näherungen: sie fügt rein klassische Daten, eben $S_{\gamma_{cl}}(q, q'; T)$, zu einem quantenmechanischen Ausdruck zusammen, der insbesondere die Möglichkeit zu **Welleninterferenz** birgt.

Beispiel für eine mögliche Anwendung (**“Doppelspalt”**) der van-Vleck-Formel:



Zum **Gültigkeitsbereich** der semiklassischen Näherung merken wir an, dass analog zur Sattelpunktmethode für $\int e^{-Nf(x)} dx$ die Entwicklung von S zu höheren Ordnungen Korrekturen der schematischen Form

$$\hbar \delta^4 S|_{\gamma_{cl}} / (\delta^2 S|_{\gamma_{cl}})^2, \quad \hbar (\delta^3 S|_{\gamma_{cl}})^2 / (\delta^2 S|_{\gamma_{cl}})^3, \quad \text{usw.}$$

gibt. Grob gesprochen sind diese Korrekturen klein, falls die Wellenlänge der Teilchen klein ist im Vergleich zu den relevanten Längenskalen, über welche die anharmonischen Anteile von S variieren. Für Systeme mit $\delta^3 S = \delta^4 S = \dots = 0$ (freie Bewegung, harmonischer Oszillator) ist die semiklassische Näherung exakt.

Mitteilung. Das Pfadintegral und seine semiklassische (oder “perturbative”) Auswertung bildet die Grundlage für einen Großteil der quantitativen Berechnungen in der Quantenfeldtheorie, insbesondere Quantenelektrodynamik und Quantenchromodynamik.

5.5 Hamilton-Jacobi-Gleichung

Die Van-Vleck-Formel ist eine gute Näherung für kurze Zeiten T , da dann die Energie der klassischen Bewegung γ_{cl} für vorgegebene Orte q', q groß und somit die entsprechende Wellenlänge klein ist. Wir behandeln jetzt einen etwas anderen Zugang zum semiklassischen Limes, der letztendlich zu einem Verfahren für die Behandlung stationärer Zustände führen wird.

5.5.1 KM

Wir erinnern an die Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik. Wie wir wissen, resultieren für ein Hamiltonsches System mit kanonischen Koordinaten q, p und Hamiltonfunktion

h die kanonischen Bewegungsgleichungen $\dot{q} = \partial h / \partial p$ und $\dot{p} = -\partial h / \partial q$ aus dem Hamiltonschen Prinzip $\delta \int_{\gamma} (p dq - h dt) = 0$. Nun sind aber die gewählten kanonischen Koordinaten $(q, p; t)$ in dem um die Zeit $t \in \mathbb{R}$ **erweiterten Phasenraum** $M \times \mathbb{R}$ beliebig und können durch andere kanonische Koordinaten $(Q, P; t)$ mit transformierter Hamiltonfunktion H ersetzt werden. Damit die koordinatenfrei definierte Dynamik des Hamiltonschen Systems unverändert bleibt (also nach wie vor durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen $\dot{Q} = \partial H / \partial P$ und $\dot{P} = -\partial H / \partial Q$ gegeben ist), muss der Koordinatenwechsel so geführt werden, dass Extrema des Wirkungsfunktional $\int (p dq - h dt)$ (mit festgehaltenen $q(0)$ und $q(T)$) auch Extrema des transformierten Wirkungsfunktional $\int (PdQ - Hdt)$ (mit festgehaltenen $Q(0)$ und $Q(T)$) sind.

Aufgabe. Zeige, dass diese Forderung **⊨** erfüllt ist, falls eine Funktion S_1 existiert mit

$$p dq - h dt = PdQ - Hdt + dS_1.$$

Setzen wir nun $S_1 = S - PQ$, so wird die obige Beziehung mit $d(PQ) = PdQ + QdP$ zu

$$p dq - h dt = -QdP + Hdt + dS.$$

(Achtung: S steht hier für eine Funktion $S : M \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, nicht wie zuvor für das Hamiltonsche Wirkungsfunktional. Wir werden aber sehen, dass hierzu ein Zusammenhang besteht.) Es ist jetzt zweckmäßig, die Funktionen q und P als Koordinatenfunktionen zu benutzen. (Das geschieht unter dem Vorbehalt, dass dq und dP an jeder Stelle des erweiterten Phasenraums $M \times \mathbb{R}$ linear unabhängig sind. Da P erst noch konstruiert werden muss, kann diese Bedingung erst zum Schluss im Sinne eines Konsistenztests überprüft werden.) Natürlich ist das Paar (q, P) in der Regel nicht kanonisch. Für den nächsten Schritt wird aber lediglich die Koordinateneigenschaft benötigt, um dS auszudrücken:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial q} dq + \frac{\partial S}{\partial P} dP + \frac{\partial S}{\partial t} dt,$$

und dann durch Koeffizientenvergleich zu schließen, dass die folgenden Relationen gelten:

$$p = \frac{\partial S}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial S}{\partial P}, \quad H = h + \frac{\partial S}{\partial t}.$$

In der Hamilton-Jacobi-Theorie versucht man nun, die Koordinatenfunktionen $(Q, P; t)$ so zu wählen, dass die transformierte Hamiltonfunktion H zu Null wird: **$H \equiv 0$** . Das ist sicher ein erstrebenswertes Ziel und einen Versuch wert, denn im Erfolgsfall haben wir ja dann $\dot{Q} = \dot{P} = 0$. Anders gesagt sind die neuen kanonischen Koordinaten Q und P Konstanten der Bewegung. Hieraus folgt aber auch sofort, dass der Ansatz der Hamilton-Jacobi-Theorie nur funktionieren kann, wenn das System maximal viele Konstanten der Bewegung besitzt, also **integrabel** ist.

Die Bedingung $H \equiv 0$ führt auf eine partielle Differentialgleichung, die sogenannte **Hamilton-Jacobi-Gleichung**:

$$h\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Beispiel. Jedes Hamiltonsche System mit nur einem Ortsfreiheitsgrad ist integrabel. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung wird in diesem Fall gelöst durch

$$S = W - ht, \quad P = h, \quad W = \int p dq,$$

wobei das Integral längs Kurven konstanter Energie zu führen ist. Um die (zeitunabhängige) Funktion W an der variablen Stelle $(q_1, p_1) \in M$ zu berechnen, integriert man also die Form $p dq$ längs der Lösungskurve von $h(\bullet) = h(q_1, p_1)$ ausgehend von einer auf dieser Kurve (beliebig, aber fest) gewählten Referenzstelle (q_0, p_0) . Für $h = p^2/2m + V$ haben wir demnach

$$W(q_1, p_1) = \int_{q_0}^{q_1} \sqrt{2m(h(q_1, p_1) - V(q))} dq.$$

Im allgemeinen Fall (Integrabilität immer vorausgesetzt) wird die Hamilton-Jacobi-Gleichung durch die **Hamiltonsche Prinzipalfunktion**

$$S = \int (p dq - h dt)$$

gelöst. Sie entsteht, indem man das Hamiltonsche Wirkungsfunktional auf die Integralkurven des Hamiltonschen Systems (also die Lösungen der Bewegungsgleichungen) einschränkt, und die resultierende Funktion als Funktion von Endort, Endimpuls und Endzeit betrachtet. Für das Folgende merken wir uns die Bedeutung von $\partial S/\partial q$ und $\partial S/\partial t$ als Impuls bzw. Energie der Bewegung.

5.5.2 QM

Ausgehend von der Schrödinger-Gleichung

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

machen wir für die Wellenfunktion den **Ansatz**

$$\psi(q, t) = \sqrt{\rho(q, t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \varphi(q, t)\right)$$

– wir zerlegen also nach **Betrag und Phase**. Indem wir diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung einsetzen, erhalten wir nach Division durch ψ die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ln \sqrt{\rho} - \frac{\partial \varphi}{\partial t} = V + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} - \frac{i\hbar}{m} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q} \right) \frac{\partial}{\partial q} \ln \sqrt{\rho} - \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\rho}^{-1} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \sqrt{\rho}.$$

Jetzt suchen wir nach einer Lösung hiervon in Form einer **Entwicklung** nach Potenzen von \hbar :

$$\varphi = \varphi_0 + \hbar \varphi_1 + \hbar^2 \varphi_2 + \dots \quad \text{und} \quad \rho = \rho_0 + \hbar \rho_1 + \dots$$

In führender Ordnung ergibt sich für $\varphi_0 \equiv S$ genau die Hamilton-Jacobi-Gleichung:

$$\mathcal{O}(\hbar^0): \quad -\frac{\partial \varphi_0}{\partial t} = V + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial q} \right)^2.$$

In der nächsten Ordnung erhalten wir zwei reelle Gleichungen für φ_1 und ρ_0 :

$$\mathcal{O}(\hbar^1): \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial q} \right) \frac{\partial}{\partial q} \right) \ln \sqrt{\rho_0} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial q^2},$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial q} \right) \frac{\partial}{\partial q} \right) \varphi_1 = 0.$$

Historische Fußnote. Es war seit dem Ende des 19. Jahrhunderts bekannt gewesen, dass die Wellengleichung der Maxwellschen Elektrodynamik im Grenzfall der geometrischen Optik (oder Strahlenoptik) in die entsprechende Hamilton-Jacobi-Gleichung übergeht. Schrödinger gelangte zu seiner Wellengleichung, indem er von der obigen Hamilton-Jacobi-Gleichung für **Materieteilchen** (statt Lichtstrahlen) ausging und sozusagen “rückwärts” rechnete.

Was lernen wir aus dem obigen Gleichungssystem? Der Vergleich mit der Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik (Abschnitt 5.5.1) zeigt, dass die Phasenfunktion φ/\hbar der quantenmechanischen Wellenfunktion in semiklassischer Näherung ($\varphi \approx \varphi_0$) die klassische Bedeutung der Hamiltonschen Prinzipalfunktion $\varphi_0/\hbar = S/\hbar$ in Einheiten der Planckschen Konstanten hat. Angesichts der Bedeutung von S heißt das wiederum, dass

$$\frac{\partial \varphi}{\partial q} \approx \frac{\partial S}{\partial q} \quad \text{und} \quad -\frac{\partial \varphi}{\partial t} \approx -\frac{\partial S}{\partial t}$$

als der **Impuls** bzw. die **Energie** der Bewegung der “Wellenteilchen” zu interpretieren sind. Die hieraus folgende Interpretation von

$$v := \frac{1}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial q} \approx \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial q}$$

als Geschwindigkeit finden wir in den obigen $\mathcal{O}(\hbar^1)$ -Gleichungen bestätigt: die Lösung zu

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial q} \right) f(q, t) = 0$$

für konstantes v ist $f(q, t) = f(q - vt, 0)$. Speziell sehen wir, dass die (semiklassische Näherung für die) Einhüllende $\sqrt{\rho_0}$ der Wellenfunktion sich ganz einfach mit der lokalen Geschwindigkeit $v \approx \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial q}$ fortbewegt, wenn die rechte Seite $-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}$ der $\mathcal{O}(\hbar^1)$ -Gleichung für $\sqrt{\rho_0}$ klein ist.

Wann ist das letztere der Fall? Wegen

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} \stackrel{\text{HJ-Glg}}{=} \pm \frac{\partial}{\partial q} \sqrt{2m(-V - \partial S/\partial t)}$$

ergibt sich im stationären Fall $\partial S/\partial t = -E$ der Ausdruck

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = \pm \frac{\partial}{\partial q} \sqrt{2m(E - V(q))} = \frac{\mp m V'(q)}{\sqrt{2m(E - V(q))}} \quad \text{und somit} \quad -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = \pm \frac{V'(q)}{2p},$$

was die Dimension einer Frequenz hat. Korrekturen zur klassischen Dynamik $\rho_0(q, t) = \rho_0(q - vt, 0)$ werden also bedeutsam, wenn die Kraftwirkung $|V'(q)|$ (also die **Rate der** Impulsänderung nach dem Newtonschen Gesetz der klassischen Mechanik) vergleichbar wird mit dem Produkt aus Impuls $|p|$ und der Rate $\partial \ln \sqrt{\rho_0}/\partial t$ der zeitlichen Änderung der Einhüllenden des Wellenpakets.

5.6 WKB-Näherung für stationäre Zustände

Aufbauend auf der Hamilton-Jacobi-Theorie konstruieren wir jetzt stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung:

$$\psi(q, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(q, 0),$$

mittels einer nach **Wentzel, Kramers und Brillouin** benannten Näherung (1926). In der Notation des vorangehenden Abschnitts entspricht obige Gleichung dem Ansatz

$$\varphi(q, t) = W(q) - Et.$$

Die zeitunabhängige Phasenfunktion W genügt in führender Näherung, $\mathcal{O}(\hbar^0)$, der reduzierten Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2 + V(q).$$

Sie ist wie die volle Hamilton-Jacobi-Gleichung nur für integrable Systeme global lösbar. Wir beschränken uns hier auf den Fall $d = 1$, der bei erhaltener Energie immer integrabel ist.

Auflösen nach W' ergibt

$$W'(q) = \pm \sqrt{2m(E - V(q))}.$$

Die $\mathcal{O}(\hbar^1)$ -Gleichung für ρ_0 ,

$$\frac{W'(q)}{m} \frac{\partial}{\partial q} \ln \sqrt{\rho_0} = -\frac{W''(q)}{2m},$$

wird gelöst durch

$$\sqrt{\rho_0(q)} = \frac{\text{const}}{\sqrt{W'(q)}}.$$

Wir treffen jetzt eine **Fallunterscheidung**.

Im **klassisch erlaubten Bereich**, I: $E > V(q)$, setzen wir

$$k_+(q) := \sqrt{2m(E - V(q))}/\hbar.$$

Wegen der Vorzeichenwahlfreiheit beim Wurzelziehen für $W'(q)$ haben wir zwei mögliche Lösungen für den zeitunabhängigen Teil der Wellenfunktion:

$$\psi_{\text{I}}(q) = \frac{A}{\sqrt{k_+(q)}} \exp\left(\pm i \int_{q_0}^q k_+(q') dq'\right).$$

Im **klassisch verbotenen Bereich**, II: $E < V(q)$, setzen wir

$$k_-(q) := \sqrt{2m(V(q) - E)}/\hbar.$$

Auch hier existieren aus gleichem Grund zwei mögliche Lösungen:

$$\psi_{\text{II}}(q) = \frac{B}{\sqrt{k_-(q)}} \exp\left(\pm \int_{q_2}^q k_-(q') dq'\right).$$

Eine Näherung für die Gesamtwellenfunktion ψ des stationären Zustands mit Energie E entsteht durch Zusammenstückeln der Teile $\psi_{\text{I,II}}$. Die Approximation durch die Ausdrücke $\psi_{\text{I,II}}$ ist gut in jenen Ortsbereichen, wo die quantenmechanischen Korrekturen zur Hamilton-Jacobi-Gleichung klein sind:

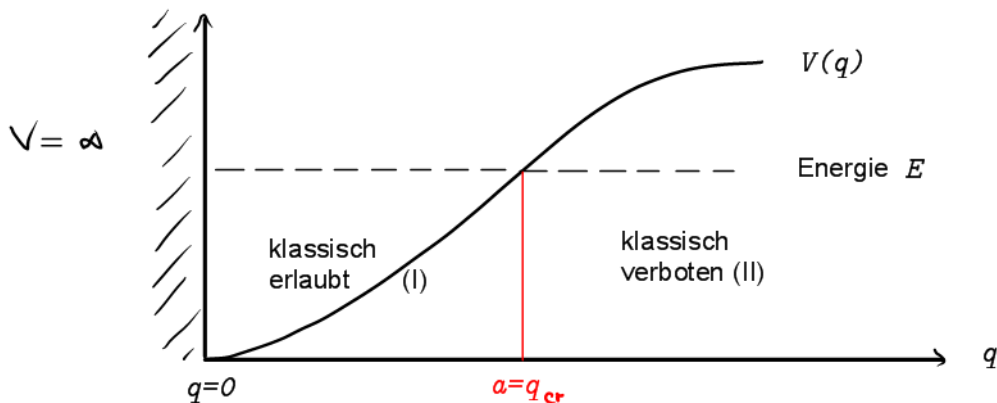
$$\hbar W''(q) \ll W'(q)^2.$$

Diese Bedingung ist an jedem **Umkehrpunkt** q_{cr} der klassischen Bewegung verletzt; diese sind Lösungen von

$$W'(q_{\text{cr}}) = 0.$$

Man ist also mit der Komplikation konfrontiert, dass die Näherung genau dort zusammenbricht, wo die einzelnen Teile zusammengefügt werden müssen. Um den Anschluss herzustellen, bedient man sich in der Praxis der sogenannten **WKB-Anschlussregeln**. Wir zeigen nun exemplarisch an einem informativen Fall, wie das funktioniert.

Beispiel. Wir konstruieren gebundene Zustände in WKB-Näherung für die folgende Situation:



Für stationäre Zustände (in jeder einfach zusammenhängenden Geometrie) muss die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $[\propto \text{Im}(\bar{\psi}\psi')]$ verschwinden. Außerdem erzwingt die unendlich hohe Potentialmauer das Verschwinden der Wellenfunktionen in $q = 0$. Beide Bedingungen werden erfüllt durch

$$\psi_{\text{I}}(q) = \frac{A}{\sqrt{k_+(q)}} \sin\left(\int_0^q k_+(q') dq'\right)$$

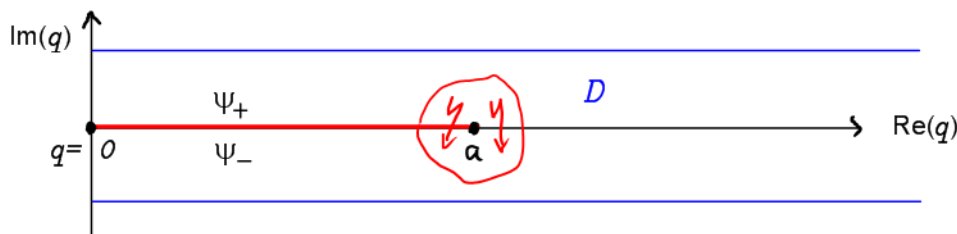
im klassisch erlaubten Bereich $0 \leq q < a := q_{\text{cr}}$. Für den klassisch verbotenen Bereich $q > a$ muss das untere Vorzeichen (im obigen Ausdruck für ψ_{II}) gewählt werden, damit die Wellenfunktion beim Eindringen abklingt (anstatt exponentiell anzuwachsen):

$$\psi_{\text{II}}(q) = \frac{B}{\sqrt{k_-(q)}} \exp\left(-\int_a^q k_-(q') dq'\right).$$

Es verbleibt die Frage, wie die Konstanten A und B (und letztlich die Energie E) zu wählen sind, damit die exakte Wellenfunktion des stationären Zustandes gut angenähert wird. Wie schon gesagt geht das nicht direkt, denn ψ_{I} und ψ_{II} sind an der Anschluss-Stelle $q = a$ unbrauchbar.

Ein gangbarer Weg besteht darin, die Schrödinger-Gleichung in der Nähe des Umkehrpunkts mit höherer Präzision zu lösen. Das ist allerdings mit einem gewissen Aufwand (\rightarrow Lösungstheorie der Airy-Gleichung) verbunden. Eine alternative, schnellere Lösung bedient sich wie folgt der Idee der komplex-analytischen Fortsetzung.

Grob gesprochen wollen wir versuchen, die Wellenfunktion $\psi(q)$ zu einer holomorphen Funktion der komplexen Variablen q in einem Streifen $-R < \text{Im}(q) < R$ fortzusetzen. Das geht nicht sofort, denn die stationäre Schrödinger-Gleichung für $h = p^2/2m + V$ ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung mit zwei linear unabhängigen Lösungen und, wie man den WKB-Ausdrücken unschwer ansieht, findet bei Umlauf um den klassischen Umkehrpunkt $q = a$ Monodromie der zwei Lösungen statt: die exponentiell abklingende Lösung (für $\mathbb{R} \ni q > a$) wird bei einmaligem Umlauf zur exponentiell ansteigenden und die rechtslaufende (für $a < q \in \mathbb{R}$) zur linkslaufenden Lösung. Um die Lösung eindeutig zu machen, schneiden wir das Holomorphiegebiet $-R < \text{Im}(q) < R$ auf: wir legen einen Verzweigungsschnitt längs der reellen q -Achse von $q = 0$ bis $q = a$. (Diese Wahl des Schnitts ist unserem Ziel angepasst, wenn auch im Prinzip willkürlich.)



Im Holomorphiegebiet D außerhalb der $q = a$ umgebenden Problemzone können wir die komplex-analytisch fortgesetzte Wellenfunktion in guter Näherung durch ihre (komplex-analytisch fortgesetzte) WKB-Approximation ersetzen:

$$\psi(q) \approx \frac{B}{\sqrt{k(q)}} \exp\left(-\int_a^q k(q') dq'\right).$$

Hierbei ist $k : D \rightarrow \mathbb{C}$ die holomorphe Funktion

$$k(q) = \sqrt{2m(V(q) - E)}/\hbar,$$

die auf $D \cap \mathbb{R}$, also für $a < q \in \mathbb{R}$, mit der positiven reellwertigen Funktion $k_-(q)$ übereinstimmt.

Wir überlegen uns nun, wie die holomorphe Funktion ψ bei Annäherung an den Verzweigungsschnitt von oben ($\text{Im } q \rightarrow 0+$) oder unten ($\text{Im } q \rightarrow 0-$) aussieht. Die beiden Grenzwerte bezeichnen wir mit $\psi_+(q)$ bzw. $\psi_-(q)$ (für $0 < q < a$). Für die holomorphe Funktion k haben wir

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^\pm} k(q \pm i\varepsilon) = e^{\pm i\pi/2} \sqrt{2m(E - V(q))}/\hbar = e^{\pm i\pi/2} k_+(q) \quad (0 \leq q < a).$$

Im Fall der Stammfunktion $\int k(q') dq'$ im Exponenten kommt es wegen der Präsenz des Differentials dq' zu einem zusätzlichen Faktor $e^{\pm i\pi}$ (bei Umkehr der Integrationsrichtung). So erhalten wir

$$\psi_\pm(q) = \frac{B e^{\mp i\pi/4}}{\sqrt{k_+(q)}} \exp\left(-e^{\pm 3i\pi/2} \int_q^a k_+(q') dq'\right) = \frac{B}{\sqrt{k_+(q)}} e^{\pm i \int_q^a k_+(q') dq' \mp i\pi/4}.$$

Wir sehen, dass ψ_+ die Lösung mit negativem Strom ist (die Phase nimmt mit wachsendem q ab) und ψ_- die mit positivem. Man beachte vor allem die Phasenverschiebung von $+\pi/4 - (-\pi/4) = \pi/2$ zwischen den beiden Lösungen. (Hieraus resultiert die allgemeine WKB-Regel einer Phasenverschiebung von $\pi/2$ für Umkehrpunkte vom vorliegenden Typ.)

Um zur stromfreien stationären Lösung zu gelangen, ist das arithmetische Mittel zu bilden:

$$(\psi_+(q) + \psi_-(q))/2 \equiv \psi_{\text{II}}(q) \Big|_{q < a} = \frac{B}{\sqrt{k_+(q)}} \cos \left(\int_q^a k_+(q') dq' - \frac{\pi}{4} \right).$$

Die Integrationskonstanten A und B und der Energiewert lassen sich jetzt durch Vergleich mit $\psi_{\text{I}}(q)$ (siehe oben) bestimmen. Im vorliegenden Fall erreichen wir das Ziel aber noch schneller, indem wir direkt verlangen, dass die analytisch fortgesetzte Lösung $\psi_{\text{II}}(q) \Big|_{q < a}$ an der Potentialmauer $q = 0$ verschwindet. Das passiert genau dann, wenn die Nullstellenmenge $\pi(\mathbb{Z} + 1/2)$ des Kosinus getroffen wird, also für

$$\int_0^a k_+(q) dq - \frac{\pi}{4} \in \pi(\mathbb{Z} + 1/2).$$

Folglich lautet die **WKB-Quantisierungsregel** im vorliegenden Fall

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(E_n - V(q))} dq - \pi/4 = \pi(n + 1/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Aufgabe. Zeige, dass diese Quantisierungsregel alle ungeraden Energieniveaus (also: 1. Anregung, 3. Anregung, usw.) des harmonischen Oszillators ohne Fehler (!) vorhersagt. (Hinweis: die Wellenfunktionen aller ungeraden Oszillator-Niveaus verschwinden im Potentialminimum. Daher kann man in diesem Fall ohne Änderung eine unendlich hohe Potentialwand erfinden und das Problem auf den hier betrachteten Aufgabentyp abbilden.)

6 Geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld

6.1 Eichtransformationen

6.1.1 Klassische Mechanik

Die **Lagrangefunktion** für ein Teilchen mit Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Feld lautet

$$L = \frac{m}{2} \vec{v}^2 + e \vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi \quad (\vec{v} = \dot{\vec{x}}),$$

wobei \vec{A}, ϕ ein Satz von **Potentialen** für die physikalischen Feldstärken \vec{B}, \vec{E} sind:

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}, \quad \vec{E} = -\text{grad} \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

Die Potentiale sind nicht eindeutig bestimmt: mit \vec{A}, ϕ sind für irgendeine differenzierbare Funktion $\chi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ in Raum und Zeit auch

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad} \chi, \quad \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t},$$

Potentiale zu \vec{B}, \vec{E} . Der Übergang von \vec{A}, ϕ zu \vec{A}', ϕ' heißt **Eichtransformation**. Dabei ändert sich die Lagrangefunktion um eine **totale Zeitableitung**, also Differentiation längs einer Kurve $t \mapsto (\vec{x}(t), t)$:

$$L \mapsto L' = L + e \operatorname{grad} \chi \cdot \vec{v} + e \frac{\partial \chi}{\partial t} = L + e \frac{d\chi}{dt}.$$

Da die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial L}{\partial x_j} \quad (j = 1, 2, 3)$$

der Lagrange-Mechanik aus dem **Euler-Lagrange** Variationsprinzip $\delta \int L dt = 0$ mit den Randbedingungen $\delta x_j(0) = 0 = \delta x_j(T)$ folgen, bleiben sie unter einer Eichtransformation $L \mapsto L + e d\chi/dt$ ungeändert. Tatsächlich werden sie allein durch die eichinvarianten Feldstärken ausgedrückt:

$$m\dot{\vec{x}} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}).$$

Wir gehen jetzt zur Hamiltonschen Formulierung über. Der kanonische Impuls \vec{p} ist wie immer die partielle Ableitung der Lagrangefunktion nach der Geschwindigkeit:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + e\vec{A},$$

und die **Hamiltonfunktion** gewinnen wir per Legendre-Transformation:

$$H = \vec{p} \cdot \vec{v} - L = \frac{m}{2} \vec{v}^2 + e\phi = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\phi.$$

Das resultierende Verhalten von Impuls und Energie unter Eichtransformationen ist wie folgt:

$$\vec{p} \mapsto \vec{p}' = \vec{p} + e \operatorname{grad} \chi, \quad H \mapsto H' = H - e \frac{\partial \chi}{\partial t}.$$

Die 1-Form $\eta = \sum p_j dx_j - H dt$ (auch bekannt als die Integralinvariante von **Poincaré-Cartan**) ändert sich unter Eichtransformationen lediglich um ein totales Differential:

$$\eta \mapsto \eta' = \eta + e \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \chi}{\partial x_j} dx_j + \frac{\partial \chi}{\partial t} dt \right) = \eta + e d\chi.$$

Vor dem Hintergrund des Hamiltonschen Prinzips (der kleinsten Wirkung) ist deshalb klar, dass die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}},$$

unter Eichtransformationen invariant sind. (Das ist aus der direkten Betrachtung insofern nicht ganz offensichtlich, als die Gleichung $\dot{\vec{p}} = -\partial H / \partial \vec{x}$ durch eichabhängige Größen ausgedrückt ist!)

Wichtig für den Übergang zur Quantenmechanik ist:

$$\text{mechanischer Impuls } m\vec{v} \neq \text{kanonischer Impuls } \vec{p}.$$

Die **Poisson-Klammer** des klassischen Phasenraums folgt wie immer aus der symplektischen Form

$$d \left(\sum_j p_j dx_j \right) = \sum_j dp_j \wedge dx_j \quad \text{mit} \quad p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = mv_j + eA_j$$

dem kanonischen Impuls. Nach der invarianten Vorschrift von Kapitel 2 haben wir beim Übergang zur Wellenmechanik den kanonischen Impuls p_j (nicht den mechanischen Impuls mv_j) durch $-\hbar \partial / \partial x_j$ zu ersetzen.

6.1.2 Quantenmechanik

Aus dem abstrakten Gesetz $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle$ bekommen wir wie üblich durch die Ersetzungen $\hat{x}_j \rightarrow x_j$ und $\hat{p}_j \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x_j$ in der Hamiltonfunktion $H = (\vec{p} - e\vec{A})^2/2m + e\phi$ die Schrödinger-Gleichung der Wellenmechanik:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - eA_j(\vec{x}, t) \right)^2 \psi(\vec{x}, t) + e\phi(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t).$$

Damit die Schrödinger-Gleichung (als das dynamische Gesetz der Wellenmechanik) unter Eichtransformationen $\vec{A} \mapsto \vec{A} + \text{grad}\chi$, $\phi \mapsto \phi - \partial\chi/\partial t$ ihre Form beibehält, benötigen wir offenbar

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + e \frac{\partial\chi}{\partial x_j}, \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mapsto i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e \frac{\partial\chi}{\partial t}.$$

Um dieses gewünschte Verhalten zu erzielen, postuliert man für die Wellenfunktion eines Teilchens der **Ladung e** das folgende Verhalten unter **Eichtransformationen**:

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = e^{ie\chi(\vec{x}, t)/\hbar}\psi(\vec{x}, t).$$

In der Tat sieht man sofort, dass die Schrödinger-Gleichung für $\vec{A}, \phi; \psi$ mit der so gewählten Eichtransformation in die (formgleiche) Schrödinger-Gleichung für $\vec{A}', \phi'; \psi'$ übergeht.

Die Eichabhängigkeit des kanonischen Impulses $\vec{p} = m\vec{v} + e\vec{A}$ in der klassischen Mechanik spiegelt sich quantenmechanisch darin wieder, dass sein Erwartungswert nicht wohldefiniert ist. (Gleiches gilt übrigens für die Energie, was wir allerdings solange ignorieren dürfen, wie wir von zeitabhängigen Eichtransformationen absehen.) Physikalisch sinnvoll ist der Erwartungswert des **mechanischen Impulses**:

$$\langle \psi | m\hat{v}_j | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{p}_j - eA_j | \psi \rangle = \int d^3x \bar{\psi} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - eA_j \right) \psi.$$

Unverändert bleibt im elektromagnetischen Feld der Ausdruck für die elektrische Ladungsdichte:

$$\rho(\vec{x}, t) = e |\psi(\vec{x}, t)|^2.$$

Der Ausdruck für die elektrische Stromdichte \vec{j} (siehe Abschnitt 2.2) ändert sich zu

$$\vec{j} = \frac{e\hbar}{m} \text{Im} \bar{\psi} \left(\text{grad} - \frac{ie}{\hbar} \vec{A} \right) \psi.$$

Aufgabe. Deduziere aus der Schrödinger-Gleichung die Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} + \text{div} \vec{j} = 0.$$

6.2 Homogenes Magnetfeld: Landau-Niveaus

Wir behandeln hier den Fall eines quantenmechanischen Teilchens der Masse m und Ladung e in der Euklidischen Ebene \mathbb{R}^2 (mit kartesischen Koordinaten x, y) in Anwesenheit eines homogenen senkrechten Magnetfelds $\vec{B} = B_0 e_z$ (eigentlich $B = B_0 dx \wedge dy$) und ohne elektrisches Feld ($\vec{E} = 0$). Ziel ist die Berechnung der stationären Zustände und entsprechenden Energieniveaus durch Lösen der Eigenwertgleichung $\hat{H}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$. Wir führen die Rechnung zweimal durch, und zwar in zwei verschiedenen Eichungen.

6.2.1 Landau-Eichung

Wir wählen $A = B_0 x dy$ (1-Form), also $A_x = A_z = 0$, $A_y = B_0 x$, oder $\vec{A} = B_0 x e_y$ (Vektorfeld). Außerdem ist $\phi = 0$. Die Hamiltonfunktion $h = (\vec{p} - e\vec{A})^2/2m$ gibt dann den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - eB_0 x \right)^2.$$

Zur Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung $H\psi = \lambda\psi$ machen wir für die Wellenfunktion den Ansatz $\psi(x, y) = e^{iky}\varphi(x)$. Für φ folgt dann die reduzierte Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} (\hbar k - eB_0 x)^2 \right) \varphi(x) = \lambda \varphi(x).$$

Mit den Abkürzungen $\omega := eB_0/m$ (für die Frequenz der klassischen **Zyklotronbewegung**) und $x_0 := \hbar k/m\omega$ bekommen wir die vereinfachte Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 (x - x_0)^2 \right) \varphi(x) = \lambda \varphi(x).$$

Diese Gleichung und ihre Lösungstheorie sind uns wohlbekannt: es handelt sich um den (im Ort um x_0 translatierten) eindimensionalen harmonischen Oszillator. Wir erinnern an das zugehörige Energiespektrum und die Eigenfunktionen ($n = 0, 1, 2, \dots$):

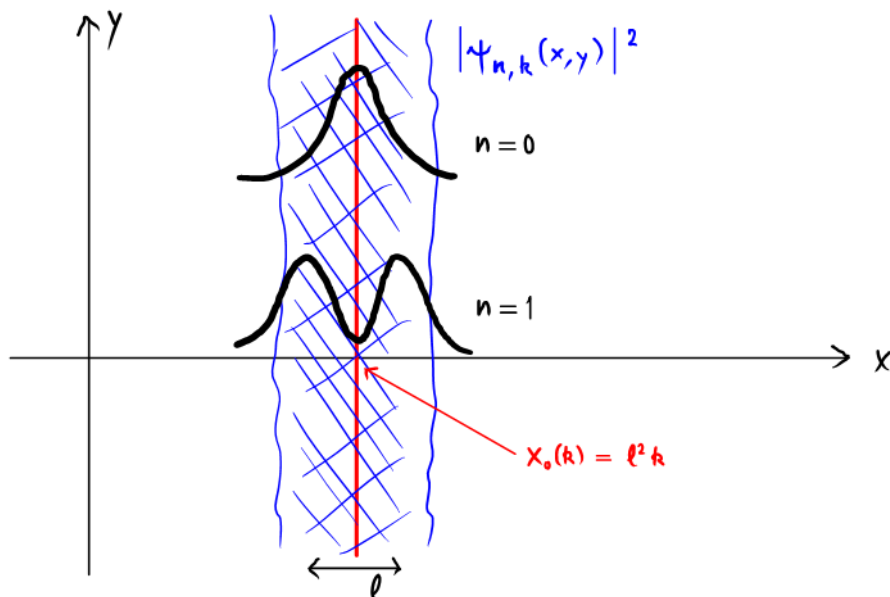
$$\lambda_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad \varphi_n(x) \propto e^{-(x-x_0)^2/2\ell^2} H_n((x-x_0)/\ell)$$

mit $\ell = \sqrt{\hbar/m\omega} = \sqrt{\hbar/eB_0}$. **Insgesamt** haben wir also die folgenden Energieniveaus und Wellenfunktionen stationärer Zustände:

$$\lambda_{n,k} = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots; k \in \mathbb{R}),$$

$$\psi_{n,k} \propto e^{iky} e^{-(x-x_0)^2/2\ell^2} H_n((x-x_0)/\ell).$$

Da der Parameter k beliebig (reell) gewählt werden kann, ist jedes Energieniveau $\lambda_{n,k}$ unendlich-fach entartet. Die Energie $\lambda_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ heißt das **n -te Landau-Niveau**. Die Zahl $x_0 = x_0(k) = \ell^2 k$ ist der Erwartungswert der x -Komponente des Ortes: $\langle \psi_{n,k} | \hat{x} | \psi_{n,k} \rangle = x_0(k)$.



Wir stellen die wichtigsten **charakteristischen Größen** des Problems zusammen:

- Der Energieabstand zwischen den Landau-Niveaus beträgt $\Delta E = \hbar\omega$ mit $\omega = eB_0/m$ der Zyklotronfrequenz ($T = 2\pi/\omega$ ist die Periodendauer der klassischen Zyklotronbewegung). Der Energieabstand wächst also linear mit der Stärke des Magnetfelds. Vermöge $\hbar\omega \stackrel{!}{=} k_B T$ entspricht er für $B_0 = 1$ Tesla einer Temperatur T von ca. 1 Kelvin. (Diese Größenordnung ist wichtig für die experimentelle Beobachtung des sog. **Quanten-Halleffektes**.)
- Die Ladungsdichte der stationären Zustände im n -ten Landau-Niveau und in der hier verwendeten Landau-Eichung sind zur y -Achse parallele "Streifen" mit Mittellinie $x = x_0(k)$ und Breite $\langle (\hat{x} - x_0)^2 \rangle^{1/2} = \ell\sqrt{n+1/2}$. Die charakteristische Länge $\ell = \sqrt{\hbar/eB_0}$ heißt die **magnetische Länge**. Man rechnet leicht nach, dass ℓ mit dem Radius einer klassischen Zyklotronbahn der kinetischen Energie $\frac{1}{2}\hbar\omega$ zusammenfällt (also $\frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{m}{2}\omega^2\ell^2$).
- Die Zustände mit Wellenfunktion $\psi_{n,k}$ tragen (trotz des Faktors e^{iky}) keinen Gesamtstrom. Das ändert sich, sobald ein elektrisches Feld angelegt wird.

Aufgabe. Verifiziere für die elektrische Stromdichte \vec{j} im Zustand mit Wellenfunktion $\psi_{0,k}(x, y) = (\sqrt{\pi}\ell)^{-1/2} e^{ix_0y/\ell^2 - (x-x_0)^2/2\ell^2}$, $x_0 = \ell^2 k$, das Ergebnis

$$j_x = 0, \quad j_y = -\frac{e\omega}{\sqrt{\pi}} e^{-(x-x_0)^2/\ell^2} (x-x_0)/\ell. \quad \square$$

Übrigens liegen die Wellenfunktionen $\psi_{n,k}(x, y)$ nicht im Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^2)$, d.h. sie sind (wegen $\int_{\mathbb{R}} |e^{iky}|^2 dy = \infty$) nicht quadratintegrabel. Dieser Makel läßt sich durch die Änderung der Eichung leicht beseitigen (siehe den nächsten Unterabschnitt).

6.2.2 Symmetrische Eichung

Wir treffen jetzt eine **andere Wahl** für das magnetische Vektorpotential:

$$A = \frac{1}{2}B_0(xdy - ydx) \quad \text{oder} \quad \vec{A} = \frac{1}{2}B_0(xe_y - ye_x).$$

Das Eigenwertproblem der stationären Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\begin{aligned} \lambda\psi(x, y) &= \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}eB_0y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{1}{2}eB_0x \right)^2 \right) \psi(x, y) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2 B_0^2}{8m} (x^2 + y^2) - \frac{\hbar}{im} \frac{eB_0}{2} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \psi(x, y). \end{aligned}$$

Man beachte die Invarianz von A bezüglich Rotationen in der Ebene \mathbb{R}^2 (mit Fixpunkt $x = y = 0$) und die resultierende **Rotationssymmetrie** des Hamiltonoperators.

Es ist nun zweckmäßig, zu **komplexen** Koordinaten überzugehen:

$$z = x + iy, \quad \bar{z} = x - iy, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

In diesen Koordinaten nimmt das Eigenwertproblem die folgende Form an:

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-4\ell^2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial \bar{z}} + \frac{|z|^2}{4\ell^2} - z \frac{\partial}{\partial z} + \bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) \psi(z, \bar{z}) = \lambda \psi(z, \bar{z}).$$

Das Problem lässt sich weiter vereinfachen, indem man die folgenden Operatoren einführt:

$$\begin{aligned} b &= \sqrt{2} \left(\ell \frac{\partial}{\partial \bar{z}} + \frac{z}{4\ell} \right), & b^\dagger &= \sqrt{2} \left(-\ell \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\bar{z}}{4\ell} \right), \\ a &= \sqrt{2} \left(\ell \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\bar{z}}{4\ell} \right), & a^\dagger &= \sqrt{2} \left(-\ell \frac{\partial}{\partial \bar{z}} + \frac{z}{4\ell} \right). \end{aligned}$$

Sie genügen den **Vertauschungsrelationen**

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = \mathbf{1}, \quad [a, b] = [a^\dagger, b^\dagger] = [a, b^\dagger] = [b, a^\dagger] = 0.$$

Die Operatoren a, a^\dagger und b, b^\dagger bilden also zwei unabhängige Sätze von Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für Oszillatorquanten. Wie man leicht nachrechnet, wird der Hamiltonoperator allein durch das b -System ausgedrückt:

$$H = \hbar\omega(b^\dagger b + 1/2).$$

Jetzt gehen wir wie bei der **algebraischen Lösung** des harmonischen Oszillators vor. Wir definieren einen abstrakten Zustandsvektor $|O\rangle$ durch

$$a|O\rangle = b|O\rangle = 0.$$

Die Wellenfunktion zu diesem Zustandsvektor ist

$$\psi_0(z, \bar{z}) = (2\pi\ell^2)^{-1/2} \exp\left(-\frac{|z|^2}{4\ell^2}\right),$$

mit Normierung

$$\langle O|O\rangle = \int_{\mathbb{C}} |\psi_0(z, \bar{z})|^2 d\text{Re}(z) d\text{Im}(z) = (2\pi\ell^2)^{-1} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-(x^2+y^2)/2\ell^2} dx dy = 1.$$

Die abstrakten Zustandsvektoren

$$|k, n\rangle := \frac{(a^\dagger)^k}{\sqrt{k!}} \frac{(b^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |O\rangle \quad (k, n = 0, 1, 2, \dots)$$

bilden dann ein **Orthonormalsystem** von Eigenvektoren des Hamiltonoperators mit Eigenwerten

$$\lambda_{k,n} = \hbar\omega(n + 1/2).$$

Die Zustandsvektoren mit festem n (und variablem $k = 0, 1, 2, \dots$) spannen das n -te Landau-Niveau auf. Die Wellenfunktionen der Zustände im niedrigsten Landau-Niveau ($n = 0$) haben eine besonders einfache Form:

$$\psi_{k,n=0}(z, \bar{z}) = \frac{\sqrt{2}^k}{\sqrt{k!}} \left(-\ell \frac{\partial}{\partial \bar{z}} + \frac{z}{4\ell} \right)^k \psi_0(z, \bar{z}) = \frac{(z/\sqrt{2}\ell)^k}{\sqrt{k!} 2\pi\ell^2} e^{-|z|^2/4\ell^2} \propto z^k e^{-|z|^2/4\ell^2}.$$

Sie sind also Produkte aus dem Gauss-Faktor $e^{-|z|^2/4\ell^2}$ und einer **holomorphen** Funktion $f(z) = \sum_k c_k z^k$. Die Ladungsdichte ρ für den $n = 0$ Zustand mit Quantenzahl k ist radialsymmetrisch, genauer gesagt **ringförmig**, $\rho \propto r^{2k} e^{-r^2/2\ell^2}$, mit Mittellinie $r = |z| = \ell\sqrt{2k}$ und Ringbreite $\sim \ell$.

Aufgabe. Berechne die elektrische Stromdichte für den Zustand mit Wellenfunktion $\psi_{k,0}$ im niedrigsten Landau-Niveau.

Lösung (mittels Differentialformen). Allgemeine Formel für die elektrische Stromdichte:

$$j = \frac{e\hbar}{m} \star \text{Im} \bar{\psi}(d - ieA/\hbar)\psi \quad (\star dx = dy, \quad \star dy = -dx).$$

Symmetrische Eichung:

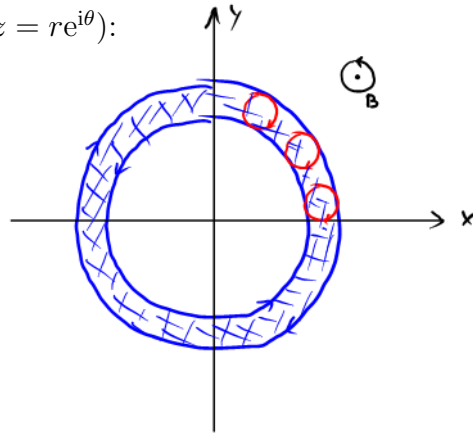
$$A = \frac{B_0}{2}(xdy - ydx) = \frac{B_0}{4i}(\bar{z}dz - zd\bar{z}) \quad \text{und somit} \quad -ieA/\hbar = (zd\bar{z} - \bar{z}dz)/4\ell^2.$$

Rechnung für $\psi \equiv \psi_{k,0}$:

$$\bar{\psi}(d - ieA/\hbar)\psi = |\psi|^2 \left(-d \frac{|z|^2}{4\ell^2} + k \frac{dz}{z} \right) + \frac{|\psi|^2}{4\ell^2} (zd\bar{z} - \bar{z}dz) = |\psi|^2 \left(k \frac{dz}{z} - \frac{\bar{z}dz}{2\ell^2} \right).$$

Ausdruck für die Stromdichte (mit Polarkoordinaten $z = re^{i\theta}$):

$$\begin{aligned} j &= \frac{e\hbar}{m} \star \text{Im} |\psi|^2 \left(k \frac{dz}{z} - \frac{\bar{z}dz}{2\ell^2} \right) \\ &= \frac{e\hbar}{m} \star |\psi|^2 \left(kd\theta - \frac{r^2 d\theta}{2\ell^2} \right) \\ &= \frac{e\hbar}{m} |\psi|^2 \left(k \frac{dr}{r} - \frac{r^2 dr}{2\ell^2} \right) \\ &= \frac{e\hbar}{2m} d|\psi|^2. \quad \square \end{aligned}$$



Check (Wechsel der Eichung). Die symmetrische Eichung $A' = \frac{1}{2}B_0(xdy - ydx)$ resultiert aus der Landau-Eichung $A = B_0xdy$ vermöge der Eichtransformation $A' = A + d\chi$ (oder $\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\chi$) mit $\chi = -\frac{1}{2}B_0xy$. Nach der allgemeinen Vorschrift von Abschnitt 6.1.2 gilt demnach

$$\psi \equiv \psi_{\text{Landau}} \mapsto \psi_{\text{symm}} \equiv \psi' = e^{i\chi/\hbar}\psi = e^{-ixy/2\ell^2}\psi.$$

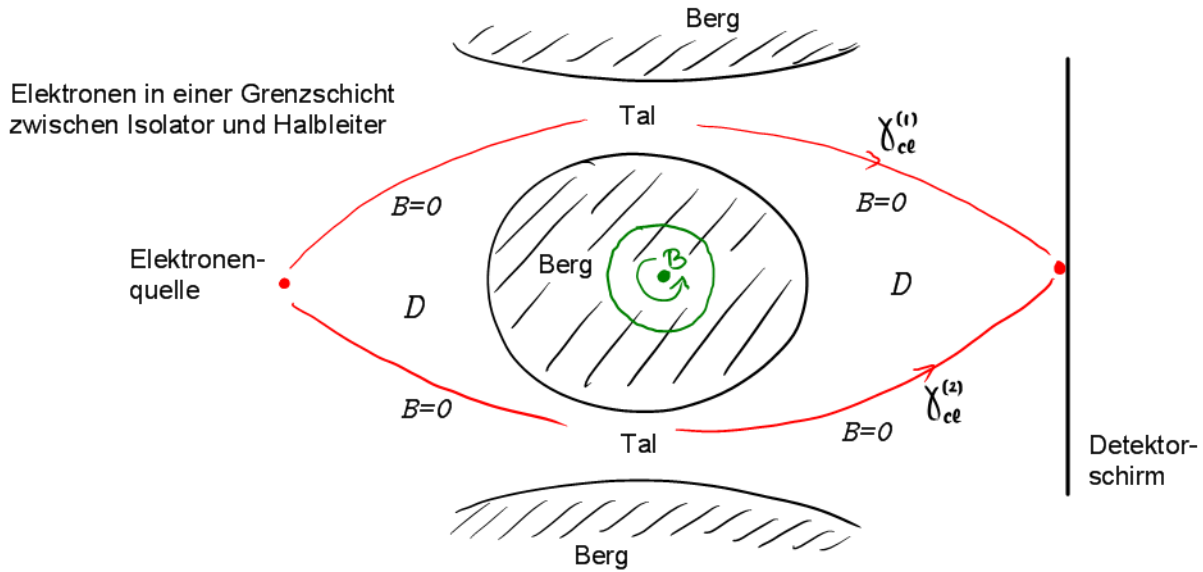
Für eine Wellenfunktion $\psi \propto e^{ix_0y/\ell^2 - (x-x_0)^2/2\ell^2}$ im niedrigsten Landau-Niveau der Landau-Eichung entsteht nach kurzer Rechnung

$$\psi \mapsto \psi' \propto e^{-ixy/2\ell^2} e^{ix_0y/\ell^2 - (x-x_0)^2/2\ell^2} = \dots = \text{const} \times e^{-|z|^2/4\ell^2} \exp\left(\frac{x_0z}{\ell^2} - \frac{z^2}{4\ell^2}\right).$$

Wie erwartet erhalten wir für ψ' das Produkt von $e^{-|z|^2/4\ell^2}$ mit einer holomorphen Funktion $f(z) = e^{x_0z/\ell^2 - z^2/4\ell^2}$, also ein Ergebnis von der allgemeinen Form der Wellenfunktionen im niedrigsten Landau-Niveau der symmetrischen Eichung. Durch Potenzreihenentwicklung $f(z) = \sum_k c_k z^k$ lässt sich ermitteln, wie man die "streifenförmigen" $n = 0$ Zustände der Landau-Eichung durch Linearkombination der "ringförmigen" $n = 0$ Zustände der symmetrischen Eichung bekommt.

6.3 Aharonov-Bohm Effekt

Wir betrachten nochmal die gleiche experimentelle Situation wie in Abschnitt 5.4, jetzt aber unter Hinzunahme eines **magnetischen Flusses** ϕ :



In dem den Elektronen zugänglichen Gebiet D sei das Magnetfeld überall Null; nur im zentralen Potentialberg, wohin die Elektronen nicht gelangen können, sei es von Null verschieden.

Ohne am Wesen der Situation etwas zu ändern, dürfen wir annehmen, dass das Experiment in semiklassischer Näherung analysiert werden kann. Wie angedeutet sollen zum van-Vleck-Propagator wieder zwei klassische Pfade $\gamma_{cl}^{(1)}$ und $\gamma_{cl}^{(2)}$ beitragen. Ohne Magnetfeld hätten wir

$$K(\vec{x}_f, \vec{x}_i; T) = Z_1 + Z_2 \quad \text{mit}$$

$$Z_k = \text{Det} \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \vec{x}_f \partial \vec{x}_i} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}_f, \vec{x}_i; T) \right) \Big|_{\gamma = \gamma_{cl}^{(k)}} ;$$

siehe Abschnitt 5.4. Was passiert nun in Anwesenheit eines Magnetfelds?

Da das Magnetfeld im Bereich der klassischen Bahnen $\gamma_{cl}^{(1,2)} \subset D$ verschwindet, bleiben diese unverändert. Jedoch ist

$$\int_{\gamma_{cl}^{(1)}} A - \int_{\gamma_{cl}^{(2)}} A = \oint_{\partial S} A = \iint_S B = \phi \neq 0,$$

daher kann A trotz $B|_D \equiv 0$ nicht überall auf $\gamma_{cl}^{(1)}$ und $\gamma_{cl}^{(2)}$ zu Null geeicht werden. Folglich entstehen in Anwesenheit des Magnetfelds **Zusatzterme** im Wirkungsfunktional:

$$S = \int_{\gamma} (\vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt) = \int_{\gamma} L dt = S|_{A=0} + e \int_0^T \vec{A} \cdot \dot{\vec{x}} dt = S|_{A=0} + e \int_{\gamma} A.$$

Der korrigierte Propagator

$$K(\vec{x}_f, \vec{x}_i; T) = Z_1 \exp \left(\frac{ie}{\hbar} \int_{\gamma_{cl}^{(1)}} A \right) + Z_2 \exp \left(\frac{ie}{\hbar} \int_{\gamma_{cl}^{(2)}} A \right)$$

liefert dann folgende Intensität für die Elektronenwelle im Beobachtungspunkt \vec{x}_f :

$$|K(\vec{x}_f, \vec{x}_i; T)|^2 = \left| Z_1 + Z_2 \exp \left(\frac{ie}{\hbar} \int_{\gamma_{cl}^{(2)}} A - \frac{ie}{\hbar} \int_{\gamma_{cl}^{(1)}} A \right) \right|^2 = |Z_1 + Z_2 e^{-ie\phi/\hbar}|^2$$

oder

$$|K(\vec{x}_f, \vec{x}_i; T)|^2 = |Z_1|^2 + |Z_2|^2 + 2\text{Re} (Z_1 \bar{Z}_2 e^{ie\phi/\hbar}) .$$

Die Quantentheorie macht also die Vorhersage (Ehrenberg & Siday, 1949; Aharonov & Bohm, 1959), dass die Intensität der auftreffenden Elektronen vom magnetischen Fluss ϕ abhängt, und zwar in periodischer Weise mit Periode $\phi_0 := 2\pi\hbar/e = h/e$ (dem sog. magnetischen **Flussquant**). Genau das wird experimentell auch beobachtet (erstmalig von Chambers, 1960). Aus der Sicht der klassischen Physik ist dieses Ergebnis insofern rätselhaft, als die Elektronen in den B -Feldbereich nicht vordringen und also die Kraftwirkung der magnetischen Feldstärke gar nicht erfahren können!

Hinweis. In einem Appendix zu dieser Vorlesung werden wir eine detaillierte mathematische Beschreibung der vorliegenden Situation geben. Hier, im Hauptteil der Vorlesung, können wir nur die zentralen Schlagwörter ansprechen:

Deutung. Aus der Vorhersage und experimentellen Verifikation des Aharonov-Bohm-Effekts (wie auch aus zahlreichen anderen Phänomenen) folgt zwingend der Schluss, dass das magnetische Vektorpotential A in der Quantenmechanik (anders als in der klassischen Mechanik) eine gewisse physikalische Realität hat. Bei sorgfältiger Betrachtung erkennt man, dass diese Realität in einer eichinvarianten Version \mathcal{A} des (eichabhängigen) Vektorpotentials A steckt. Mathematisch gesprochen ist \mathcal{A} ein Zusammenhang auf einem **U(1)-Hauptfaserbündel** über dem Ortsraum D . Als solcher bestimmt \mathcal{A} eine kovariante Ableitung ∇ , die nach Wahl einer Eichung durch

$$\nabla = d - ieA/\hbar$$

ausgedrückt wird. Wie \mathcal{A} existiert diese kovariante Ableitung ∇ als eichinvariantes Objekt. Um das einzusehen und deutlich sichtbar zu machen, muss man aber die Vorstellung aufgeben, dass die Wellenfunktionen der Quantenmechanik komplexwertige Funktionen sind; tatsächlich sind sie **Schnitte** eines **komplexen Linienbündels**. (Übrigens ist die Bündel-Sichtweise mathematisch unumgänglich, wenn die Quantentheorie in Anwesenheit magnetischer Monopole formuliert werden soll.) Die Besonderheit beim Aharonov-Bohm-Effekt besteht darin, dass der Zusammenhang \mathcal{A} zwar **flach** ist (und somit die kovariante Ableitung ∇ verschwindende Krümmung $\nabla \wedge \nabla$ hat), aber dennoch **nicht-trivial** ist. Die Möglichkeit für “flach, aber dennoch nicht-trivial” wird dadurch geschaffen, dass der den Elektronen zugängliche Ortsraum $D \subset \mathbb{R}^3$ im Aharonov-Bohm-Effekt nicht einfach zusammenhängend ist. (Die sog. Fundamentalgruppe $\pi_1(D)$ ist nicht-trivial.)

7 Teilchen im Zentralpotential

Thema dieses Kapitels ist das Zweikörperproblem mit Zentralkräften. Dabei haben wir insbesondere die quantenmechanische Behandlung des Wasserstoffatoms im Auge. Als wichtige technische Voraussetzung benötigen wir ein Verständnis der Konsequenzen von Drehsymmetrie in der Quantenmechanik.

7.1 Kanonische Transformationen & unitäre Operatoren

Unter einer **kanonischen Transformation** des klassischen Phasenraums M mit symplektischer Form $\omega = dp \wedge dq$ (oder kanonischen Koordinaten q, p) versteht man eine Abbildung $f : M \rightarrow M$, welche ω ungeändert lässt:

$$f^* \omega = f^*(dp \wedge dq) := d(p \circ f) \wedge d(q \circ f) = \omega.$$

Beim Übergang zur Quantentheorie mit Hilbertraum \mathcal{H} werden kanonische Transformationen zu Operatoren $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit der Eigenschaft der Unitarität, also

$$\langle U\psi | U\varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle.$$

Die heuristische **Begründung** hierzu lautet wie folgt.

1. Kanonische Transformationen f erhalten die Poissonklammer:

$$\{q, p\} \circ f = \{q \circ f, p \circ f\}.$$

2. Die Poissonklammer bestimmt den Kommutator (siehe Bemerkung 2 von Abschnitt 2.1):

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \widehat{\{q, p\}} + \mathcal{O}(\hbar^2).$$

3. Der Kommutator ist invariant unter Ähnlichkeitstransformationen $\hat{q} \mapsto U\hat{q}U^{-1}$, $\hat{p} \mapsto U\hat{p}U^{-1}$.

4. Die Operatoren \hat{q} , \hat{p} bleiben selbstadjungiert, falls $U^\dagger = U^{-1}$. (Ende Heuristik.)

Wir geben jetzt einige wichtige **Beispiele** für kanonische Transformationen und die entsprechenden Operatoren in der Quantentheorie.

- Translationen im Ortsraum, $q \circ f_t = q + vt$, $p \circ f_t = p$, sind kanonische Transformationen. In der Quantenmechanik werden sie durch

$$U(f_t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}vt\hat{p}\right)$$

unitär dargestellt.

- Translationen im Impulsraum, $q \circ g_t = q$, $p \circ g_t = p + Kt$ sind ebenfalls kanonisch. Ihre quantenmechanische Darstellung ist

$$U(g_t) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}Kt\hat{q}\right).$$

Diese beiden Beispiele (Orts- und Impulstranslationen) kennen wir eigentlich schon, denn sie sind spezielle Elemente der Heisenberg-Gruppe, von der wir aus Abschnitt 4.2 wissen, dass (und wie) sie durch unitäre Operatoren dargestellt wird.

- Die kanonische Transformation $q \circ P = -q$, $p \circ P = -p$ der **Raumspiegelung** wird quantenmechanisch durch einen unitären Operator \hat{P} dargestellt. In der Wellenmechanik hat man

$$(\hat{P}\psi)(q) = \psi(-q).$$

- Unten werden wir ausführlich beschreiben, wie Drehungen, also Elemente der Drehgruppe $SO(3)$, in der Quantenmechanik als unitäre Operatoren wirken.

Warnung 1. Die klassische Operation T der **Zeitumkehr**, also $q \circ T = q$, $p \circ T = -p$, ist nicht kanonisch, denn $T^*(dp \wedge dq) = d(p \circ T) \wedge d(q \circ T) = -dp \wedge dq$. In der Quantenmechanik wird Zeitumkehr durch einen Operator $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ dargestellt, der komplex **anti-linear** und **anti-unitär** wirkt, d.h. für $a, b \in \mathbb{C}$ und $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\hat{T}(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = \bar{a}\hat{T}|\psi\rangle + \bar{b}\hat{T}|\phi\rangle, \quad \langle\psi|\phi\rangle = \overline{\langle\hat{T}\psi|\hat{T}\phi\rangle}.$$

In der Wellenmechanik für spinlose Teilchen ist \hat{T} einfach komplexe Konjugation: $(\hat{T}\psi)(q) = \overline{\psi(q)}$.

Warnung 2. Bekanntlich bilden die Raumzeit-Symmetrien autonomer nichtrelativistischer Systeme eine Gruppe, die sog. **Galilei-Gruppe**. Diese Gruppe (genauer: ihr zusammenhängender Teil G_0) wird von Drehungen und Translationen in Ort und Impuls erzeugt. Für jedes Paar von Galilei-Transformationen $g_1, g_2 \in G_0$ gilt

$$U(g_1g_2) = U(g_1)U(g_2).$$

In diesem Fall ist die Operation der Quantisierung $U : G_0 \rightarrow U(\mathcal{H})$ also eine Darstellung oder, anders ausgedrückt, ein Gruppen-Homomorphismus.

Nun bilden auch die kanonischen Transformationen des klassischen Phasenraums M eine Gruppe, **Symp**(M). Diese Gruppe ist unendlich-dimensional, also sehr viel größer als G_0 . Worauf hier hingewiesen werden soll, ist, dass die Quantisierungsabbildung $U : \text{Symp}(M) \rightarrow U(\mathcal{H})$ kein Homomorphismus ist (und auch keiner sein kann). Sei zum Beispiel ϕ^t der Phasenfluss eines autonomen Hamiltonschen Systems. Dann ist im allgemeinen $U(\phi^s \circ \phi^t) \neq U(\phi^s)U(\phi^t)$, es ist also nicht möglich, den quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator zu berechnen, indem man den die Quantisierungsabbildung auf den klassischen Phasenfluss anwendet.

7.2 Reduktion durch Symmetrien

Das **Noether-Theorem** der Hamiltonschen Mechanik besagt, dass es zu jeder Einparameter-Gruppe von Symmetrie-Transformationen ein Integral der Bewegung (also einen Erhaltungssatz) gibt und umgekehrt. Daher lässt sich in Anwesenheit von Symmetrien die Lösung klassischer Probleme vereinfachen, indem man die Gültigkeit von Erhaltungssätzen ausnutzt. In diesem Abschnitt wollen

wir lernen, welcher Nutzen aus der Existenz von Symmetrien (insbesondere von Drehinvarianz) für die Lösung der Schrödinger-Gleichung der Quantenmechanik gezogen werden kann.

Wir erinnern vorab daran, dass in Abschnitt 4.2 erklärt wurde, was unter einer irreduziblen G -Darstellung zu verstehen ist. Wir wissen auch schon, was es bedeutet, dass zwei Darstellungen zueinander äquivalent sind. Die Äquivalenzklasse aller äquivalenten Darstellungen heißt eine **Isomorphieklasse**. Für die folgende Aussage legen wir die Darstellung U einer Gruppe G auf einem Hilbertraum \mathcal{H} zugrunde.

Satz. Ist G kompakt und die Darstellung von G auf \mathcal{H} unitär, so lässt sich \mathcal{H} vollständig in orthogonale G -irreduzible Teilräume zerlegen:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda} V_{\lambda} \quad (\text{orthogonale Summe}).$$

Bemerkung. Für jedes Gruppenelement $g \in G$ und jeden Summanden V_{λ} gilt also $U(g)V_{\lambda} = V_{\lambda}$, und V_{λ} enthält keine eigentlichen G -invarianten Unterräume (\leftrightarrow Irreduzibilität).

Beispiel 1. Wir betrachten die Gruppe $G = \text{SO}(2)$, also Drehungen der Euklidischen Ebene, und beziehen uns auf das Beispiel von Abschnitt 4.2. Dort wurde bereits festgestellt, dass für jede ganze Zahl $m \in \mathbb{Z}$ die Abbildung

$$\mathcal{D}_m : \text{SO}(2) \rightarrow \text{U}(1) \subset \text{GL}(\mathbb{C}), \quad g^{\theta} \mapsto e^{im\theta},$$

eine irreduzible (unitäre) Darstellung von $\text{SO}(2)$ ist. Umgekehrt lässt sich zeigen, dass jede irreduzible Darstellung von $\text{SO}(2)$ äquivalent zu einer dieser Darstellungen ist. Die Isomorphieklassen irreduzibler Darstellungen von $\text{SO}(2)$ stehen also in Bijektion zu \mathbb{Z} .

Nun betrachten wir den Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(S^1)$ der quadrat-integrierbaren Funktionen auf dem Einheitskreis (oder dem Intervall $[0, 2\pi]$ mit periodischen Randbedingungen). Wir lassen die kompakte Gruppe $G = \text{SO}(2)$ auf \mathcal{H} durch

$$(U(g^{\theta})f)(\phi) = f(\phi - \theta)$$

wirken. Dies ist eine unitäre reduzierbare Darstellung von $\text{SO}(2)$. Sie enthält für jedes $m \in \mathbb{Z}$ den eindimensionalen Teilraum

$$V_m := \text{span}_{\mathbb{C}}(\phi \mapsto e^{im\phi})$$

als $\text{SO}(2)$ -irreduziblen Unterraum. Die vom obigen Satz behauptete Existenz einer vollständigen orthogonalen Zerlegung in $\text{SO}(2)$ -irreduzible Teilräume ist hier nichts weiter als ein Ergebnis der Theorie von **Fourier-Reihen**: jede Funktion $f \in L^2(S^1)$ lässt sich in eine Fourier-Reihe entwickeln:

$$f(\phi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} f_m e^{im\phi}.$$

Mit dem allgemeinen Begriff der Zerlegung von Räumen schreiben wir diesen Sachverhalt als

$$L^2(S^1) = \bigoplus_{m \in \mathbb{Z}} V_m.$$

Bemerkung. Dieses Beispiel ist insofern nicht repräsentativ, als jede irreduzible $SO(2)$ -Darstellung $g^\theta \mapsto e^{im\theta}$ genau “einmal” in $L^2(S^1)$ enthalten ist. Im allgemeinen Fall kann eine irreduzible G -Darstellung gar nicht, einmal, mehrmals oder sogar unendlich oft in \mathcal{H} enthalten sein. (Die Vielfachheit des Enthaltenseins nennt man die **Multiplizität**.)

Beispiel 2. Sei $G = \mathbb{Z}_2 = \{I, P\}$ die Gruppe mit Relationen $I^2 = I$, $IP = PI = P$ und $P^2 = I$. Diese Gruppe hat genau zwei inäquivalente irreduzible Darstellungen:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_+(I) &= 1, & \mathcal{D}_+(P) &= +1, \\ \mathcal{D}_-(I) &= 1, & \mathcal{D}_-(P) &= -1.\end{aligned}$$

Zur Illustration des obigen Satzes wählen wir jetzt \mathcal{H} als den Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ der quadratintegriblen Funktionen $\mathbb{R} \ni x \mapsto f(x) \in \mathbb{C}$ und betrachten die G -Darstellung

$$(U(I)f)(x) = f(x), \quad (U(P)f)(x) = f(-x).$$

Für jede Orthonormalbasis $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n, \dots\}$ von \mathcal{H} gilt

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} V_n, \quad V_n = \mathbb{C}\varphi_n.$$

Ist diese Basis so beschaffen, dass jede Basisfunktion entweder gerade oder ungerade ist, dann ist diese Orthogonalzerlegung gleichzeitig eine Zerlegung in G -irreduzible Teilräume. Zum Beispiel können wir $\{\varphi_n\}$ als eine Basis von Oszillatoreigenfunktionen mit Energien $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ wählen. Dann gilt

$$(U(P)\varphi_n)(x) = \varphi_n(-x) = (-1)^n \varphi_n(x),$$

also $U(P)\varphi_{2k} = \mathcal{D}_+(P)\varphi_{2k}$ und $U(P)\varphi_{2k+1} = \mathcal{D}_-(P)\varphi_{2k+1}$. Anders gesagt trägt $V_n = \mathbb{C}\varphi_n$ die triviale Darstellung \mathcal{D}_+ für gerades n und die nicht-triviale Darstellung \mathcal{D}_- für ungerades n . Beide irreduziblen G -Darstellungen, \mathcal{D}_+ und \mathcal{D}_- , kommen also in \mathcal{H} mit unendlicher Multiplizität vor.

7.2.1 Tensorprodukt

Für den Umgang mit Multiplizitäten ist der Begriff des *Tensorprodukts* hilfreich, wenn nicht überhaupt nötig. (Übrigens spielt die Operation des Tensorprodukts eine fundamentale Rolle in der Quantenmechanik zusammengesetzter Systeme, insbesondere von Mehrteilchensystemen. Wenn wir diesen Begriff hier einführen, dann ist das also eine Investition, die sich sicherlich auszahlen wird.) Der Kürze halber geben wir eine eher informelle Definition des Tensorprodukts.

Für zwei Mengen V und W kennt man das direkte Produkt $V \times W$; das ist die Menge aller Paare (v, w) mit $v \in V$ und $w \in W$. Im Sonderfall, dass V und W Vektorräume über \mathbb{K} sind ($\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$), hat man die Möglichkeit, $V \times W$ so zu modifizieren und mit zusätzlicher Struktur auszustatten, dass wieder ein Vektorraum über \mathbb{K} , das sog. **Tensorprodukt** $V \otimes W \equiv V \otimes_{\mathbb{K}} W$, entsteht. Es ist so gebaut, dass sich die Dimensionen multiplizieren: $\dim(V \otimes W) = (\dim V)(\dim W)$. Die Modifikation gegenüber dem direkten Produkt besteht darin, dass Skalare im Tensorprodukt verschoben

werden können, also

$$z \cdot (v \otimes w) := (zv) \otimes w \equiv v \otimes (zw) \quad (v \in V, w \in W, z \in \mathbb{K}).$$

Außerdem ist das Tensorprodukt distributiv über der Vektoraddition:

$$\begin{aligned} (v_1 + v_2) \otimes w &= v_1 \otimes w + v_2 \otimes w, \\ v \otimes (w_1 + w_2) &= v \otimes w_1 + v \otimes w_2. \end{aligned}$$

Beispiel 1. Seien V, W Vektorräume über \mathbb{K} . Der Vektorraum $\text{Hom}(V, W)$ aller \mathbb{K} -linearen Abbildungen $L : V \rightarrow W$ ist isomorph zu $W \otimes V^*$, also dem Tensorprodukt von W mit dem Dualraum V^* (d.h. dem Vektorraum der \mathbb{K} -linearen Abbildungen $f : V \rightarrow \mathbb{K}$). Ist $\{e_i\}$ eine Basis von V und $\{f_i\}$ die zugehörige Dualbasis von V^* , gilt also $f_i(e_j) = \delta_{ij}$, so wird der Isomorphismus $I : \text{Hom}(V, W) \rightarrow W \otimes V^*$ ausgedrückt durch

$$I(L) = \sum_i (Le_i) \otimes f_i.$$

Unter Physikern umschreibt man $\text{Hom}(V, W) \simeq W \otimes V^*$ oft mit dem Spruch, dass jede Matrix als Summe “dyadischer” Produkte von Spaltenvektoren mit Zeilenvektoren geschrieben werden kann.

Beispiel 2. Für zwei normierte Vektorräume V und W gilt $L^2(V \oplus W) = L^2(V) \otimes L^2(W)$. Insbesondere haben wir $L^2(\mathbb{R}^2) = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$. Hiermit ist gesagt, dass jede quadrat-integrierte Funktion F auf \mathbb{R}^2 als (unendliche) Doppelsumme

$$F(x, y) = \sum_{i,j} F_{ij} \alpha_i(x) \beta_j(y)$$

von quadrat-integrierten Funktionen $\alpha_i(x)$ und $\beta_j(y)$ geschrieben werden kann. Sind $\{\alpha_i\}$ und $\{\beta_j\}$ Orthonormalbasen, so erhält man die Entwicklungskoeffizienten F_{ij} durch Integration:

$$F_{ij} = \int_{\mathbb{R}^2} F(x, y) \alpha_i(x) \beta_j(y) dy dx.$$

Beispiel 3. Für einen \mathbb{K} -Vektorraum V sei $W = V \oplus V \oplus \dots \oplus V$ die direkte Summe von m Kopien von V . Wir definieren eine lineare Abbildung $I : \mathbb{K}^m \otimes V \rightarrow W$ durch

$$I((k_1, k_2, \dots, k_m) \otimes v) := k_1 v \oplus k_2 v \oplus \dots \oplus k_m v$$

und Linearität. Diese Abbildung I ist ein Isomorphismus. Folglich haben wir $W \simeq \mathbb{K}^m \otimes V$. \square

Lineare Abbildungen auf Tensorprodukten. Zu jedem Vektorraum V hat man den Vektorraum $\text{End}(V)$ der linearen Abbildungen $L : V \rightarrow V$. Da das Tensorprodukt $V \otimes W$ zweier Vektorräume V, W wieder ein Vektorraum ist, existiert auch $\text{End}(V \otimes W)$. Dieser Vektorraum kann wiederum als Tensorprodukt aufgefasst werden:

$$\text{End}(V \otimes W) \simeq \text{End}(V) \otimes \text{End}(W).$$

In der Tat existiert eine natürliche Abbildung $I : \text{End}(V) \otimes \text{End}(W) \rightarrow \text{End}(V \otimes W)$ durch

$$I(A \otimes B)(v \otimes w) := (Av) \otimes (Bw).$$

Diese lineare Abbildung I ist injektiv (Beweis als Übungsaufgabe). Wegen $\dim \text{End}(V \otimes W) = (\dim V)^2 (\dim W)^2 = \dim (\text{End}(V) \otimes \text{End}(W))$ ist sie bijektiv und somit ein Isomorphismus.

7.2.2 Zerlegung nach isotypischen Komponenten

Wir bringen jetzt den Satz über die Existenz einer orthogonalen Zerlegung $\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda} V_{\lambda}$ nach G -irreduziblen Teilräumen V_{λ} in eine verbesserte Form. Zu diesem Zweck stellen wir die orthogonale Summe dergestalt um, dass wir alle irreduziblen Darstellungsräume V_{λ} derselben Isomorphieklasse λ (also alle Darstellungen, die zueinander äquivalent sind) mit einem repräsentativen Raum R_{λ} identifizieren (ggfls. durch Verwendung von Äquivalenztransformationen) und dann in einem Unterraum W_{λ} zusammenfassen:

$$R_{\lambda} \oplus R_{\lambda} \oplus \dots \oplus R_{\lambda} \text{ (} m_{\lambda} \text{ Summanden)} =: W_{\lambda} = \mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda}.$$

Wie schon gesagt nennt man die Zahl m_{λ} die Multiplizität der Darstellung λ (genauer: der Isomorphieklasse λ von G -Darstellungen). Der Raum $W_{\lambda} = \mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda}$ heißt die **isotypische** Komponente in \mathcal{H} zur Isomorphieklasse λ der irreduziblen Darstellung R_{λ} .

Beispiel 1. Wir greifen das Beispiel 2 von Abschnitt 7.2, nämlich $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ und $G = \{I, P\}$, nochmals auf und schreiben die orthogonale Zerlegung jetzt in der Form

$$\mathcal{H} = W_{+} \oplus W_{-}, \quad W_{+} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathbb{C}\varphi_{2n}, \quad W_{-} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathbb{C}\varphi_{2n+1}.$$

Der Vektorraum W_{+} (bzw. W_{-}) ist die isotypische Komponente in \mathcal{H} zur Isomorphieklasse der G -Darstellung \mathcal{D}_{+} (bzw. \mathcal{D}_{-}). Offensichtlich ist W_{+} (bzw. W_{-}) ganz einfach der Unterraum aller geraden (bzw. ungeraden) Funktionen in $L^2(\mathbb{R})$. \square

Mit der eingeführten Sprechweise können wir jetzt den obigen Satz verfeinern und genau auf den Punkt bringen.

Satz. Jede Darstellung $U : G \rightarrow U(\mathcal{H})$ einer kompakten Gruppe G lässt sich vollständig nach isotypischen Komponenten zerlegen:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \bigoplus_{\lambda} W_{\lambda} = \bigoplus_{\lambda} (\mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda}), \\ U(g) &= \bigoplus_{\lambda} U_{\lambda}(g), \quad U_{\lambda}(g) = \mathbf{1}_{m_{\lambda}} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g) \quad (g \in G). \end{aligned}$$

Bemerkungen. (i) Die Multiplizitäten m_{λ} sind möglicherweise unendlich. (ii) Nachdem wir alle in W_{λ} enthaltenen Kopien von Darstellungen der Isomorphieklasse λ in die repräsentative Standardform $\mathcal{D}_{\lambda} : G \rightarrow U(R_{\lambda})$ gebracht haben, wirkt $U(g)$ auf $W_{\lambda} = \mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda} = R_{\lambda} \oplus R_{\lambda} \oplus \dots \oplus R_{\lambda}$ in der angegebenen simplen Weise, nämlich durch $\mathbf{1}_{m_{\lambda}} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g) = \mathcal{D}_{\lambda}(g) \oplus \mathcal{D}_{\lambda}(g) \oplus \dots \oplus \mathcal{D}_{\lambda}(g)$.

Beispiel 2. Wir variieren das Beispiel 1 von Abschnitt 7.2, indem wir den Hilbertraum $L^2(S^1)$ durch $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^2)$ ersetzen und $G = \text{SO}(2)$ auf \mathcal{H} durch

$$(U(g^{\theta})f)(x, y) = f(x \cos \theta - y \sin \theta, x \sin \theta + y \cos \theta)$$

darstellen. Es geht also um die Wirkung der Drehgruppe $\text{SO}(2)$ auf quadrat-integrale Funktionen $f(x, y)$ in der Euklidischen Ebene \mathbb{R}^2 . Zur Zerlegung dieser $\text{SO}(2)$ -Darstellung verwenden wir

Polarkoordinaten $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$ und entwickeln in eine Fourier-Reihe:

$$f(x, y) = f(r \cos \phi, r \sin \phi) \equiv F(r, \phi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} F_m(r) e^{im\phi}.$$

In der allgemeinen Sprache des obigen Satzes lässt sich diese Fourier-Zerlegung wie folgt auffassen:

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^2) = \bigoplus_{m \in \mathbb{Z}} W_m, \quad W_m = L^2(\mathbb{R}_+) \otimes R_m, \quad R_m = \mathbb{C} f_m, \quad f_m = e^{im\phi}.$$

Die isotypische Komponente $W_m \subset \mathcal{H}$ wird durch die Fourier-Komponenten $F_m(r) e^{im\phi}$ aufgespannt. Jeder Raum $W_m = L^2(\mathbb{R}_+) \otimes R_m \simeq L^2(\mathbb{R}_+)$ ist unendlich-dimensional. Der Multiplizitätsraum $L^2(\mathbb{R}_+)$ (= " \mathbb{C}^{m_λ} " mit $m_\lambda = \infty$) ist wegen $dx dy = r dr d\phi$ mit dem Skalarprodukt

$$(F^{(1)}, F^{(2)}) = \int_0^\infty \overline{F^{(1)}(r)} F^{(2)}(r) r dr$$

ausgestattet. Die $SO(2)$ -Darstellung in Polarkoordinaten ist

$$(U(g^\theta) f)(x, y) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} F_m(r) e^{im(\phi+\theta)}.$$

$U(g^\theta)$ wirkt also in W_m wie die Identität auf den Faktor $L^2(\mathbb{R}_+)$ und wie $\mathcal{D}_m(g^\theta) \equiv e^{im\theta}$ auf den irreduziblen Faktor R_m :

$$U(g) = \bigoplus_{m \in \mathbb{Z}} U_m(g), \quad U_m(g) = \mathbf{1} \otimes \mathcal{D}_m(g).$$

Die Zahl m hat die physikalische Bedeutung von **Drehimpuls** (gemessen in Einheiten von \hbar).

7.2.3 Blockdiagonalisierung

Wir kommen jetzt zum eigentlichen Ziel unserer Anstrengungen, nämlich der Tatsache, dass ein Hamiltonoperator mit Symmetrien (vom hier betrachteten Typ) in Blöcke zerfällt.

Satz. Die Darstellung $U : G \rightarrow U(\mathcal{H})$ einer kompakten Gruppe G sei wie zuvor durch

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda} W_{\lambda} = \bigoplus_{\lambda} (\mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda}), \quad U(g) = \bigoplus_{\lambda} (\mathbf{1}_{m_{\lambda}} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g))$$

nach isotypischen Komponenten zerlegt. Vertauscht in dieser Situation ein linearer Operator $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit der G -Wirkung, gilt also

$$\forall g \in G : \quad U(g)L = LU(g),$$

dann zerfällt L bezüglich der Zerlegung nach isotypischen Komponenten wie folgt:

$$L = \bigoplus_{\lambda} L_{\lambda}, \quad L_{\lambda} = \ell_{\lambda} \otimes \mathbf{1}_{R_{\lambda}}.$$

Bemerkung 1. L zerfällt also erstens in **Blöcke** (mit genau 1 Block pro isotypischer Komponente), und zweitens wirkt L in jedem Teilraum $W_{\lambda} = \mathbb{C}^{m_{\lambda}} \otimes R_{\lambda}$ wie ein Skalar auf dem rechten Faktor.

Bemerkung 2. Man erkennt sofort, dass die geforderte Vertauschungsrelation $U(g)L = LU(g)$ für Operatoren L von der behaupteten Form erfüllt ist:

$$\begin{aligned} U(g)L &= \bigoplus_{\lambda} (\mathbf{1}_{\mathcal{C}^{m_{\lambda}}} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g)) (\ell_{\lambda} \otimes \mathbf{1}_{R_{\lambda}}) = \bigoplus_{\lambda} (\ell_{\lambda} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g)) \\ &= \bigoplus_{\lambda} (\ell_{\lambda} \otimes \mathbf{1}_{R_{\lambda}}) (\mathbf{1}_{\mathcal{C}^{m_{\lambda}}} \otimes \mathcal{D}_{\lambda}(g)) = LU(g). \end{aligned}$$

Um den Satz zu beweisen, hat man den Nachweis zu führen, dass die angegebene Blockform von L nicht nur hinreichend, sondern auch notwendig für die Vertauschungseigenschaft ist. Das Hauptwerkzeug hierfür ist das schon in Abschnitt 4.6 erwähnte Schur'sche Lemma.

Bemerkung 3. Wir planen natürlich, die Aussage des Satzes auf den Fall eines Hamiltonoperators $L = \hat{H}$ mit Symmetriegruppe G anzuwenden. In diesem Fall gibt es möglicherweise Probleme mit dem Definitionsbereich von \hat{H} . Diese lassen sich aber umgehen, indem man anstelle von \hat{H} die Familie der Zeitentwicklungsoperatoren $\exp(-it\hat{H}/\hbar)$ betrachtet.

Beispiel 1. Wir betrachten ein weiteres Mal $G = \{I, P\}$ und realisieren P als **Spiegelung** auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. Die isotypischen Komponenten in \mathcal{H} bzgl. G sind bekanntlich die Teilräume W_{\pm} der geraden bzw. ungeraden Funktionen: $\mathcal{H} = W_{+} \oplus W_{-}$. Für jeden unter Spiegelung invarianten Hamiltonoperator $\hat{H} = U(P)^{-1}\hat{H}U(P)$ gilt nun nach obigem Satz $\hat{H}W_{+} \subset W_{+}$ und $\hat{H}W_{-} \subset W_{-}$. Der Hamiltonoperator zerfällt also in zwei Blöcke, und es finden, wie man sagt, keine Übergänge zwischen Zuständen verschiedener **Parität** statt. Diese einfache Tatsache lässt sich (auch ohne den obigen Satz) direkt zeigen. Wir verwenden die Dirac-Notation und wählen

$$|\psi_{\pm}\rangle \in W_{\pm}, \quad U(P)|\psi_{\pm}\rangle = \pm|\psi_{\pm}\rangle, \quad \langle\psi_{\pm}|U(P)^{-1} = \pm\langle\psi_{\pm}|.$$

Hiermit folgt sofort

$$\langle\psi_{-}|\hat{H}|\psi_{+}\rangle = \langle\psi_{-}|U(P)^{-1}\hat{H}U(P)|\psi_{+}\rangle = -\langle\psi_{-}|\hat{H}|\psi_{+}\rangle = 0.$$

Beispiel 2. Wir greifen auch unser anderes Beispiel nochmals auf, nämlich die Darstellung von $G = \text{SO}(2)$ auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^2)$ durch Drehungen. Wir wissen schon $\mathcal{H} = \bigoplus_m W_m$ mit $m \in \mathbb{Z}$ der Drehimpulsquantenzahl. Für $|\psi_m\rangle \in W_m$ und $g^{\theta} \in \text{SO}(2)$ gilt

$$U(g^{\theta})|\psi_m\rangle = \mathcal{D}_m(g^{\theta})|\psi_m\rangle = e^{im\theta}|\psi_m\rangle.$$

Aus der Drehinvarianz von \hat{H} , also $\hat{H} = U(g^{-\theta})\hat{H}U(g^{\theta})$, folgt:

$$\begin{aligned} \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle &= \langle\psi_m|U(g^{-\theta})\hat{H}U(g^{\theta})|\psi_n\rangle \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \langle\psi_m|U(g^{-\theta})\hat{H}U(g^{\theta})|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(m-n)\theta} = 0 \end{aligned}$$

falls $m \neq n$. Der Hamiltonoperator zerfällt also Blöcke (1 Block für jeden Wert $m \in \mathbb{Z}$) und es gibt, wie man sagt, keine Übergänge zwischen **Sektoren** mit verschiedenem Drehimpuls.

In der in diesem Kapitel entwickelten Sprache schreiben wir

$$\hat{H} = \bigoplus_{m \in \mathbb{Z}} H_m, \quad H_m = h_m \otimes \mathbf{1}_{R_m} \equiv h_m.$$

(Wegen $R_m \simeq \mathbb{C}$ ist der rechte Faktor hier überflüssig.) Ein $SO(2)$ -invarianter Hamiltonoperator ist z.B.

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(\sqrt{x^2 + y^2}).$$

In Termen der Radialkoordinate $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ sieht der Block h_m zur isotypischen Komponente des Drehimpulses m wie folgt aus:

$$h_m = \frac{\hbar^2}{2M} \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \circ r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m^2}{r^2} \right) + V(r).$$

(Begründung später.)

7.3 Darstellungen von $SO(3)$

Für zentralsymmetrische Systeme (wie z.B. dem Wasserstoffatom) ist die **Drehgruppe** $G = SO(3)$ die Symmetriegruppe. Unser nächstes Ziel ist es deshalb, alle irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ aufzufinden und dann den Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ nach isotypischen Komponenten von $SO(3)$ (d.h. nach Drehimpuls-Sektoren) zu zerlegen.

Wir setzen hier als bekannt voraus (z.B. aus der klassischen Mechanik, insbesondere der Theorie starrer Körper), dass jede eigentliche Drehung $R \in SO(3)$ im dreidimensionalen Euklidischen (Vektor-)Raum eine lineare Abbildung $R : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist, die durch die Angabe einer gerichteten Drehachse (oder eines Einheitsvektors e) und einen Drehwinkel φ unter Zuhilfenahme des Vektorprodukts (und somit der **Rechte-Hand-Regel**) bestimmt wird. Wir bezeichnen diese Drehung mit $R_{e,\varphi}$ und definieren sie in Formeln durch

$$R_{e,\varphi} v = e \langle e, v \rangle + (v - e \langle e, v \rangle) \cos \varphi + (e \times v) \sin \varphi.$$

Hier steht \times für das Vektorprodukt (eine dreidimensionale Besonderheit), und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ für das Euklidische Skalarprodukt. Die Operation $v \mapsto e \langle e, v \rangle$ ist die Orthogonalprojektion auf die Drehachse.

Definition. Unter einer “infinitesimalen” Drehung \mathcal{L}_e (besser: dem **Generator** \mathcal{L}_e von Drehungen um die Drehachse e) verstehen wir die Ableitung

$$\mathcal{L}_e := \left. \frac{d}{d\varphi} R_{e,\varphi} \right|_{\varphi=0}.$$

Jedem Einheitsvektor $e \in \mathbb{R}^3$ wird somit eine lineare Abbildung $\mathcal{L}_e : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ zugeordnet.

Bemerkung. Differentialgeometrisch gesehen sind infinitesimale Drehungen Tangentialvektoren der Mannigfaltigkeit $SO(3)$ im neutralen Element ($\varphi = 0$) der Gruppe.

Durch Differenzieren der obigen Formel für $R_{e,\varphi}$ erhält man

$$\mathcal{L}_e v = e \times v.$$

Die **Lie-Klammer** zweier Generatoren erklärt man als den “Grad von Nichtvertauschbarkeit” der zugehörigen infinitesimalen Drehungen:

$$[\mathcal{L}_{e_1}, \mathcal{L}_{e_2}] := \left. \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_2} R_{e_1, \varphi_1} R_{e_2, \varphi_2} R_{e_1, \varphi_1}^{-1} R_{e_2, \varphi_2}^{-1} \right|_{\varphi_1 = \varphi_2 = 0}.$$

Kurze Rechnung zeigt $[\mathcal{L}_{e_1}, \mathcal{L}_{e_2}] = \mathcal{L}_{e_1}\mathcal{L}_{e_2} - \mathcal{L}_{e_2}\mathcal{L}_{e_1}$ (es ist also stimmig, für die Lie-Klammer das gleiche Symbol wie für den **Kommutator** zu verwenden) und somit

$$[\mathcal{L}_{e_1}, \mathcal{L}_{e_2}]v = e_1 \times (e_2 \times v) - e_2 \times (e_1 \times v).$$

Dies lässt sich weiter ausrechnen und vereinfachen:

$$[\mathcal{L}_{e_1}, \mathcal{L}_{e_2}]v = e_2 \langle e_1, v \rangle - v \langle e_1, e_2 \rangle - e_1 \langle e_2, v \rangle + v \langle e_2, e_1 \rangle = -v \times (e_1 \times e_2) = (e_1 \times e_2) \times v.$$

Es gilt also $[\mathcal{L}_{e_1}, \mathcal{L}_{e_2}] = \mathcal{L}_{e_1 \times e_2}$. Für beliebige Vektoren $u \in \mathbb{R}^3$ setzen wir $\mathcal{L}_u := |u|\mathcal{L}_{u/|u|}$, falls $|u| \neq 0$, und $\mathcal{L}_u \equiv \mathbf{0}$, falls $|u| = 0$. Wir haben dann

$$\mathcal{L}_u v = u \times v \quad \text{und} \quad [\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_v] = \mathcal{L}_{u \times v}.$$

Die Generatoren \mathcal{L}_u bilden einen reellen Vektorraum vermöge

$$\mathcal{L}_u + \mathcal{L}_v = \mathcal{L}_{u+v}, \quad t\mathcal{L}_u = \mathcal{L}_{tu} \quad (t \in \mathbb{R}).$$

Definition. Der mit der Lie-Klammer $[\cdot, \cdot]$ ausgestattete Vektorraum von Generatoren \mathcal{L}_u für $u \in \mathbb{R}^3$ heißt die **Lie-Algebra** $\mathfrak{so}(3)$ der Drehgruppe $SO(3)$. Neben der Schiefsymmetrie

$$[\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_v] = -[\mathcal{L}_v, \mathcal{L}_u]$$

der Lie-Klammer gilt die sogenannte **Jacobi-Identität** (Verifikation durch Nachrechnen!)

$$[\mathcal{L}_u, [\mathcal{L}_v, \mathcal{L}_w]] = [[\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_v], \mathcal{L}_w] + [\mathcal{L}_v, [\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_w]].$$

Bemerkung. Über die Bijektion $u \leftrightarrow \mathcal{L}_u$ ist $\mathfrak{so}(3)$ als Vektorraum isomorph zu \mathbb{R}^3 . Wenn wir \mathbb{R}^3 mit dem Vektorprodukt als Lie-Klammer ausstatten [und somit zu einer Lie-Algebra (\mathbb{R}^3, \times) machen], dann ist die Abbildung $u \mapsto \mathcal{L}_u$ wegen $[\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_v] = \mathcal{L}_{u \times v}$ sogar ein Isomorphismus von Lie-Algebren. Die Jacobi-Identität für die Lie-Algebra (\mathbb{R}^3, \times) quantifiziert die Nicht-Assoziativität des Vektorprodukts:

$$u \times (v \times w) = (u \times v) \times w + v \times (u \times w).$$

Notation. Für eine **rechtshändige** Orthonormalbasis e_x, e_y, e_z von \mathbb{R}^3 schreiben wir verkürzt $\mathcal{L}_x \equiv \mathcal{L}_{e_x}$, $\mathcal{L}_y \equiv \mathcal{L}_{e_y}$, $\mathcal{L}_z \equiv \mathcal{L}_{e_z}$ und erhalten

$$[\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y] = \mathcal{L}_z \quad (\& \text{ zyklisch}).$$

Sei nun \mathcal{H} ein komplexer Vektorraum (evtl. ein komplexer Hilbertraum) und $\mathcal{D} : SO(3) \rightarrow GL(\mathcal{H})$ eine Darstellung der Drehgruppe auf \mathcal{H} . Wir bilden das Differential

$$\mathcal{D}_*(\mathcal{L}_e) := \left. \frac{d}{d\varphi} \mathcal{D}(R_{e,\varphi}) \right|_{\varphi=0}$$

und setzen wieder linear fort: $\mathcal{D}_*(\mathcal{L}_u) := |u|\mathcal{D}_*(\mathcal{L}_{u/|u|})$. Per Konstruktion ist dann \mathcal{D}_* automatisch eine **Darstellung** der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$, d.h. es gilt die Relation (die Herleitung aus der Darstellungseigenschaft wird als Übungsaufgabe empfohlen!)

$$\mathcal{D}_*([\mathcal{L}_u, \mathcal{L}_v]) = [\mathcal{D}_*(\mathcal{L}_u), \mathcal{D}_*(\mathcal{L}_v)].$$

(Gleiches gilt übrigens für Darstellungen jeder Lie-Gruppe und die zugehörige Lie-Algebra.)

Jeder Darstellung \mathcal{D} der Lie-Gruppe $\text{SO}(3)$ ist also eine Darstellung \mathcal{D}_* der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ zugeordnet. Wir können daher nach Darstellungen von $\text{SO}(3)$ suchen, indem wir zunächst einmal nach Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$ suchen. Die zweite Aufgabe ist leichter als die erste, und sie hat die folgende Lösung. Wir betrachten **Matrizen** der Dimension $(n+1) \times (n+1)$:

$$\widehat{\mathcal{L}}_z = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} n & 0 & 0 & & & \\ 0 & n-2 & 0 & & & \\ 0 & 0 & n-4 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & -n+2 & 0 \\ & & & & 0 & -n \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathcal{L}}_x = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1 \cdot n} & 0 & & & \\ \sqrt{1 \cdot n} & 0 & \sqrt{2(n-1)} & & & \\ 0 & \sqrt{2(n-1)} & 0 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 0 & \sqrt{n \cdot 1} \\ & & & & \sqrt{n \cdot 1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathcal{L}}_y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1 \cdot n} & 0 & & & \\ i\sqrt{1 \cdot n} & 0 & -i\sqrt{2(n-1)} & & & \\ 0 & i\sqrt{2(n-1)} & 0 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 0 & -i\sqrt{n \cdot 1} \\ & & & & i\sqrt{n \cdot 1} & 0 \end{pmatrix}.$$

Ohne Mühe rechnet man nach, dass sie für jedes $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ den Vertauschungsrelationen

$$[\widehat{\mathcal{L}}_x, \widehat{\mathcal{L}}_y] = \widehat{\mathcal{L}}_z \quad (\& \text{ zyklisch})$$

genügen, also die Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ darstellen. (Natürlich wird die Zuordnung $\mathcal{L}_k \mapsto \widehat{\mathcal{L}}_k$ für $k = x, y, z$ wieder linear fortgesetzt durch $\widehat{\mathcal{L}}_u := u_x \widehat{\mathcal{L}}_x + u_y \widehat{\mathcal{L}}_y + u_z \widehat{\mathcal{L}}_z$ für $u = u_x e_x + u_y e_y + u_z e_z$.) Durch Inspektion der Matrizen $\widehat{\mathcal{L}}_{\pm} := \widehat{\mathcal{L}}_x \pm i\widehat{\mathcal{L}}_y$ sieht man, dass keine nicht-trivialen invarianten Teilräume existieren. Die obigen Darstellungen sind also für jedes $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ irreduzibel. Tatsächlich haben wir hiermit schon alle irreduziblen Darstellungen (bis auf Äquivalenz) von $\mathfrak{so}(3)$ zur Hand (ohne Beweis).

Aufgabe. Zeige, dass sich die Matrizen $\widehat{\mathcal{L}}_x, \widehat{\mathcal{L}}_y, \widehat{\mathcal{L}}_z$ für $n = 1$ per unitärer Ähnlichkeitstransformation in die **fundamentale** 3×3 Form

$$\mathcal{L}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

bringen lassen. \square

Jetzt schreiben wir $\widehat{\mathcal{L}}_u \equiv \mathcal{D}_*^{(n)}(\mathcal{L}_u)$ und fragen, ob sich aus $\mathcal{D}_*^{(n)} : \mathfrak{so}(3) \rightarrow \text{End}(\mathbb{C}^{n+1})$ eine Darstellung $\mathcal{D}^{(n)} : \text{SO}(3) \rightarrow \text{GL}(\mathbb{C}^{n+1})$ konstruieren lässt. Für den Fall von Drehungen um die z -Achse sehen wir sofort, dass

$$\mathcal{D}^{(n)}(R_{e_z, \varphi}) = \text{diag} \left(e^{-\frac{i}{2}n\varphi}, e^{-\frac{i}{2}(n-2)\varphi}, \dots, e^{+\frac{i}{2}n\varphi} \right)$$

das vorgegebene Differential

$$\widehat{\mathcal{L}}_z \equiv \mathcal{D}_*^{(n)}(\mathcal{L}_z) = \text{diag} \left(-\frac{i}{2}n, -\frac{i}{2}(n-2), \dots, +\frac{i}{2}n \right)$$

hat. Bei Drehung um den Drehwinkel $\varphi = 2\pi$ erhalten wir

$$\mathcal{D}^{(n)}(R_{e_z, \varphi}) \Big|_{\varphi=2\pi} = (-1)^n \mathbf{1}.$$

Nun ist aber $R_{e_z, \varphi=2\pi} = \mathbf{1}$, und wir sehen, dass das Einselement in $\text{SO}(3)$ nur für geradzahliges n durch das Einselement in $\text{GL}(\mathbb{C}^{n+1})$ dargestellt wird. Ungeradzahlige n sind also für unsere Zwecke unbrauchbar. (Trotzdem wird der Fall $n = 1$ in der Theorie des **Elektronenspins** auftauchen.)

Der Vergleich von

$$\frac{d}{d\varphi} \mathcal{D}(R_{e, \varphi}) = \frac{d}{d\varphi'} \mathcal{D}(R_{e, \varphi+\varphi'}) \Big|_{\varphi'=0} = \mathcal{D}(R_{e, \varphi}) \frac{d}{d\varphi'} \mathcal{D}(R_{e, \varphi'}) \Big|_{\varphi'=0} = \mathcal{D}(R_{e, \varphi}) \mathcal{D}_*(\mathcal{L}_e)$$

mit

$$\frac{d}{d\varphi} e^{\varphi A} = \frac{d}{d\varphi'} e^{(\varphi+\varphi')A} \Big|_{\varphi'=0} = e^{\varphi A} \frac{d}{d\varphi'} e^{\varphi' A} \Big|_{\varphi'=0} = e^{\varphi A} A$$

führt zur nächsten Aussage.

Satz. Für jeden Wert $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ist die Abbildung

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(2\ell)} \equiv \mathcal{R}^{(\ell)} : \quad \text{SO}(3) &\rightarrow \text{GL}(\mathbb{C}^{2\ell+1}), \\ R_{e, \varphi} &\mapsto \exp(\varphi \mathcal{D}_*^{(2\ell)}(\mathcal{L}_e)), \end{aligned}$$

eine $(2\ell+1)$ -dimensionale, irreduzible, unitäre Darstellung der Drehgruppe $\text{SO}(3)$. Jede irreduzible Darstellung von $\text{SO}(3)$ ist äquivalent zu einer der Darstellungen $\mathcal{R}^{(\ell)}$ ($\ell = 0, 1, 2, \dots$).

Bemerkung. Die Unitarität der Darstellung $\mathcal{R}^{(\ell)}$ folgt sofort aus $(e^A)^\dagger = e^{A^\dagger} = e^{-A}$ für $A^\dagger = -A$ und der Tatsache, dass die Matrizen $\mathcal{D}_*^{(\ell)}(\mathcal{L}_u)$ schief-Hermitesch sind. \square

Durch einfaches Nachrechnen verifiziert man (für $\mathcal{R}_*^{(\ell)} \equiv \mathcal{D}_*^{(2\ell)}$)

$$\sum_{k=x,y,z} \mathcal{R}_*^{(\ell)}(\mathcal{L}_k)^2 = -\ell(\ell+1) \mathbf{1}.$$

Der strukturelle Beweis dieser Eigenschaft beginnt mit der Beobachtung dass $C := \sum_k \mathcal{L}_k^2$ (physikalisch gesprochen: das **Quadrat des Drehimpulses**; siehe unten) ein Skalar ist:

$$Cv = \left(\sum_k \mathcal{L}_k^2 \right) v = \sum_k e_k \times (e_k \times v) = \sum_k (e_k \langle e_k, v \rangle - v \langle e_k, e_k \rangle) = -2v.$$

Es folgt, dass $C = \sum_k \mathcal{L}_k^2$ mit jedem Generator $\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y, \mathcal{L}_z$ vertauscht, was sich wegen der Darstellungseigenschaft auf $C^{(\ell)} = \sum_k \mathcal{R}_*^{(\ell)}(\mathcal{L}_k)^2$ überträgt. Da die Darstellung $\mathcal{R}_*^{(\ell)}$ irreduzibel ist, muss $C^{(\ell)}$ ein Vielfaches der Identität sein (\leftarrow Schur'sches Lemma). Größen mit der Eigenschaft, dass sie mit allen Generatoren einer Lie-Algebra \mathfrak{g} vertauschen, heißen **Casimir-Invarianten** von \mathfrak{g} .

Mitteilung. Dass $\mathfrak{so}(3)$ Darstellungen hat, die nicht zu Darstellungen von $\text{SO}(3)$ integrieren (gemeint sind die Darstellungen zu ungeradem n), hat letztlich einen topologischen Grund: $\text{SO}(3)$ ist nicht einfach zusammenhängend, sondern hat Fundamentalgruppe $\pi_1(\text{SO}(3)) = \mathbb{Z}_2$.

7.4 Zerlegung von $L^2(\mathbb{R}^3)$

$SO(3)$ wirkt auf \mathbb{R}^3 durch Drehungen $v \mapsto gv$ ($g \in SO(3)$). Eine unitäre Darstellung auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ bekommen wir in der üblichen Weise durch

$$(U(g)\psi)(v) := \psi(g^{-1}v).$$

Aufgabe. Deduziere aus dieser Definition die Ausdrücke (in kartesischen Koordinaten x, y, z)

$$U_*(\mathcal{L}_z) = y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \quad (\& \text{zyklisch}). \quad \square$$

Es besteht eine Beziehung zwischen den Generatoren $U_*(\mathcal{L}_e)$ von Drehungen und dem quantenmechanischen **Drehimpuls** zur Drehachse e . In Analogie zum quantenmechanischen Impuls als Generator von Translationen im Ortsraum (siehe Abschnitt 7.1) definiert man den Drehimpulsoperator \widehat{L}_e zur Drehachse e durch

$$U(R_{e,\omega t}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega t \widehat{L}_e\right).$$

Hierbei hat t die Bedeutung von Zeit und ω ist die **Rotationsfrequenz**. Aus dem Vergleich dieser Definition mit obigem Ausdruck für $U_*(\mathcal{L}_e)$ liest man ab:

$$\widehat{L}_e = i\hbar U_*(\mathcal{L}_e).$$

Die Drehimpulsoperatoren \widehat{L}_e sind selbst-adjungiert, $\widehat{L}_e^\dagger = \widehat{L}_e$, bzgl. des Hermiteschen Skalarprodukts von $L^2(\mathbb{R}^3)$. Sie sind der quantenmechanische Ausdruck für den Drehimpuls als physikalische Observable. Der Operator für das Quadrat des Drehimpulsvektors ist

$$\sum_{k=x,y,z} \widehat{L}_k^2 = -\hbar^2 \sum_{k=x,y,z} U_*(\mathcal{L}_k)^2.$$

Nach der Aussage des Satzes von Abschnitt 7.2.2 existiert eine Zerlegung von $L^2(\mathbb{R}^3)$ nach isotypischen Komponenten bzgl. $SO(3)$. Grob skizziert ergibt sich diese Zerlegung wie folgt.

i.- Wegen $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\} = \mathbb{R}_+ \times S^2$ (\rightarrow Einführung von sphärischen Polarkoordinaten) und weil $SO(3)$ auf dem Radialraum \mathbb{R}_+ trivial wirkt, spielt $L^2(S^2)$ eine zentrale Rolle. Das Hermitesche Skalarprodukt in $L^2(S^2)$ ist

$$(\psi_1, \psi_2) := \int_{S^2} \bar{\psi}_1 \psi_2 d\Omega$$

mit $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ der **Raumwinkelform** auf der 2-Sphäre S^2 .

ii.- Sei P_ℓ der Vektorraum aller komplexwertigen homogenen Polynome vom Grad ℓ in den kartesischen Koordinaten x, y, z . Durch Einschränkung des Definitionsbereichs konvertieren wir P_ℓ in einen Vektorraum \widetilde{P}_ℓ von Funktionen auf S^2 . Dieser Raum \widetilde{P}_ℓ ist ein $SO(3)$ -invarianter Teilraum von $L^2(S^2)$. Allerdings ist \widetilde{P}_ℓ im allgemeinen nicht $SO(3)$ -irreduzibel; zum Beispiel enthält \widetilde{P}_2 den eindimensionalen invarianten Teilraum $\mathbb{C} \cdot (x^2 + y^2 + z^2)|_{S^2}$.

iii.- (“Orthogonalisierung”). Definiere V_ℓ durch Rekursion als jenen Teilraum von \widetilde{P}_ℓ , der auf $\widetilde{P}_0 \oplus \widetilde{P}_1 \oplus \dots \oplus \widetilde{P}_{\ell-1}$ senkrecht steht (bzgl. des obigen Hermiteschen Skalarprodukts). Wegen der

Unitarität der Darstellung ist V_ℓ ein $\text{SO}(3)$ -invarianter Teilraum von \tilde{P}_ℓ . Mit etwas Mühe zeigt man: V_ℓ ist $\text{SO}(3)$ -irreduzibel, hat die Dimension $2\ell + 1$, und die Darstellung von $\text{SO}(3)$ auf V_ℓ ist äquivalent zu der im Satz von Abschnitt 7.3 angegebenen Matrix-Darstellung $\mathcal{R}^{(\ell)} : \text{SO}(3) \rightarrow \text{U}(\mathbb{C}^{2\ell+1})$. Die ersten Räume dieser Sequenz sind ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$)

$$V_0 = \text{span}_{\mathbb{C}}\{1\}, \quad V_1 = \text{span}_{\mathbb{C}}\{x, y, z\} \Big|_{r=1}, \quad V_2 = \text{span}_{\mathbb{C}}\{xy, yz, zx, x^2 - \frac{1}{3}r^2, y^2 - \frac{1}{3}r^2\} \Big|_{r=1}, \dots$$

iv.- Die so konstruierten irreduziblen Darstellungsräume V_ℓ von $\text{SO}(3)$ schöpfen $L^2(S^2)$ aus:

$$L^2(S^2) = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} V_\ell.$$

Mittels Polarzerlegung $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\} = \mathbb{R}_+ \times S^2$, $dx dy dz = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$, entsteht

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} (L^2(\mathbb{R}_+) \otimes V_\ell).$$

Hierbei ist $L^2(\mathbb{R}_+)$ der Hilbertraum der **Radialfunktionen** mit Skalarprodukt

$$(f_1, f_2) = \int_0^\infty \overline{f_1(r)} f_2(r) r^2 dr.$$

Konkret haben wir damit folgendes Aussage: Ist $Y_{\ell m} : S^2 \rightarrow \mathbb{C}$ eine Basis von V_ℓ (durchläuft m also $2\ell + 1$ Werte, z.B. $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$), dann lässt sich $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ entwickeln:

$$\psi(x, y, z) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \psi_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(\Omega) \quad (\Omega \equiv \theta, \phi).$$

Die folgende **Übersicht** fasst die nach Anwendung des Satzes von Abschnitt 7.2.3 resultierende Situation für dreihinvariante Hamiltonoperatoren \hat{H} zusammen:

$$\begin{aligned} L^2(\mathbb{R}^3) &= \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} (L^2(\mathbb{R}_+) \otimes V_\ell), \\ U(g) &= \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} (\mathbf{1} \otimes \mathcal{R}^{(\ell)}(g)), \quad g \in \text{SO}(3), \\ \hat{H} &= \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} (h_\ell \otimes \mathbf{1}). \end{aligned}$$

Es bleibt zu klären, wie die Operatoren h_ℓ aussehen.

7.4.1 Laplace-Operator in sphärischen Polarkoordinaten

Hier kürzen wir unseren systematischen Aufbau stark ab und benutzen die bekannten Formeln für den **Gradienten**

$$\text{grad} = e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

und die **Divergenz**

$$\text{div} \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} A_\phi$$

in sphärischen Polarkoordinaten

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan(\sqrt{x^2 + y^2}/z), \quad \phi = \arctan(y/x).$$

Für den **Laplace-Operator** ergibt sich

$$\Delta = \operatorname{div} \circ \operatorname{grad} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \circ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Diesen Ausdruck organisieren wir am besten in der folgenden Weise:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2}, \quad \Delta_{S^2} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \circ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Behauptung. In jedem $\mathrm{SO}(3)$ -irreduziblen Teilraum V_ℓ der Zerlegung $L^2(S^2) = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} V_\ell$ ist Δ_{S^2} ein Vielfaches des Eins:

$$\Delta_{S^2}|_{V_\ell} = -\ell(\ell+1) \mathbf{1}_{V_\ell}.$$

Beweisidee. Zeige, dass Δ_{S^2} auf $L^2(S^2)$ wie die Casimir-Invariante

$$\Delta_{S^2} = \sum_k U_*(\mathcal{L}_k)^2 = C$$

wirkt und benütze die obige Formel

$$C^{(\ell)} = \sum_{k=x,y,z} \mathcal{R}_*^{(\ell)}(\mathcal{L}_k)^2 = -\ell(\ell+1) \mathbf{1}_{V_\ell}$$

für C in der Darstellung $\mathcal{R}_*^{(\ell)}$ auf V_ℓ . \square

Bemerkung. V_ℓ ist **Eigenraum** des Drehimpulsquadrats $\sum \widehat{L}_k^2$ zum Eigenwert $\hbar^2 \ell(\ell+1)$. \square

Insgesamt kennen wir jetzt die Form des drehinvarianten Hamiltonoperators

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} (h_\ell \otimes \mathbf{1}_{V_\ell})$$

in jedem Drehimpuls-Sektor (d.h. in jeder $\mathrm{SO}(3)$ -isotypischer Komponente):

$$h_\ell = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V(r).$$

7.5 Teilchen im sphärischen Käfig

Wir suchen stationäre Zustände zum Hamiltonoperator

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$$

im \mathbb{R}^3 mit zentralsymmetrischem Potential (**“sphärischer Käfig”**)

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < R, \\ +\infty & r > R. \end{cases}$$

Das unendliche hohe Potential zwingt die Wellenfunktion am Käfigrand zu Null:

$$\psi(x, y, z)|_{r=R} = 0.$$

Innerhalb des Käfigs ist die Bewegung frei, und für eine feste Drehimpulsquantenzahl ℓ haben wir

$$h_\ell = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \quad (r < R).$$

Zu lösen ist das Eigenwertproblem

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) f_\ell(r) = E f_\ell(r)$$

mit der Randbedingung $f_\ell(r = R) = 0$. Die Gesamtwellenfunktionen stationärer Zustände sind natürlich

$$\psi(x, y, z) = f_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

mit $Y_{\ell m}$ einem Satz von Basisfunktionen in V_ℓ .

Aufgabe. Zeige die Relation

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \circ r. \quad \square$$

Im folgenden beschränken wir uns auf den einfachsten Fall: $\ell = 0$, also Drehimpuls Null. Hier fällt das sog. **Zentrifugalpotential** weg, und zu lösen ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \circ r^2 \frac{\partial}{\partial r} f_0(r) = E f_0(r).$$

Durch simple Umformung (siehe Aufgabe) entsteht

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r f_0(r)) = \frac{2mE}{\hbar^2} f_0(r) =: k^2 f_0(r).$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$r f_0(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr).$$

Weil die Regularität der Lösung f_0 im Ursprung $B = 0$ erfordert, reduziert sich der Ansatz zu

$$f_0(r) = A \frac{\sin(kr)}{r}.$$

Die Randbedingung $f_0(R) = 0$ wird durch den diskreten Satz von **Wellenzahlen**

$$k_n = \frac{n\pi}{R}, \quad n = 1, 2, \dots$$

erfüllt. Die normierten Wellenfunktionen hierzu sind

$$\psi_{0,n} = (2\pi R)^{-1/2} \frac{\sin(n\pi r/R)}{r},$$

und für die Energieniveaus (zum Drehimpuls $\ell = 0$) erhalten wir

$$E_{0,n} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} (n\pi)^2 \quad (n = 1, 2, \dots).$$

Hinweis. Die Abhängigkeit $E_n \propto R^{-2}$ folgt schon aus einer kurzen Dimensionsbetrachtung: $E = \text{const} \times \hbar^2 / (2mR^2)$ ist die einzige Energie, die aus den zur Verfügung stehenden physikalischen Größen gebildet werden kann.

7.6 Zweikörpersystem

Jedes abgeschlossene Zweikörpersystem lässt sich durch Abspaltung der Schwerpunktbewegung auf ein zentralsymmetrisches Einkörperproblem zurückführen. Wir erinnern an diese Reduktion im Kontext der klassischen Mechanik und kommen dann zum quantenmechanischen Fall.

7.6.1 KM

Wir betrachten die Hamiltonfunktion für ein wechselwirkendes System zweier Körper mit Massen m_1 und m_2 , Ortsvektoren \vec{q}_1 und \vec{q}_2 , und Impulsen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 :

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{q}_1, \vec{q}_2).$$

Die Position \vec{Q} des Schwerpunkts und der Gesamtimpuls \vec{P} werden ausgedrückt durch

$$\vec{Q} := \frac{m_1\vec{q}_1 + m_2\vec{q}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{P} := \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = m_1\dot{\vec{q}}_1 + m_2\dot{\vec{q}}_2.$$

Orts- und Impulsvektor der Relativbewegung sind

$$\vec{q} := \vec{q}_1 - \vec{q}_2, \quad \vec{p} = m\dot{\vec{q}}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

m heißt die **reduzierte Masse**.

Wir nehmen jetzt an, dass das Zweikörpersystem abgeschlossen ist. Aus der Translationsinvarianz des abgeschlossenen Systems folgt dann, dass das Wechselwirkungspotential V nur vom Differenzvektor $\vec{q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2$ (nicht vom Ort des Schwerpunkts) abhängen kann. Aufgrund von Rotationsinvarianz folgt zudem, dass V lediglich von der Länge $|\vec{q}|$ des Vektors \vec{q} abhängt.

Die Umrechnung der Hamiltonfunktion in die Freiheitsgrade der Schwerpunkt- und Relativbewegung ergibt

$$H = H_{\text{c.m.}} + H_{\text{rel}}, \quad H_{\text{c.m.}} = \frac{\vec{P}^2}{2M}, \quad H_{\text{rel}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{q}|),$$

mit $M = m_1 + m_2$ der Gesamtmasse. Gemäß $H_{\text{c.m.}} = \vec{P}^2/2M$ bewegt sich der Schwerpunkt geradlinig und gleichförmig. Zur Diskussion der Relativbewegung bedient man sich des Drehimpulses $\vec{L} := \vec{q} \times \vec{p}$ als erhaltener Größe des zentralsymmetrischen Problems. Mit $r := |\vec{q}|$, $p_r := \vec{p} \cdot \vec{q}/r$ und $\vec{p}^2 = p_r^2 + \vec{L}^2/r^2$ ist

$$H_{\text{rel}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r), \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}.$$

Im Fall einer gebundenen Bewegung pendelt die Abstandsvariable $r = |\vec{q}|$ zwischen einem Maximal- und Minimalwert, $r_{\min} \leq r \leq r_{\max}$. Für ein allgemeines Potential und allgemeine Anfangsbedingungen sind die Radial- und Winkelbewegung nicht kommensurabel. Im Spezialfall des Coulombpotentials $V(r) = -\alpha/r$ jedoch werden die Extrema der Radialbewegung (**Apo-** bzw. **Perizentrum**) immer beim gleichen Winkel angenommen. Der Grund für diese Besonderheit liegt in der Existenz einer zusätzlichen Erhaltungsgröße, nämlich des **Runge-Lenz-Vektors**

$$\vec{A} = \vec{p} \times \vec{L} - m\vec{q} \frac{\alpha}{r}.$$

7.6.2 QM

Die freie Bewegung des Schwerpunkts wird hier nicht weiter diskutiert (siehe Abschnitt 3.2).

Der Hamiltonoperator der Relativbewegung lautet bekanntlich (siehe Abschnitt 7.4.1)

$$H_{\text{rel}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\Delta_{S^2}}{r^2} \right) + V(r).$$

Im Sektor V_ℓ mit Drehimpuls ℓ , d.h. auf Wellenfunktionen der Form $\psi(x, y, z) = f_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, ist Δ_{S^2} durch den entsprechenden Eigenwert $-\ell(\ell + 1)$ zu ersetzen. Zu lösen bleibt dann das radiale Eigenwertproblem

$$h_\ell f_\ell = E f_\ell$$

mit dem in Gleichung (7.8) angegebenen Operator h_ℓ . Wegen $\dim V_\ell = 2\ell + 1$ hat jeder Energie-Eigenwert E die **Multiplizität** $2\ell + 1$.

7.7 Energiespektrum des Wasserstoffatoms

Wir spezialisieren jetzt zum Fall des **Coulomb-Potentials**

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Die radiale Schrödinger-Gleichung für die Hilfsfunktion $u(r) := r f_\ell(r)$ lautet dann

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) u(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} u(r) = E u(r).$$

Um diese Gleichung dimensionsfrei zu machen, führen wir den **Bohr-Radius** a_0 ein; dieser wird bestimmt durch

$$\frac{\hbar^2}{m a_0^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}.$$

Auflösen nach a_0 ergibt

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \approx 0.5 \times 10^{-10} \text{ m}.$$

Als charakteristische Energie eignet sich die **Rydberg-Konstante**

$$E_0 \equiv \text{Ryd} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \approx 13.6 \text{ eV}.$$

Substituieren wir jetzt (mit dimensionslosen Größen $\xi, \varepsilon \geq 0$)

$$r = a_0 \xi, \quad E = -2E_0 \varepsilon,$$

so nimmt die obige Differentialgleichung die folgende dimensionslose Gestalt an:

$$\left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{2\xi^2} + \frac{1}{\xi} - \varepsilon \right) u(\xi) = 0.$$

Asymptotik. Zur Vorbereitung des Lösungsansatzes betrachten wir zwei Grenzfälle.

1. $\xi \rightarrow \infty$. In diesem Grenzfall vereinfacht sich die DGL zu $u'' = 2\varepsilon u$. Diese hat die abfallende Lösung $u(\xi) \propto e^{-\sqrt{2\varepsilon}\xi}$.

2. $\xi \rightarrow 0$. Hier haben wir $u'' = \ell(\ell + 1)\xi^{-2}u$ mit regulärer Lösung $u(\xi) \propto \xi^{\ell+1}$.

Ansatz. Insgesamt motivieren diese Betrachtungen den Ansatz

$$u(\xi) = \xi^{\ell+1} e^{-\sqrt{2\varepsilon}\xi} w(\xi).$$

Durch zweimaliges Ableiten dieses Ansatzes erhält man

$$\frac{u''}{u} = \frac{w''}{w} + 2\frac{\ell+1}{\xi} \frac{w'}{w} - 2\sqrt{2\varepsilon} \frac{w'}{w} + \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} - 2\sqrt{2\varepsilon} \frac{\ell+1}{\xi} + 2\varepsilon.$$

Damit geht die dimensionslose radiale Schrödinger-Gleichung in folgende Form über:

$$\frac{w''}{2} + (\ell+1 - \sqrt{2\varepsilon}\xi) \frac{w'}{\xi} + (1 - (\ell+1)\sqrt{2\varepsilon}) \frac{w}{\xi} = 0.$$

Führen wir nun die Abkürzungen bzw. Substitution

$$a = \ell + 1 - \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}, \quad b = 2\ell + 1, \quad z = 2\sqrt{2\varepsilon}\xi$$

ein und multiplizieren wir unsere Gleichung mit $\xi/\sqrt{2\varepsilon}$, so nimmt sie die Gestalt einer **konfluenten hypergeometrischen** Differentialgleichung (oder Kummer'schen Gleichung) an:

$$z \frac{d^2w}{dz^2} + (b - z) \frac{dw}{dz} - aw = 0.$$

Sie hat die in $z = 0$ reguläre Lösung

$$w = 1 + \frac{a}{b} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots + \frac{a(a+1) \dots (a+n-1)}{b(b+1) \dots (b+n-1)} \frac{z^n}{n!} + \dots$$

Hinweis. Zur Verifikation der Lösungseigenschaft hilft die kürzere Schreibweise

$$w(z) = F_2(a, b; z) \equiv \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(b+n)} \frac{z^n}{n!}.$$

Hierbei ist $\Gamma(a)$ die **Gammafunktion**. Sie erfüllt die Funktionalgleichung $\Gamma(a+1) = a\Gamma(a)$. Die Funktion $F_2(a, b; z)$ heißt konfluente hypergeometrische Funktion. \square

Mit Hilfe der Asymptotik $\Gamma(a+n)/\Gamma(b+n) \rightarrow n^{a-b}$ für große n sieht man, dass w für $z \rightarrow +\infty$ und generische Werte der Parameter a, b schneller anwächst, als die Funktion $e^{-z/2}$ abfällt. Daher liegt der Ansatz $u \propto z^{\ell+1} e^{-z/2} w(z)$ im allgemeinen nicht in $L^2(\mathbb{R}_+)$. Damit eine quadrat-integrierte Lösung entsteht, muss die Potenzreihe für $w(z)$ abbrechen. Dies passiert, wenn $a+n_r$ für irgendein $n_r \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ verschwindet. Mit $a = \ell + 1 - 1/\sqrt{2\varepsilon}$ lautet die Quantisierungsbedingung demnach

$$n_r + \ell + 1 = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \quad (n_r, \ell = 0, 1, 2, \dots).$$

Auflösen nach $2\varepsilon = -E/E_0$ ergibt die quantisierten Energieniveaus

$$E_{n_r, \ell} = \frac{-E_0}{(n_r + \ell + 1)^2}.$$

Es sei darauf hingewiesen, dass die Energie nur von der **Hauptquantenzahl** $n \equiv n_r + \ell + 1$ abhängt. Der **Entartungsgrad** des Energieniveaus mit Hauptquantenzahl n ($n = 1, 2, \dots$) beträgt

$$\dim V_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2.$$

Dass der Entartungsgrad höher ist, als man aufgrund von Drehinvarianz erwarten sollte, liegt an der eingangs erwähnten Existenz eines zusätzlichen Erhaltungssatzes (Runge-Lenz-Vektor) für das Coulomb-Potential. Die (unnormierten) Radialwellenfunktionen sind

$$f_{n_r, \ell}(r) = (r/a_0)^\ell e^{-r/na_0} F_2(-n_r, 2\ell + 2; 2r/na_0).$$

Die konfluente hypergeometrische Funktion $F_2(-n_r, 2\ell + 2; 2r/na_0)$ ist per Konstruktion ein Polynom in r/a_0 vom Grad n_r .

Bemerkung. Die Entartung des Wasserstoffspektrums wird durch relativistische und quantenfeldtheoretische Korrekturen aufgehoben. Maßgeblich für die Größe der Korrekturen ist die **Feinstrukturkonstante** $e^2/(\hbar c \cdot 4\pi\epsilon_0) \approx 1/137$.

7.8 Elektronenspin

Die Untersuchung von wasserstoffähnlichen Atomspektren (in Verbindung mit dem **Pauli-Prinzip**, nach dem die mehrfache Besetzung von Einteilchenzuständen verboten ist) zeigt, dass die Energieniveaus von Wasserstoff anstelle des oben berechneten Entartungsgrades (n^2) den doppelten (also $2n^2$) haben. Diese Verdopplung stammt von einem zusätzlichen Freiheitsgrad des Elektrons, dem sogenannten **Spin**, der relativistischen Ursprungs ist. Seine theoretische Begründung fußt auf der **Dirac-Gleichung**, einer relativistischen Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung.

7.8.1 Pauli-Gleichung

Im nichtrelativistischen Limes ($|v| \ll c$) reduziert sich die Dirac-Gleichung für das Elektron (mit Ladung e , Masse m und Ruhe-Energie mc^2 ; und im elektromagnetischen Feld mit Potentialen ϕ, \vec{A}) zur **Pauli-Gleichung**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi, \quad H = (mc^2 + e\phi + (\vec{p} - e\vec{A})^2/2m) \cdot \mathbf{1}_2 + \frac{e\hbar}{2m} \sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j.$$

Im Vergleich zur Schrödinger-Gleichung enthält sie als Zusatzterm (neben dem trivialen Term mc^2 , der sich durch Verschiebung der Null auf der Energie-Achse beseitigen lässt) den Pauli-Term, der aus den Komponenten B_j der magnetischen Feldstärke und den **Pauli-Matrizen**

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

aufgebaut ist. Die Wellenfunktion ψ der Pauli-Gleichung ist \mathbb{C}^2 -wertig, hat also 2 Komponenten:

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Man nennt $\psi(\mathbf{r})$ auch einen **Spinor**. Der Hilbertraum des Elektrons mit Spin ist $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$.

Bemerkung 1. Dass die Pauli-Matrizen die angegebene Form haben, ist eine willkürliche Konvention, die unter Physikern Standard ist. Wesentlich sind die algebraischen Relationen

$$\sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_k = 2\delta_{kl} \mathbf{1}_2 \quad \text{und} \quad \sigma_k \sigma_l - \sigma_l \sigma_k = 2i \sum_m \epsilon_{klm} \sigma_m.$$

Bemerkung 2. In versteckter Form sind wir den Pauli-Matrizen schon in Abschnitt 7.3 begegnet. Es gilt nämlich

$$\mathcal{D}_*^{(n=1)}(\mathcal{L}_k) = (2i)^{-1} \sigma_k \quad (k = 1, 2, 3).$$

Bis auf den Faktor $2i$ sind die Pauli-Matrizen also gleich den Darstellungsmatrizen $\mathcal{D}_*^{(n)}(\mathcal{L}_k)$ für $n = 1$ der Generatoren \mathcal{L}_k der Drehgruppe $SO(3)$.

7.8.2 Drehinvarianz

Ein grundlegendes Prinzip der Physik ist, dass die Formulierung der Naturgesetze nicht von der Wahl des Koordinatensystems abhängen darf. Nun hat man aber zur Aufstellung der Pauli-Gleichung ein kartesisches Koordinatensystem e_1, e_2, e_3 gewählt, um die magnetische Feldstärke durch ihre Komponenten B_1, B_2, B_3 bzgl. dieses Systems auszudrücken. Drehen wir das Koordinatensystem, so ändern sich diese Komponenten. Damit die Pauli-Gleichung die Forderung der Forminvarianz unter Wechsel des Koordinatensystems erfüllt, wird also ein passendes Transformationsgesetz für die Spinorwellenfunktion $\psi(v)$ (zum Ortsvektor v) benötigt.

Definition. Jeder Drehung $R_{a,\varphi} \in SO(3)$,

$$R_{a,\varphi} v = a \langle a, v \rangle + (v - a \langle a, v \rangle) \cos \varphi + (a \times v) \sin \varphi, \quad (7.9)$$

mit Drehachse $a = \sum_j a_j e_j$ ($|a| = 1$) und Drehwinkel φ , ist durch

$$\mathcal{D}^{(n=1)}(R_{a,\varphi}) := \exp \left(\frac{\varphi}{2i} \sum_{j=1}^3 a_j \sigma_j \right)$$

eine 2×2 -Matrix zugeordnet. Diese Zuordnung $R \mapsto \mathcal{D}^{(1)}(R)$ heißt die **Spinor-Darstellung** (oder die Darstellung für den Spin $S = 1/2$) der Drehgruppe.

Bemerkung. Die Spinor-Darstellung ist keine Darstellung im eigentlichen Sinn des Wortes. Aus einer Rechnung von Abschnitt 7.3 wissen wir bereits, dass sie einer Drehung um $\varphi = 2\pi$ nicht die 2×2 -Einheitsmatrix $\mathbf{1}_2$ sondern $-\mathbf{1}_2$ zuordnet. Ganz allgemein lässt sich zeigen, dass die oben erklärte Matrix $\mathcal{D}^{(1)}(R)$ genau bis auf das Vorzeichen wohlbestimmt ist. Wegen der Unsicherheit im Vorzeichen hatten wir die Spinor-Darstellung (wie alle Lie-Algebra Darstellungen zu ungeradem n) in Abschnitt 7.3 verworfen. An der jetzigen Stelle (Elektronenspin) tut sie aber genau das (siehe unten), was benötigt wird! Tatsächlich führt die Ambiguität im Vorzeichen letztendlich zu keinem Widerspruch, da die Spinorwellenfunktion in beobachtbare Größen immer quadratisch eingeht.

Fakt. Drehungen $R \in \text{SO}(3)$ wirken auf die Spinorwellenfunktion $v \mapsto \psi(v)$ wie

$$(R \cdot \psi)(v) = \mathcal{D}^{(1)}(R) \psi(R^{-1}v). \quad (7.10)$$

Mit diesem Transformationsgesetz ist die Pauli-Gleichung forminvariant.

Beweis. Unter eigentlichen Drehungen $R \in \text{SO}(3)$ transformieren sich die Komponenten B_j der magnetischen Feldstärke wie die Komponenten eines Vektors:

$$B_i(v) \mapsto \sum_j R_{ij} B_j(R^{-1}v).$$

Damit verhält sich der Pauli-Term unter Drehungen wie

$$\sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j(v) \psi(v) \mapsto \sum_{i=1}^3 \left(\sum_j R_{ij} B_j(R^{-1}v) \right) \sigma_i \mathcal{D}^{(1)}(R) \psi(R^{-1}v).$$

Für die Forminvarianz der Pauli-Gleichung benötigen wir

$$\sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j(v) \psi(v) \mapsto \mathcal{D}^{(1)}(R) \sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j(R^{-1}v) \psi(R^{-1}v).$$

Diese Forderung ist offenbar erfüllt, wenn gilt

$$\mathcal{D}^{(1)}(R) \sigma_j \mathcal{D}^{(1)}(R)^{-1} = \sum_i \sigma_i R_{ij}.$$

Unsere Aufgabe besteht also darin, die letzte Relation zu verifizieren. Dazu bedienen wir uns der Lie-theoretischen Identität $\text{Ad} \circ \exp = \exp \circ \text{ad}$. Im Klartext,

$$\begin{aligned} \text{Ad}(e^X)Y &\equiv e^X Y e^{-X} = Y + [X, Y] + \frac{1}{2}[X, [X, Y]] + \frac{1}{3!}[X, [X, [X, Y]]] + \dots \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{ad}^n(X) Y = e^{\text{ad}(X)} Y. \end{aligned}$$

Hiermit stellen wir für $R = R_{a,\varphi}$ die folgende Rechnung an:

$$\mathcal{D}^{(1)}(R) \sigma_j \mathcal{D}^{(1)}(R)^{-1} = \exp\left(\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \sigma_k\right) \sigma_j \exp\left(-\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \sigma_k\right) = \exp\left(\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \text{ad}(\sigma_k)\right) \sigma_j.$$

Nun gilt für den ersten Term der Exponentialreihe

$$\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \text{ad}(\sigma_k) \sigma_j = \frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k [\sigma_k, \sigma_j] = \varphi \sum_{k,l} a_k \epsilon_{kjl} \sigma_l,$$

und für den zweiten Term

$$\begin{aligned} \left(\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \text{ad}(\sigma_k)\right)^2 \sigma_j &= \varphi^2 \sum_{k,l} a_k \epsilon_{kjl} \sum_{i,m} a_i \epsilon_{ilm} \sigma_m \\ &= -\varphi^2 \sum_{k,l,i,m} a_k a_i (\delta_{k,i} \delta_{j,m} - \delta_{k,m} \delta_{i,j}) \sigma_m = -\varphi^2 \left(\sigma_j - a_j \sum_k a_k \sigma_k \right). \end{aligned}$$

Fortsetzung zu höherer Ordnung und Aufsummieren der geraden und ungeraden Teile der Exponentialreihe liefert

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \text{ad}(\sigma_k)\right)^{2n+1} \sigma_j &= \sin(\varphi) \sum_{k,l} a_k \epsilon_{kjl} \sigma_l, \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{\varphi}{2i} \sum_k a_k \text{ad}(\sigma_k)\right)^{2n} \sigma_j &= (\cos(\varphi) - 1) \left(\sigma_j - a_j \sum_k a_k \sigma_k \right). \end{aligned}$$

Insgesamt entsteht

$$\exp\left(\frac{\varphi}{2i} \sum a_k \text{ad}(\sigma_k)\right) \sigma_j = a_j \sum_k a_k \sigma_k + \cos(\varphi) \left(\sigma_j - a_j \sum_k a_k \sigma_k\right) + \sin(\varphi) \sum_{k,l} a_k \epsilon_{kjl} \sigma_l.$$

Durch Vergleich mit der Definition (7.9) sieht man jetzt

$$\mathcal{D}^{(1)}(R_{a,\varphi}) \sigma_j \mathcal{D}^{(1)}(R_{a,\varphi})^{-1} = \sum_i \sigma_i (R_{a,\varphi})_{ij},$$

womit die für die Forminvarianz erforderliche Relation gezeigt ist. \square

Ergänzung. Um die Invarianz unter der vollen Galilei-Gruppe zu erzielen, verlangt man, dass die Pauli-Gleichung auch unter **uneigentlichen** Drehungen $R \in O(3)$, insbesondere unter Raumspiegelungen $P : v \mapsto -v$, forminvariant ist. Hierfür ist zu beachten, dass die magnetische Feldstärke B unter Raumspiegelungen das Vorzeichen beibehält, anstatt es (wie ein Vektor) zu wechseln. Man nennt B einen **axialen Vektor**. (Tatsächlich ist die magnetische Feldstärke eine 2-Form.) Folglich erfordert die gewünschte Forminvarianz das Transformationsverhalten

$$\mathcal{D}^{(1)}(P) \sigma_j \mathcal{D}^{(1)}(P)^{-1} = +\sigma_j \quad (j = 1, 2, 3).$$

Aufgabe. Deduziere aus der vorstehenden Bedingung $\mathcal{D}^{(1)}(P) = \mathbf{1}_2$ und somit

$$(\widehat{P}\psi)(v) = \mathcal{D}^{(1)}(P) \psi(P^{-1}v) = \psi(-v).$$

7.8.3 Bahn- und Spindrehimpuls

Für Schrödinger-Teilchen mit skalarer Wellenfunktion f (kein Spin) kennen wir die Drehimpulsoperatoren

$$\widehat{L}_3 = \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \quad (\& \text{zyklisch});$$

siehe die Aufgabe von Abschnitt 7.4. Dieser Ausdruck für \widehat{L}_3 – und allgemeiner für den Generator \widehat{L}_a von Drehungen um die Drehachse mit Einheitsvektor a – folgt aus der Definition

$$\left(\exp(-i\varphi \widehat{L}_a / \hbar) f \right) (v) = f(R_{a,\varphi}^{-1} \cdot v)$$

durch Differentiation nach dem Drehwinkel φ an der Stelle $\varphi = 0$. Wir nennen den obigen Drehimpuls \widehat{L}_a ab sofort den **Bahndrehimpuls**. Für Teilchen mit Spin kommt ein zweiter Beitrag zum Drehimpuls hinzu, nämlich der **Spindrehimpuls** \widehat{S}_a .

Definition. Für ein Teilchen mit spinorwertiger Wellenfunktion und Transformationsgesetz (7.10) (z.B. für das Elektron) ist der quantenmechanische Operator für den Drehimpuls \widehat{J}_a bzgl. der Drehachse a erklärt durch

$$\left(\exp(-i\varphi \widehat{J}_a / \hbar) \psi \right) (v) = \mathcal{D}^{(1)}(R_{a,\varphi}) \psi(R_{a,\varphi}^{-1} \cdot v). \quad \square$$

Durch Differenzieren dieser definierenden Gleichung erhalten wir

$$\widehat{J}_a = \widehat{L}_a \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \widehat{S}_a, \quad \widehat{S}_a = \frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^3 a_j \sigma_j.$$

Das Tensorproduktsymbol bezieht sich auf die Zerlegung des Hilbertraums $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ nach den Bahn- und Spinfreiheitsgraden.

Aufgabe. Verifiziere anhand des angegebenen Ausdrucks für \widehat{J}_a die Vertauschungsrelation

$$\widehat{J}_a \widehat{J}_b - \widehat{J}_b \widehat{J}_a = i\hbar \widehat{J}_{a \times b}.$$

7.8.4 Spin im homogenen Magnetfeld

Ist ein Elektron im Zustand der Ruhe (bzgl. des gewählten Inertialsystems), so wird seine Energie allein durch den Spinfreiheitsgrad und die Kopplung an die magnetische Feldstärke bestimmt. Im Fall eines homogenen Magnetfelds $B_j = B_j(\mathbf{r}) = \text{const}$ ist der Hamiltonoperator des ruhenden Elektrons ganz einfach eine (2×2) -Matrix,

$$H_{\text{Pauli}} = \frac{e\hbar}{2m} \sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j = \frac{e\hbar}{2m} \begin{pmatrix} B_3 & B_1 - iB_2 \\ B_1 + iB_2 & -B_3 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte dieser Matrix (und somit die Energien des ruhenden Elektrons) sind

$$E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_L, \quad \omega_L = e|B|/m.$$

Die Frequenz $\omega = e|B|/m$ heißt **Larmor-Frequenz** und hat folgende dynamische Bedeutung.

Der Elektronenspin befinde sich zur Anfangszeit $t = 0$ in einem Zustand $|\psi(t=0)\rangle$, der im allgemeinen kein Eigenzustand von $H_{\text{Pauli}} \equiv H$ sei. Die Zeitentwicklung $|\psi(t)\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi(0)\rangle$ ergibt dann folgende Zeitabhängigkeit für die Erwartungswerte der Operatoren des Spindrehimpulses:

$$S_a(t) \equiv \langle \psi(t) | \widehat{S}_a | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sum_j a_j \langle \psi(0) | e^{itH/\hbar} \sigma_j e^{-itH/\hbar} | \psi(0) \rangle.$$

Nun haben wir

$$e^{-itH/\hbar} = \exp\left(\frac{\omega_L t}{2i} \sum_j b_j \sigma_j\right) = \mathcal{D}^{(1)}(R_{b, \omega_L t}), \quad b_j = B_j/|B|,$$

und mit dem Ergebnis der Rechnung im Beweis von Abschnitt 7.8.2 folgt

$$\begin{aligned} S_a(t) &= \frac{\hbar}{2} \sum_j a_j \langle \psi(0) | \mathcal{D}^{(1)}(R_{b, \omega_L t})^{-1} \sigma_j \mathcal{D}^{(1)}(R_{b, \omega_L t}) | \psi(0) \rangle \\ &= \sum_{i,j} S_{e_i}(0) (R_{b, -\omega_L t})_{ij} a_j = \sum_{i,j} a_j (R_{b, \omega_L t})_{ji} S_i(0). \end{aligned}$$

Fügen wir die Erwartungswerte $S_{e_i}(t) \equiv S_i(t)$ zu einem Vektor

$$S(t) = \sum_{i=1}^3 S_i(t) e_i$$

zusammen, dann ist die Spindynamik eine gleichförmige Rotation (genannt **Larmor-Präzession**)

$$S(t) = R_{b, \omega_L t} S(0)$$

mit Frequenz ω_L um die Achse b des homogenen Magnetfelds.

Aufgabe. Der Zirkulationssinn der Larmor-Präzession ist unmittelbar vergleichbar mit dem Zirkulationssinn des elektrischen Ladungsstroms, der das Magnetfeld verursacht. Sind die beiden Zirkulationssinne gleichläufig oder gegenläufig?

8 Störungsrechnung

8.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

[Anm. d. Red.: Vorlesung 8.1 entwickelt, gehalten und in TeX gesetzt von R. Kennedy]

8.1.1 Motivation

Es gibt nur wenige Probleme in der Quantenphysik, die exakt lösbar sind. Einige dieser Probleme haben wir bereits kennengelernt, und immer war es der besonders einfache Potentialterm, der es uns erlaubt hat, eine exakte Lösung zu finden:

- freies Teilchen ($V = 0$),
- Potentialtopf und Potentialschwelle (V stückweise konstant),
- harmonischer Oszillator ($V \propto r^2$),
- Wasserstoffatom ($V \propto r^{-1}$).

Für ein Problem mit einem Potential, das sich nur geringfügig von solch einem einfachen Potential unterscheidet, kann als einfachste Näherung diese geringfügige Differenz (die *Störung*) komplett ignoriert werden. In dieser Vorlesung wird eine Methode vorgestellt, die *Störungstheorie*, mit welcher der Einfluss der Störung zu beliebiger Ordnung der Genauigkeit berechnet werden kann.

Das Prinzip der Störungstheorie findet sich auch in der klassischen Mechanik: Die Bewegung von Planeten um die Sonne lässt sich gut durch ein Zweikörperproblem beschreiben, das exakt lösbar ist und für das der Einfluss entfernter Planeten ignoriert wird. Um diesen Einfluss (näherungsweise) zu berechnen, wird die Zweikörperbewegung als Startpunkt genommen und der Einfluss anderer Planeten als Störung gesehen.

8.1.2 Nichtentarteter Fall

Es sei ein System mit Hamiltonoperator H_0 gegeben, für welches die stationäre Schrödingergleichung insoweit gelöst werden kann, dass das diskrete Spektrum von Energien $E_n^{(0)}$ sowie die normierten Eigenzustände $|n^{(0)}\rangle$ bekannt sind:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle.$$

In diesem Abschnitt nehmen wir an, dass die Energieniveaus nicht entartet sind; es soll also $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ für $n \neq m$ gelten.

Wir interessieren uns nun für die Lösung eines Problems mit Hamiltonoperator

$$H := H_0 + H_1,$$

der durch einen zusätzlichen Term H_1 gegenüber H_0 *gestört* ist. Hierzu führen wir einen Parameter $\lambda \in [0, 1]$ ein, der zwischen dem ursprünglichen System und dem gestörten System interpoliert

Um konkrete Formeln für diese zu finden, bilden wir auf jeweils beiden Seiten das Skalarprodukt mit einem Basisvektor $|m^{(0)}\rangle$. Zunächst betrachten wir den Fall $m = n$:

$$\underbrace{\langle n^{(0)}|H_0|n^{(k)}\rangle}_{=E_n^{(0)}\langle n^{(0)}|n^{(k)}\rangle=0} + \boxed{\langle n^{(0)}|H_1|n^{(k-1)}\rangle = E_n^{(k)}}.$$

Die Energiekorrektur in k -ter Ordnung ist somit durch die Zustandskorrektur in der um Eins erniedrigten Ordnung bestimmt.

Für den Fall $m \neq n$ ergibt sich:

$$\underbrace{\langle m^{(0)}|H_0|n^{(k)}\rangle}_{=E_m^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(k)}\rangle} + \langle m^{(0)}|H_1|n^{(k-1)}\rangle = E_n^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(k)}\rangle + \dots + E_n^{(k-1)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle.$$

Durch Umformen erhalten wir

$$\boxed{\langle m^{(0)}|n^{(k)}\rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} [\langle m^{(0)}|H_1|n^{(k-1)}\rangle - E_n^{(1)}\langle m^{(0)}|n^{(k-1)}\rangle - \dots - E_n^{(k-1)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle]}.$$

Auch hier ist die Korrektur k -ter Ordnung vollständig durch Korrekturen geringerer Ordnung bestimmt. Sowohl Energie- als auch Zustandskorrekturen bis zu einer beliebigen Ordnung können also iterativ bestimmt werden, beginnend mit $k = 1$. Explizit lauten die ersten Schritte dieser Iteration wie folgt:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle, \\ |n^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \\ E_n^{(2)} &= \langle n^{(0)}|H_1|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned}$$

Für jeden zusätzlichen Schritt der Iteration erhalten die Ausdrücke für die Korrekturen zusätzliche Faktoren der Form

$$\frac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Für eine konvergente Störungsreihe erwarten wir, dass diese Faktoren betragsmäßig kleiner als 1 sind. Damit bereits nach den ersten Ordnungen eine gute Näherung resultiert, sollten diese sogar sehr viel kleiner als 1 sein. So ergibt sich ein Kriterium für die Anwendbarkeit nichtentarteter Störungstheorie:

$$|\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|.$$

8.1.3 Beispiel: Grundzustand von Helium

Der Hamiltonoperator für die Elektronen im Heliumatom lautet

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}}_{H_1},$$

mit $r_{12} := |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Der Hamiltonoperator H_0 ist die Summe zweier Hamiltonoperatoren für Wasserstoff mit doppelter Kernladung ($2e$ statt e). Wenn in der Wellenfunktion $\psi_{100}(\vec{r})$ des Grundzustands der Bohrradius a_0 entsprechend durch $a := a_0/2$ ersetzt wird, dann gilt

$$H(\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)) = \underbrace{(-4\text{Ryd} - 4\text{Ryd})}_{\substack{=-8\text{Ryd} \\ =E_0^{(0)}}} \underbrace{\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)}_{\substack{=\frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{r_1+r_2}{a}} \\ =\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | 0^{(0)} \rangle}},$$

wobei die Bindungsenergie eines einzelnen Elektrons durch die Verdopplung der Kernladung (und die Halbierung des Bohrradius) gegenüber dem Wasserstoffatom um den Faktor 4 erhöht ist. Die Energiekorrektur erster Ordnung ist

$$E_0^{(1)} = \langle 0^{(0)} | H_1 | 0^{(0)} \rangle = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \frac{1}{(\pi a^3)^2} e^{-\frac{2(r_1+r_2)}{a}} = \frac{5}{2}\text{Ryd}.$$

Damit ergibt sich für Helium eine Grundzustandsenergie von

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} + \dots \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -5.5 \text{ Ryd},$$

was nicht weit vom experimentellen Wert -5.8 Ryd liegt. (Die gegenseitige Abstoßung der beiden Elektronen bewirkt also eine Reduktion der Bindungsenergie von 8 Ryd auf 5.8 Ryd .)

8.1.4 Entarteter Fall

Die Herleitung der Korrekturen in der letzten Sektion beruhte auf der Annahme, dass der Eigenraum zu jedem Eigenwert $E_n^{(0)}$ eindimensional ist (“nichtentarteter Fall”). Deutlich wird dies beim Ausdruck für die Zustandskorrekturen, wo die Differenzen $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ im Nenner auftauchen; diese Korrekturen beinhalten im entarteten Fall illegale Division durch Null.

Sei nun $E_n^{(0)}$ ein D -fach entarteter Eigenwert und $\{|\tilde{n}_i^{(0)}\rangle\}$ mit $i = 1, \dots, D$ eine beliebige Basis des entsprechenden Eigenraums. Im Allgemeinen ist zu erwarten, dass die Entartung durch die Störung aufgehoben wird. Von den unendlich vielen Möglichkeiten, eine Basis des Eigenraums zu wählen, ist nur jene Wahl $\{|n_i^{(0)}\rangle\}$ die “richtige”, für die gilt

$$|n_i\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |n_i^{(0)}\rangle.$$

Einsetzen von $|n_i^{(0)}\rangle$ in die Schrödingergleichung erster Ordnung liefert

$$H_0|n_i^{(1)}\rangle + H_1|n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n_i^{(1)}\rangle + E_{n,i}^{(1)}|n_i^{(0)}\rangle.$$

Im nichtentarteten Fall wurde als erster Schritt das Skalarprodukt mit $|n^{(0)}\rangle$ genommen, was einer Projektion auf den eindimensionalen Eigenraum zur Energie $E_n^{(0)}$ gleichkommt. Im entarteten Fall ist dieser Eigenraum D -dimensional, und die Verallgemeinerung der obigen Strategie besteht darin, auf diesen Eigenraum zu projizieren; dies geschieht mittels $Q := \sum_i |\tilde{n}_i^{(0)}\rangle\langle \tilde{n}_i^{(0)}| = \sum_i |n_i^{(0)}\rangle\langle n_i^{(0)}|$. Wegen $QH_0 = E_n^{(0)}Q$ reduziert sich die obige Gleichung zu

$$QH_1Q|n_i^{(0)}\rangle = E_{n,i}^{(1)}|n_i^{(0)}\rangle.$$

Dies ist ein Eigenwertproblem (für die projizierte Störung QH_1Q), dessen Eigenwerte und Eigenvektoren die Energiekorrekturen bzw. die “richtigen” Zustände nullter Ordnung sind. Durch Entwicklung $|n_i^{(0)}\rangle = \sum_j |\tilde{n}_j^{(0)}\rangle a_{j,i}$ nach der beliebigen Basis $\{|\tilde{n}_j^{(0)}\rangle\}$ erhalten wir mit $(H_1)_{ij} := \langle \tilde{n}_i^{(0)} | H_1 | \tilde{n}_j^{(0)} \rangle$ die Gleichung

$$\begin{pmatrix} (H_1)_{11} & (H_1)_{12} & \cdots & (H_1)_{1D} \\ (H_1)_{21} & (H_1)_{22} & \cdots & (H_1)_{2D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (H_1)_{D1} & (H_1)_{D2} & \cdots & (H_1)_{DD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,i} \\ a_{2,i} \\ \vdots \\ a_{D,i} \end{pmatrix} = E_{n,i}^{(1)} \begin{pmatrix} a_{1,i} \\ a_{2,i} \\ \vdots \\ a_{D,i} \end{pmatrix}.$$

Sollte die Entartung in erster Ordnung vollständig aufgehoben sein, also $E_{n,i}^{(1)} \neq E_{n,j}^{(1)}$ für $i \neq j$, dann gilt für die zweite Ordnung die Formel des nichtentarteten Falls (hier ohne Beweis):

$$E_{n,i}^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | H_1 | n_i^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Die Eigenzustände $|n_i^{(0)}\rangle$ diagonalisieren den Störterm H_1 im Eigenraum zum Eigenwert $E_n^{(0)}$ und damit gleichzeitig auch den gesamten Hamiltonoperator $H_0 + \lambda H_1$. Diese Methode lässt sich genauso für beliebige Eigenräume anwenden, also insbesondere auch für nur fast entartete Energieniveaus.

8.1.5 Beispiel: Stark-Effekt für Wasserstoff

In einem homogenen elektrischen Feld in positiver z -Richtung mit Feldstärke \mathcal{E} lautet der Hamiltonoperator eines Elektrons im Wasserstoffatom

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{H_0} + \underbrace{e\mathcal{E}\hat{z}}_{H_1}.$$

Die Eigenzustände von H_0 wurden in Abschnitt 7.7 bestimmt und werden hier als $|nlm\rangle$ bezeichnet. Dabei ist $n \geq 1$ die Hauptquantenzahl, l die Drehimpulsquantenzahl (mit $0 \leq l \leq n-1$) und m die magnetische Quantenzahl (mit $-l \leq m \leq l$). Die Energie im Zustand $|nlm\rangle$ ist $E_n^{(0)} = -\frac{1}{n^2}$ Ryd und damit unabhängig von l und m und somit n^2 -fach entartet.

Um Störungstheorie anzuwenden, müssen zunächst die Matrixelemente von H_1 berechnet werden. Aus $L_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle$ und $[L_z, \hat{z}] = 0$ folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n'l'm' | [L_z, \hat{z}] | nlm \rangle = \hbar(m' - m) \langle n'l'm' | \hat{z} | nlm \rangle \\ \Leftrightarrow & \langle n'l'm' | H_1 | nlm \rangle = 0 \quad \text{für } m' \neq m. \end{aligned}$$

In der Zerlegung $L^2(\mathbb{R}^3) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} (L^2(\mathbb{R}_+) \otimes V_l)$ wirkt der Paritätsoperator P als die Identität auf dem Radialanteil $L^2(\mathbb{R}_+)$, denn $r = |\mathbf{r}| = |-\mathbf{r}|$. Da der Winkelanteil V_l aus homogenen Polynomen vom Grad l besteht, wirkt P wegen $f(-x, -y, -z) = (-1)^l f(x, y, z)$ als $(-1)^l$ mal die Identität. Zusammen ergibt sich

$$P|nlm\rangle = (-1)^l |nlm\rangle.$$

Mit $P\hat{z}P = -\hat{z}$ folgt

$$\begin{aligned} \langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle &= -\langle n'l'm'|P\hat{z}P|nlm\rangle = (-1)^{l'+l+1}\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle \\ \Leftrightarrow \langle n'l'm'|H_1|nlm\rangle &= 0 \quad \text{für } l'+l \text{ gerade.} \end{aligned}$$

Die Energie $E_1^{(0)}$ des Grundzustands $|100\rangle$ ist nicht entartet. Die ersten Korrekturen betragen

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle 100|H_1|100\rangle = 0, \\ E_1^{(2)} &= e^2\mathcal{E}^2 \sum_{n'\neq 1, l', m'} \frac{|\langle n'l'm'|\hat{z}|100\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_{m'}^{(0)}} \propto \mathcal{E}^2. \end{aligned}$$

Im Grundzustand gibt es also eine (negative) Energiekorrektur proportional zu \mathcal{E}^2 ; man nennt sie den *quadratischen Stark-Effekt*.

Das erste angeregte Energieniveau $E_2^{(0)}$ ist vierfach entartet mit Eigenraum

$$\text{span}_{\mathbb{C}}\{|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle\}.$$

Nur die Matrixelemente $\langle 200|H_1|210\rangle = \overline{\langle 210|H_1|200\rangle}$ sind von Null verschieden:

$$\begin{aligned} \langle 200|H_1|210\rangle &= \int d^3\mathbf{r} \langle 200|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|H_1|210\rangle \\ &= e\mathcal{E} \int r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \overline{\psi_{200}(r, \theta, \phi)} r \cos\theta \psi_{210}(r, \theta, \phi) \\ &= \frac{e\mathcal{E}}{32\pi a_0^4} \int_0^\infty dr r^4 (2 - r/a_0) e^{-r/a_0} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos^2\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{e\mathcal{E}a_0}{24} \int_0^\infty dx x^4 (2 - x) e^{-x} = -3e\mathcal{E}a_0. \end{aligned}$$

In der Basis $\{|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle\}$ ergibt sich somit folgende Matrixdarstellung von H_1 :

$$\begin{pmatrix} 0 & -3e\mathcal{E}a_0 & 0 & 0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenvektoren und Eigenwerte sind

$ 2_i^{(0)}\rangle$	$E_{2,i}^{(1)}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(200\rangle + 210\rangle)$	$-3e\mathcal{E}a_0$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(200\rangle - 210\rangle)$	$3e\mathcal{E}a_0$
$ 211\rangle$	0
$ 21-1\rangle$	0

Die ersten beiden Eigenvektoren sind Superpositionen, deren Ladungsdichte ein endliches elektrisches Dipolmoment in z -Richtung aufweist, was eine Energiekorrektur linear in der Feldstärke \mathcal{E} ergibt, den *linearen Stark-Effekt*.

8.2 Zeitabhängige Störungsrechnung

Wie zuvor nehmen wir an, dass der Hamiltonoperator

$$H = H_0 + V$$

aus einem “ungestörten” Anteil H_0 und einer kleinen, jetzt möglicherweise zeitabhängigen Störung V besteht. Wir werden uns insbesondere für die Raten von Übergängen zwischen den stationären Zuständen von H_0 interessieren.

Zur Berechnung der Dynamik in einer solchen Situation eignet sich das sogenannte “Wechselwirkungsbild”. Dieses erhält man, indem man die durch H_0 erzeugte Zeitabhängigkeit beseitigt:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle := e^{itH_0/\hbar}|\psi(t)\rangle, \quad \tilde{A}(t) := e^{itH_0/\hbar}Ae^{-itH_0/\hbar}.$$

Hierbei ist $|\psi(t)\rangle$ der sich gemäß H entwickelnde Zustandsvektor; also $|\psi(t)\rangle = e^{-itH/\hbar}|\psi(0)\rangle$ im Fall eines zeitunabhängigen Hamiltonoperators H . Operatoren A werden so transformiert, dass ihre Erwartungswerte beim Übergang zum Wechselwirkungsbild gleich bleiben:

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle\tilde{\psi}(t)|\tilde{A}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle.$$

In Abwesenheit der Störung ($V \equiv 0$) ist $|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{itH_0/\hbar}e^{-itH_0/\hbar}|\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$ zeitunabhängig. Ist die Störung schwach, so erwarten wir eine gleichfalls schwache Zeitabhängigkeit, die wir durch Störungsrechnung erfassen können. Dazu leiten wir aus der Schrödingergleichung für $|\psi(t)\rangle$ eine entsprechende Differentialgleichung für $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ her:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{itH_0/\hbar}(-H_0 + H)|\psi(t)\rangle = \tilde{V}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle.$$

Wären die Operatoren $\tilde{V}(t) = e^{itH_0/\hbar}V(t)e^{-itH_0/\hbar}$ für alle Zeiten t miteinander vertauschbar, so hätten wir für die Lösung ganz einfach

$$|\tilde{\psi}(t_1)\rangle \stackrel{?!}{=} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}\tilde{V}(t)dt\right)|\tilde{\psi}(t_0)\rangle.$$

Im allgemeinen Fall einer zeitabhängigen Störung V gilt aber $\tilde{V}(t)\tilde{V}(t') \neq \tilde{V}(t')\tilde{V}(t)$. Die Lösung lässt sich dann nur in Form einer Reihe angeben; sie lautet

$$|\tilde{\psi}(t_f)\rangle = \mathcal{U}(t_f, t_i)|\tilde{\psi}(t_i)\rangle$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_f, t_i) = & \mathbf{1} + (-i/\hbar)\int_{t_i}^{t_f}\tilde{V}(t)dt + (-i/\hbar)^2\int_{t_i}^{t_f}\int_{t_i}^{t_2}\tilde{V}(t_2)\tilde{V}(t_1)dt_1dt_2 + \dots \\ & + (-i/\hbar)^n\int_{t_i}^{t_f}\int_{t_i}^{t_n}\dots\int_{t_i}^{t_3}\int_{t_i}^{t_2}\tilde{V}(t_n)\tilde{V}(t_{n-1})\dots\tilde{V}(t_2)\tilde{V}(t_1)dt_1dt_2\dots dt_{n-1}dt_n + \dots \end{aligned}$$

In der Tat verifiziert man leicht

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_i) = \tilde{V}(t) \mathcal{U}(t, t_i), \quad \mathcal{U}(t, t_i) \Big|_{t=t_i} = \mathbf{1}.$$

Um den formalen Lösungsausdruck für $\mathcal{U}(t_f, t_i)$ in eine griffige Form zu bringen, führt man den sog. **Zeitordnungsoperator** \mathcal{T} ein:

$$\mathcal{T} \left(\tilde{V}(t) \tilde{V}(t') \right) := \begin{cases} \tilde{V}(t) \tilde{V}(t') & \text{für } t > t', \\ \tilde{V}(t') \tilde{V}(t) & \text{für } t' > t. \end{cases}$$

Hiermit schreibt man

$$\int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_2} \tilde{V}(t_2) \tilde{V}(t_1) dt_1 dt_2 = \frac{1}{2!} \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{T} \left(\tilde{V}(t_2) \tilde{V}(t_1) \right) dt_1 dt_2.$$

Der Zeitordnungsoperator \mathcal{T} für ein n -faches Produkt $\tilde{V}(t_1) \tilde{V}(t_2) \cdots \tilde{V}(t_n)$ ist analog erklärt: er stellt den Faktor $\tilde{V}(\cdot)$ zur spätesten Zeit nach links, den Faktor zur frühesten Zeit nach rechts und die anderen Faktoren ihrer Zeitordnung entsprechend dazwischen. Es gilt dann

$$\begin{aligned} & \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_n} \cdots \int_{t_i}^{t_3} \int_{t_i}^{t_2} \tilde{V}(t_n) \tilde{V}(t_{n-1}) \cdots \tilde{V}(t_2) \tilde{V}(t_1) dt_1 dt_2 \cdots dt_{n-1} dt_n \\ &= \frac{1}{n!} \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_f} \cdots \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{T} \left(\tilde{V}(t_n) \tilde{V}(t_{n-1}) \cdots \tilde{V}(t_2) \tilde{V}(t_1) \right) dt_1 dt_2 \cdots dt_{n-1} dt_n. \end{aligned}$$

Mit dieser Konvention lässt sich die Lösungsreihe für den Zeitentwicklungsoperator $\mathcal{U}(t_1, t_0)$ in eine Kurzform bringen:

$$\mathcal{U}(t_1, t_0) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \tilde{V}(t) dt \right). \quad (8.11)$$

8.2.1 Beispiel: Rabi-Oszillationen

Um die Nützlichkeit des Wechselwirkungsbildes zu illustrieren, verwenden wir es zur Berechnung der Spindynamik des zeitabhängigen Hamiltonoperators

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3 + \lambda \cos(\omega t) \sigma_1.$$

Die physikalische Vorstellung hierzu ist, dass auf einen Spin $S = 1/2$ neben einem homogenen Magnetfeld in 3-Richtung (erster Summand) eine monochromatische Magnetfeld-Störung mit Frequenz ω in 1-Richtung (zweiter Summand) wirkt.

Aus Gründen, die erst im Verlauf der Rechnung ersichtlich werden, spalten wir den Hamiltonoperator wie folgt auf:

$$H = H_0 + V(t), \quad H_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3, \quad V(t) = \lambda \cos(\omega t) \sigma_1 + \frac{1}{2} (\hbar \omega_0 - \hbar \omega) \sigma_3.$$

Für diese Wahl der Aufspaltung transformieren wir die Störung V ins Wechselwirkungsbild:

$$\tilde{V}(t) \equiv e^{itH_0/\hbar} V(t) e^{-itH_0/\hbar} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hbar \omega_0 - \hbar \omega & \lambda(1 + e^{2i\omega t}) \\ \lambda(1 + e^{-2i\omega t}) & \hbar \omega - \hbar \omega_0 \end{pmatrix}.$$

Wir nehmen jetzt an, dass der Störanteil mit Stärkeparameter λ in $\tilde{V}(t)$ sehr schwach ist und die Störfrequenz ω in der Nähe der Larmorfrequenz ω_0 liegt. In diesem Grenzfall wird sich herausstellen, dass die Spinachse eine im Vergleich zu ω_0 niederfrequente Oszillation ausführt, die sogenannte **Rabi-Oszillation**. In guter Näherung dürfen wir die schwachen und hochfrequenten Terme $\lambda e^{\pm 2i\omega t}$ in $\tilde{V}(t)$ dann vernachlässigen. (Sie mitteln sich über eine Periode der Rabi-Oszillation in führender Ordnung zu Null.) Damit wird der Propagator im Wechselwirkungsbild effektiv zu dem eines zeitunabhängigen Problems. Wir berechnen ihn aus dem zeitlich gemittelten $\tilde{V}(t)$,

$$\tilde{V}_{\text{av}} := \frac{1}{2}(\hbar\omega_0 - \hbar\omega)\sigma_3 + \frac{1}{2}\lambda\sigma_1,$$

mit Hilfe von

$$\tilde{V}_{\text{av}}^2 = (\hbar\Omega)^2 \cdot \mathbf{1}, \quad \hbar\Omega = \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega)^2 + \lambda^2},$$

und erhalten so den Zeitentwicklungsoperator

$$e^{-it\tilde{V}_{\text{av}}/\hbar} = \cos(\Omega t) \cdot \mathbf{1} - (i/\hbar\Omega) \sin(\Omega t) \tilde{V}_{\text{av}}.$$

Dieser ist periodisch mit Frequenz Ω (Rabi-Oszillation).

Wie in der Physik üblich, bezeichnen wir die Eigenvektoren von σ_3 mit $|\uparrow\rangle$ bzw. $|\downarrow\rangle$; also

$$\sigma_3|\uparrow\rangle = +|\uparrow\rangle, \quad \sigma_3|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle.$$

Für $|\tilde{\psi}(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$ ergibt sich dann

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-it\tilde{V}_{\text{av}}/\hbar}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \left(\cos(\Omega t) - i\frac{\omega_0 - \omega}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right) - |\downarrow\rangle \frac{i\lambda}{2\hbar\Omega} \sin(\Omega t).$$

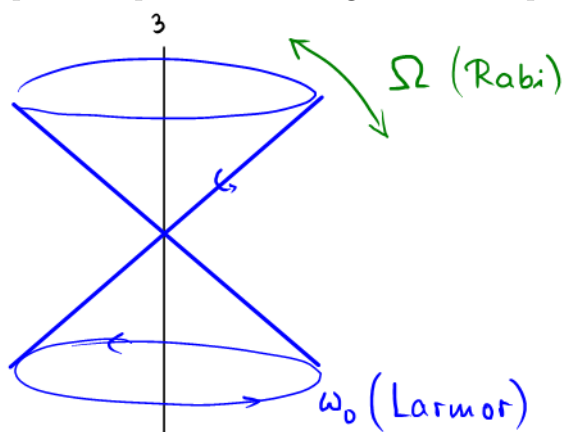
Im Resonanzfall ($\omega = \omega_0$) gilt $\Omega = \lambda/2\hbar$, und das Ergebnis vereinfacht sich zu

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\uparrow\rangle \cos(\Omega t) - |\downarrow\rangle i \sin(\Omega t);$$

das alles im Wechselwirkungsbild. Rücktransformation (der Kürze halber nur für $\omega = \omega_0$) in die zeitunabhängige Basis liefert

$$|\psi(t)\rangle = e^{-itH_0/\hbar}|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\uparrow\rangle e^{-i\omega_0 t} \cos(\Omega t) - |\downarrow\rangle e^{i\omega_0 t} i \sin(\Omega t).$$

Die Spinachse pendelt also langsam mit Frequenz Ω , während sie schnell mit Frequenz ω_0 präzediert.



8.2.2 Getriebene Übergänge

Wir erinnern an das allgemeine Ergebnis (8.11) und kommen jetzt zur Berechnung von Übergangsraten. Das System sei anfangs ($t = t_0$) in einem Eigenzustand $|\psi_i\rangle$ von H_0 . Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang (beobachtet zur Zeit t) nach $|\psi_f\rangle$ ist

$$W_{f \leftarrow i}(t) = \left| \langle \psi_f | \mathcal{U}(t, t_0) | \psi_i \rangle \right|^2.$$

Unter der Annahme einer sehr schwachen Störung dürfen wir die Entwicklung nach der ersten Ordnung abbrechen,

$$\mathcal{U}(t_1, t_0) \approx \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \tilde{V}(t) dt,$$

und erhalten, falls $\langle \psi_f | \psi_i \rangle = 0$, die Übergangswahrscheinlichkeit

$$W_{f \leftarrow i}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \left\langle \psi_f \left| \int_{t_0}^t \tilde{V}(t) dt \right| \psi_i \right\rangle \right|^2. \quad (8.12)$$

Zur Auswertung der Formel (8.12) sei

$$V = V(t) = \hat{X} F(t)$$

eine zeitabhängige Störung, z.B. durch ein äußeres elektromagnetisches Feld mit Amplitude $F(t)$, welche an das System mit ungestörtem Hamiltonoperator H_0 über den Kopplungsoperator \hat{X} (z.B. ein Dipolmoment) ankoppelt. Wir haben dann

$$\langle \psi_f | \tilde{V}(t) | \psi_i \rangle = e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} F(t) \langle \psi_f | \hat{X} | \psi_i \rangle,$$

und es resultiert

$$\int_{\mathbb{R}} \langle \psi_f | \tilde{V}(t) | \psi_i \rangle dt = \langle \psi_f | \hat{X} | \psi_i \rangle \int_{\mathbb{R}} e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} F(t) dt.$$

Wir nehmen nun an, dass die treibende Kraft $F(t)$ zeitlich begrenzt ist; d.h. sie wird “eingeschaltet” und dann wieder “ausgeschaltet”. (Technisch gesprochen verlangen wir $F \in L^1(\mathbb{R})$.) Unter dieser Bedingung existiert die Fourier-Transformierte $\tilde{F}(\omega) := \int_{\mathbb{R}} F(t) e^{i\omega t} dt$. Für die Übergangswahrscheinlichkeit (im Limes langer Zeitdauer) erhalten wir dann

$$W_{f \leftarrow i} \equiv W_{f \leftarrow i}(\infty) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f | \hat{X} | \psi_i \rangle \right|^2 \left| \tilde{F}(\omega_{fi}) \right|^2, \quad \omega_{fi} := (E_f - E_i)/\hbar;$$

offenbar ist sie gegeben durch das Quadrat des “Übergangsmatrixelements” $\langle \psi_f | \hat{X} | \psi_i \rangle$ multipliziert mit der an der Übergangsfrequenz ω_{fi} ausgewerteten Fourier-Transformierten von $F(t)$.

8.2.3 Spontane Übergänge

Wir erläutern kurz Fermis “Goldene Regel” für die Rate spontaner Übergänge in ein Energiekontinuum von Zuständen.

Beispiel/Motivation. Geladene Materie mit Ladungsstrom J^μ wechselwirkt mit dem (klassischen oder quantisierten) elektromagnetischen Feld A_μ über den Beitrag $\int A_\mu J^\mu d^4x$ zum Wirkungsfunktional. Diese Wechselwirkung manifestiert sich atomphysikalisch in der statischen Coulomb-Wechselwirkung zwischen dem Atomkern und den Elektronen (und natürlich auch den Elektronen untereinander). Fundamental quantenfeldtheoretisch betrachtet bewirkt sie aber primär Prozesse, bei denen Elektronen Photonen emittieren oder absorbieren. Beim spontanen Zerfall eines Atoms aus einem angeregten Zustand in den Grundzustand findet genau ein solcher Fundamentalprozess statt: es wird ein Photon emittiert. Verantwortlich hierfür ist ein (auf $\int A_\mu J^\mu d^4x$ zurück gehender) Term im Hamiltonoperator, in dem die elektrische Ladungsdichte der Elektronen (oder vielmehr ein dem spezifischen Übergang entsprechendes Multipolmoment der Ladungsdichte) mit dem Erzeugungsoperator für ein Photon (mit entsprechendem Drehimpuls) multipliziert wird. \square

Wir betrachten nun die allgemeine Situation von Hamiltonoperatoren $H = H_0 + V$ mit einer zeitunabhängigen Störung V , die Übergänge ins Kontinuum bewirkt. Ausgehend von

$$\langle \psi_f | \tilde{V}(t) | \psi_i \rangle = e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$$

berechnet man aus (8.12) die gemittelte Übergangsrate

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} W_{f \leftarrow i}(T) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \left| \int_0^T e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} dt \right|^2.$$

Nun ist

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \left| \int_0^T e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} dt \right|^2 = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{\sin^2((E_f - E_i)T/2\hbar)}{(E_f - E_i)^2/(2\hbar)^2} = 2\pi\hbar \delta(E_f - E_i).$$

Die δ -Funktion sorgt dafür, dass die Energie in der Zeitentwicklung des autonomen Systems erhalten bleibt. Wenn die verfügbaren Energien E_f einen diskreten Satz bilden, dann wird die Bedingung $E_f = E_i$ generisch nicht erfüllbar sein und kein Übergang stattfinden. Wenn hingegen ein Kontinuum von Energien E_f zur Verfügung steht – z.B. haben wir im obigen Beispiel $E_f = E_0 + \hbar\omega$ mit E_0 (diskret) der Grundzustandsenergie des Atoms und $\hbar\omega$ (kontinuierlich) der vom Photon weggetragenen Energie –, dann wird die Übergangsrate von Null verschieden sein, wenn nicht gerade das Übergangsmatrixelement $\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$ verschwindet. Sind wir nicht an der Rate für Übergänge in spezifische Endzustände interessiert sondern nur an der **Gesamtrate Γ_{tot}** , so ist über alle möglichen Endzustände zu summieren. In diesem Fall wird die energierhaltende δ -Funktion durch die Dichte ρ_f der zugänglichen Endzustände ersetzt:

$$\Gamma_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2 \rho_f.$$

Dieses Ergebnis nennt man **Fermis Goldene Regel**. Es gilt für Störungen V , die schwach genug sind, dass die Störungsentwicklung in erster Ordnung (wie getan) abgebrochen werden kann.

9 Verstehen wir die Quantenmechanik?

(Über die Kopenhagener Deutung & drum herum)

Prolog:

die orthodoxe QM "funktioniert" erwiesenermaßen:

sie gibt einfache Regeln für die Vorhersage & Berechnung physikalischer Prozesse.

↖ vielfach getestet und bestätigt

→ pragmatisch/praktische Sicht: "Shut up and calculate!"

Fragen tauchen auf, wenn die QM konsequent zu Ende gedacht wird.

Hauptfrage: die Linearität der Quantendynamik lässt Superpositionen zu (→ Schrödingers Katze, Wigners Freund; weniger skurrile Beispiele folgen unten). Warum werden solche im makroskopischen Bereich nie beobachtet?!

(Diese Frage hängt mit dem sogenannten "Messproblem" der Quantenmechanik zusammen.)

9.1 Formale Prinzipien der Quantenmechanik

- Jeder (reine) Zustand eines q.m. Systems wird vollständig beschrieben durch einen Strahl $\mathbb{C} \cdot |\psi\rangle$ im Hilbertraum \mathcal{H} (Wellenmechanik für 1 Teilchen: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$). Alle Information steckt im Dichteoperator $\rho_\psi = \langle \psi | \psi \rangle^{-1} |\psi\rangle \langle \psi|$ des Zustands.
- Physikalische Observable (wie Ort, Impuls, ...) sind selbst-adjungierte Operatoren A auf \mathcal{H} (oder einem dichten Unterraum von \mathcal{H}).
- Lineare Dynamik $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$.
- Die möglichen Messwerte einer scharfen idealen "Messung" (was immer das sein mag) von A sind die Eigenwerte $\lambda \in \mathbb{R}$ von A .

Bornsche Regel: die Wahrscheinlichkeit, im Zustand ψ den Wert λ zu messen, ist $\frac{|\langle \phi_\lambda | \psi \rangle|^2}{\langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle \langle \psi | \psi \rangle} = \text{Tr}(\rho_\psi \rho_{\phi_\lambda})$
 (Eigenvektor $A |\phi_\lambda\rangle = \lambda |\phi_\lambda\rangle$).

[Warnung: Formulierung nur okay für A mit diskrettem Spektrum. Andernfalls ist funktionalanalyt. Begriff von Spektralprojektion zu benutzen.]

- Unmittelbar nach einer Messung mit Messergebnis λ ist das q.m. System im Zustand $\mathbb{C} \cdot |\phi_\lambda\rangle$ (\leftarrow "Kollaps" der Wellenfunktion).
 $\hat{=}$ "Welle-Teilchen Dualismus"

Bemerkung: ^(orthodoxe) die Quantentheorie ist fundamental nicht-deterministisch, sagt also selbst bei exakt bekannten Anfangsbedingungen nur Wahrscheinlichkeiten vorher.

(\rightarrow Protest Einstein: "Gott würfelt nicht")

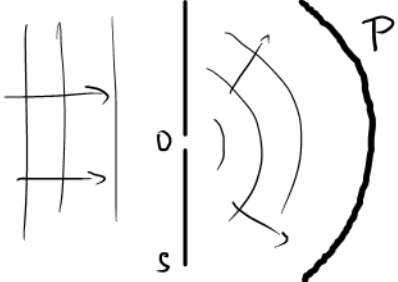
9.2 Diskussionsauszüge vom Solvay-Kongress

Solvay-Kongress (Brüssel, 1927):

Einstein: radioaktive Quelle emittiert sphärische Welle von α -Teilchen in Wilson-Nebelkammer. Warum beobachten wir geradlinige Trajektorien?

Heisenberg/Born: Wellenfunktion kollabiert bei der ersten Ionisation.

Einstein:



nur 1 Ereignis der Detektion auf P
 \leadsto Fernwirkung?!
 (um 2 Ereignisse zu verhindern)

Dirac: isoliertes System (per Defn) nicht beobachtbar (\leftarrow Bohr).

Q-Physik = Theorie ^(nur von) beobachtbarer Vorgänge (\leadsto klass. Determinismus aufgeben).

Störungen zum Zweck der exp. Beobachtung sind Akte des freien Willens des Beobachters; sie sind der einzige Input in eine q.m. Kalkulation (alles andere inhärent unbeobachtbar).

Falls $\psi = \sum c_n \psi_n$ (\leftarrow nicht interferenzfähig), dann $\psi \xrightarrow{\text{(Kollaps)}} \psi_n$.

n ist Zahl, die eine unwiderrufliche Wahl (gemäß Born-R, also $|c_n|^2$) der **Natur** darstellt.

Heisenberg: nicht die Natur, sondern der **Beobachter** trifft die Wahl!

(denn die Wahl wird erst im Moment der Beobachtung physikalische Realität!)

[satirische Kommentare (später):

Einstein: Ist der Mond nur da, wenn ich hingucke?!

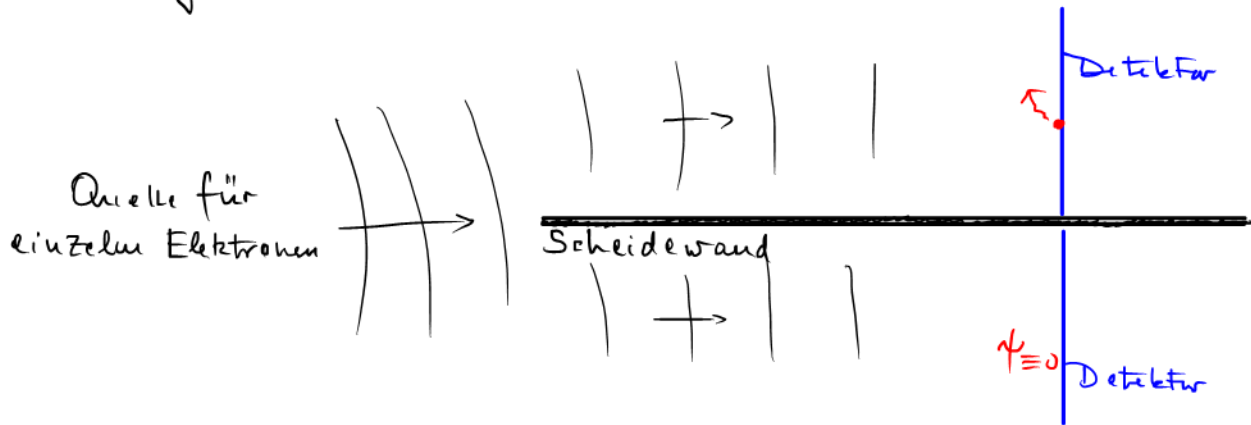
J. Bell: Does the observer need a PhD in physics?]

(\nearrow denn er muss ja die Bornsche Regel befolgen)

\Downarrow
 [N. Bohr: in der mikroskopischen Welt gibt es keine objektive Realität.]

Paradigmatisches Beispiel:

Teilung & Detektion einer Elektronenwelle



Die wellenmechanische Dynamik teilt die Welle in zwei Hälften (oben & unten).

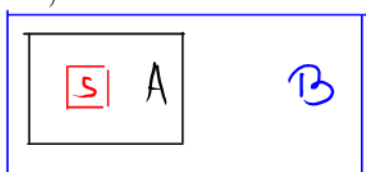
Ist der Detektor ein Gerät für Ortsmessung, so ist nach den Regeln der orthodoxen Quantentheorie bei Detektion des Elektrons auf der einen Seite die Wellenfunktion auf der anderen Seite gleich Null zu setzen (spontaner Kollaps).

Ist der "Detektor" jedoch hinreichend dünn (wenige Atomlagen, z.B. Graphen), so ist statt "Messungs-Kollaps" die Schrödinger-Geg zu lösen, und es kann insbesondere zu wellenmechanischer Interferenz (z.B. Aharonov-Bohm Effekt) kommen. (D)

Wo liegt der "Heisenberg-Schnitt"? (Ab wann ist die Wechselwirkung der Elektronenwelle mit der Umgebung nicht länger wellenmechanisch sondern als "Messung" zu behandeln?)

Spielt die Lage des Heisenberg-Schnitts keine Rolle?!

Und was tun, wenn es eine Hierarchie von Beobachtern gibt?



(← Thesis Everett)

9.3 Bemühungen um vollständige Formulierung

9.3.1 Verborgene Variablen (engl. hidden variable theories)

Annahme (1): Die Wellenfunktion ist nicht alles; es existieren weitere Größen (hidden variables), die Teil des physikalischen Zustands sind. Unter "vernünftigen" Annahmen von Realität & Lokalität sind solche Theorien allerdings ausgeschlossen. (← Verletzung der Bell'schen Ungleichungen in EPR-ähnlichen Experimenten von A. Aspect und anderen)

Nicht ausgeschlossen sind nichtlokale Theorien wie

Bohm'sche Mechanik (Bohm 1952)

≈ de Broglie'sche Führungswellentheorie

(**pilot-wave theory**; de Broglie 1927)

de Broglie / Bohm {
Verborgene Variablen = Teilchenorte.
Schrödinger-Gleichung bestimmt ψ (als Führungswelle)
Teilchendynamik: $\dot{q} = \frac{\omega' \text{stromdichte}}{\omega' \text{dichte}} = \frac{j}{\rho}$,
 $j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \bar{\psi} \nabla \psi$, $\rho = |\psi|^2$.

Bemerkungen

- Keine zusätzlichen Postulate (wie Kollaps der Wellenfunktion, Bohm'sche Regel)
- Bohm-QM ist nichtlokal in dem Grad, wie die Wellenfunktion verschränkt ist (also nicht anders als orthodoxe QM).
- Unter der Annahme der "Quantengleichgewichts-Hypothese" macht Bohm-QM dieselben Vorhersagen wie orthodoxe QM.
- Klassischer Limes sofort verständlich
(vgl. Doppelspalt-Experiment in der orthodoxen QM:
Elektronen, Fullerene (C_{60}) ... Bakterien?)

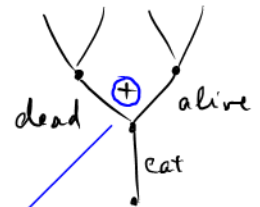
9.3.2 Viele-Welten-Interpretation (Everett, 1957; B. de Witt)
 Many-Worlds- $\mathcal{I} \equiv$ MWI David Deutsch

Kein Kollaps: (universelle) Wellenfunktion besitzt objektive Realität.

Keine verborgenen Variablen.

Realität ist vielfach verzweigter Baum. Jeder mögliche Ast ist realisiert.

Universum befindet sich in einer q.m. Superposition vieler divergenter, nicht-kommunizierender **Parallel-Welten**.



MWI ist "realistisch, deterministisch, lokal".

Beobachter ist Teil der Wellenfunktion:

$$|cat\rangle \otimes |obs\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|alive\rangle + |dead\rangle) \otimes |obs\rangle$$

WW & Dekohärenz $\hookrightarrow \frac{1}{2} |alive\rangle \otimes |A\rangle + \frac{1}{2} |dead\rangle \otimes |A'\rangle$
 verschränkter Zustand (euzl. entanglement)

Bemerkung (H.D. Zeh): Everett-Wellenfunktion \equiv Bohm-Wellenfunktion

9.3.3 Consistent Histories

Consistent (decoherent) Histories (R. Griffiths, R. Omnès;
 M. Gell-Mann, J. Hartle)

QM ohne Beobachter (z.B. Kosmologie!)

History = Sequenz von Ereignissen ($\hat{=}$ Projektionen)

Benütze Schrödinger-Gly für Dynamik zwischen Ereignissen
 stochastische \sim Wahrscheinlichkeiten

9.4 Bell'sche Ungleichungen und ihre Verletzung in der QM

[Hier nicht ausgeführt. Siehe z.B. den Appendix im Buch von Straumann.]