
Grundlagen der Quantentheorie
I. Teil: Nichtrelativistische Quantentheorie

Hendrik van Hees

26. Juni 2024



Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	3
1 Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“	7
1.1 Die historische Entwicklung der Quantenmechanik	7
1.2 Die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen	11
2 Die endgültige Formulierung der Quantentheorie	17
2.1 Basisunabhängige Formulierung der Quantentheorie	17
2.2 Die Grundpostulate der Quantentheorie	20
2.3 Der Hilbertraum	21
2.4 Lineare Operatoren im Hilbertraum	26
2.5 Verträglichkeit von Observablen	30
2.6 Die Heisenbergsche Unschärferelation	33
2.7 Unitäre Abbildungen	34
2.8 Unitäre Symmetrietransformationen	36
2.9 Die Dynamik im Schrödingerbild	39
2.10 Bildtransformationen	43
2.11 Das Heisenbergbild	45
2.12 Der Propagator des harmonischen Oszillators	48
2.13 Der Propagator als Green-Funktion der Schrödingergleichung	51
2.14 Die Green-Funktion für ein freies Schrödingereteilchen	53
2.15 Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)	57
2.16 Die Transformation zwischen zwei Bildern	62
2.17 Gemischte Zustände	63
2.18 Die Bewegungsgleichung für den Statistischen Operator	65
2.19 Zusammengesetzte Systeme	66
2.20 Reduzierte Statistische Operatoren	68
3 Eindimensionale Probleme	71
3.1 Allgemeines zur eindimensionalen Schrödingergleichung	71
3.1.1 Problemstellung	71
3.1.2 Asymptotik der Energieeigenfunktionen	72

Inhaltsverzeichnis

3.1.3	Kontinuitätsgleichung	74
3.1.4	Zur Normierung der Energieeigenfunktionen	77
3.2	Freie Teilchen	81
3.3	Potentialschwelle	82
3.3.1	Totalreflexion ($E_0 = 0.3 V_0$)	84
3.3.2	Kleiner durchlaufender Anteil ($E_0 = 0.5 V_0$)	84
3.3.3	Mittlere Energie: $E_0 = 1.2 V_0$ ($\Delta E = 0.3 V_0$)	85
3.3.4	Mittlere Energie: $E_0 = 1.5 V_0$ ($\Delta E = 0.35 V_0$)	85
3.3.5	Mittlere Energie: $E_0 = 6.0 V_0$ ($\Delta E = 0.69 V_0$)	85
3.3.6	Streuzustände	85
3.4	Potentialtopf	87
3.4.1	Bindungszustände mit gerader Parität	88
3.4.2	Bindungszustände mit ungerader Parität	89
3.4.3	Ungebundene Energieeigenzustände	90
3.4.4	Demonstration des Resonanzphänomens	91
3.4.5	Mittlere Energie: $E_0 = 0.24 V_0$	92
3.4.6	Überlagerung gebundener Zustände	92
3.5	Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden	93
3.6	Der harmonische Oszillator	96
3.6.1	Energieeigenzustände	96
3.6.2	Der Propagator des harmonischen Oszillators	102
3.6.3	Energieeigenfunktionen in der Impulsdarstellung	103
3.6.4	Kohärente und gequetschte Zustände	103
4	Zentralpotentiale	109
4.1	Der Drehimpuls	109
4.2	Das Wasserstoffatom	119
4.2.1	Schwerpunkts- und Relativkoordinaten	120
4.2.2	Laguerre-Polynome	123
4.2.3	Die assoziierten Laguerre-Polynome	127
4.2.4	Die Wasserstoffradialwellenfunktionen	129
5	Streutheorie	133
5.1	Die quantenmechanische Formulierung des Streuvorgangs	133
5.2	Der Streuquerschnitt und das optische Theorem	139
5.3	Die Streu- und die T -Matrix	142
5.4	Die Bornsche Näherung	142
5.5	Beispiel: Streuung am Yukawa-Potential	142
5.6	Partialwellenanalyse	142
5.7	Coulomb-Streuung	142
5.8	Distorted-wave-Born-Näherung (DWBA)	142

6	Galilei-Symmetrie	143
6.1	Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik	143
6.2	Hamiltonsche kanonische Mechanik	148
6.3	Kanonische Transformationen	150
6.4	Das Noether-Theorem (klassisch)	152
6.5	Quantentheoretische Formulierung von Symmetrien	156
6.6	Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie	159
6.7	Nichtrelativistische Elementarteilchen	162
6.8	Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe	167
6.9	Das Noether-Theorem (quantenmechanisch)	170
6.10	Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s	171
6.11	Die Pauli-Gleichung	174
6.12	Der Stern-Gerlach-Versuch	183
7	Pfadintegrale	189
7.1	Die Feynman-Kac-Formel	189
7.2	Der Propagator für das freie Teilchen (Gitterrechnung)	192
7.3	Der Propagator für den harmonischen Oszillator (Gitterrechnung)	193
7.4	Funktionale Methoden	195
7.4.1	Der Propagator des freien Teilchens	196
7.4.2	Propagator des harmonischen Oszillators	198
7.5	Die ζ -Funktionenmethode	198
7.5.1	Freies Teilchen	200
7.5.2	Harmonischer Oszillator	201
7.6	Die Zusammensetzungsregel für Pfadintegrale	203
7.7	Herleitung der Schrödinger-Gleichung	203
7.8	Potentialstreuung	205
8	Vielteilchenquantentheorie	211
8.1	Ein System von zwei ununterscheidbaren Teilchen	211
8.2	Systeme von N ununterscheidbaren Teilchen und Fockraum	212
8.3	Fockraumformulierung für Observablen	215
8.3.1	Die Teilchendichte	215
8.3.2	Einteilchenoperatoren	216
8.3.3	Zweiteilchenoperatoren	219
8.3.4	Formulierung als Quantenfeldtheorie	220
8.3.5	Kanonische Feldquantisierung	221
8.3.6	Das Noether-Theorem im Feldformalismus	225
8.4	Fockräume freier Bosonen und Fermionen	232
8.4.1	Erinnerung an die Statistische Thermodynamik	234
8.4.2	Die Entropie	234

Inhaltsverzeichnis

8.4.3	Das großkanonische Ensemble	235
8.4.4	Phänomenologische Thermodynamik	236
8.4.5	Legendre-Transformationen thermodynamischer Potentiale	238
8.5	Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase	240
8.5.1	Der klassische Grenzfall	244
8.5.2	Das entartete Fermi-Gas	246
8.5.3	Das entartete Bose-Gas	248
A	Gaußintegrale	251
A.1	Das eindimensionale Gaußintegral	251
A.2	Mehrdimensionale Gaußintegrale	253
B	Die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel	255
C	Berechnung unendlicher Reihen und Produkte	257
C.1	Zu Abschnitt 7.4.2	257
D	Die konfluente hypergeometrische Funktion	259
D.1	Definition über eine verallgemeinerte Potenzreihe	259
D.2	Integraldarstellung	260
D.3	Asymptotik für $ z \rightarrow \infty$	262
E	Einige Integrale mit Bose- und Fermiverteilungen	267
E.1	Integrale zum idealen Gas	267
	Literaturverzeichnis	271

Kapitel 1

Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

1.1 Die historische Entwicklung der Quantenmechanik

Die moderne Quantentheorie entwickelte sich aus der Notwendigkeit heraus, die theoretische Beschreibung empirischen Faktenmaterials zu ermöglichen. Viele Entdecker der Quantentheorie sahen sie nur als Notlösung, sie wurden sozusagen durch die Meßergebnisse gezwungen, von der gewohnten klassischen Physik zu abstrahieren und eine Beschreibung zu verwenden, die auf den ersten Blick sehr viel weiter von den direkten Sinneswahrnehmungen entfernt ist.

In diesem Abschnitt soll es darum gehen, die nichtrelativistische Quantentheorie aus einfachen Analogiebildungen zur klassischen Physik „herzuleiten“. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß es grob den historischen Entwicklungsgang nachzeichnet, weist jedoch den unbestreitbaren Nachteil auf, daß dabei Vorstellungen etabliert werden, die nicht unserem modernen physikalischen Weltbild entsprechen.

Wie wir sogleich ausführlich entwickeln werden, hatte sich aus der Planckschen Quantenhypothese durch Einsteins Arbeit über Lichtquanten von 1905 die These etabliert, daß das Licht durch die Wellenvorstellungen des 19. Jh. allein nicht adäquat beschrieben werden kann, und daß obwohl kaum 40 Jahre früher durch Maxwell eine so befriedigende Vereinigung des Elektromagnetismus mit der Optik stattgefunden hatte, die durch die direkte Erzeugung und den Nachweis elektromagnetischer Wellen durch Heinrich Hertz 10 Jahre früher so glänzend ihre experimentelle Bestätigung erfahren hatte. Hinzu kam noch, daß die Maxwell-Theorie für die damaligen Physiker keine allzu leichte Kost war. Was wir heutzutage spätestens im 4. Semester büffeln müssen, war damals ein ausgesprochenes Expertenwissen für die sich gerade herausbildende Zunft der mathematischen oder theoretischen Physiker.

Eine weitere sich gerade mühsam durchsetzende Theorie war die vor allem durch Boltzmann entwickelte kinetische Gastheorie, die aus der Vorstellung von Atomen die makroskopischen Erscheinungen der Materie mit Hilfe statistischer Methoden zu beschreiben versuchte. Dabei waren zu der Zeit Atome noch nicht einmal allgemein als existent anerkannt! Planck selber war ein ausgesprochener Vertreter der klassischen, also phänomenologischen, Thermodynamik und nur widerwillig bediente er sich der Boltzmannschen Abzählmethode, um das Spektrum der Hohlraumstrahlung zu erklären. Er kam dabei durch die Analyse von Experimenten, die seine Berliner Kollegen Rubens und Kurlbaum gerade durchgeführt hatten, zu dem Schluß, daß das Licht nicht in beliebigen Energien von den Wänden des Hohlraumes absorbiert und emittiert wird (wodurch sich ein thermodynamisches Gleichgewicht mit einer wohldefinierten Temperatur einstellt), sondern daß dies eben nur in gewissen Portionen, die er Quanten nannte, geschehen kann, die proportional zur Frequenz der Lichtwelle waren. Ein Lichtquant hatte also den Energieinhalt $E = h\nu = \hbar\omega$, wobei $\hbar = h/(2\pi)$ war. Die Konstante h heißt zu Ehren Plancks das Plancksche Wirkungsquantum, Wirkungsquantum deshalb, weil sie die Dimension „Ener-

gie \times Zeit“ besitzt wie die Wirkung des aus der Mechanik bekannten Hamiltonschen Prinzips.

Es ist wichtig zu bemerken, daß Planck noch nicht dem Licht selber diese Quanteneigenschaften zuordnete, sondern nur dem Absorptions- und Emissionsverhalten der Materie. Nicht zuletzt deshalb war seine Rechnung ausgesprochen kompliziert. Er betrachtete das Strahlungsgleichgewicht zwischen einem harmonischen Oszillator und der elektromagnetischen Strahlung des Hohlraums, um das Spektrum der Strahlung zu gewinnen. Es war dann Einstein in 1905, der diese Quanteneigenschaft explizit dem Licht selber zuwies. Er stellte sich das Licht als Teilchen vor, die die Energie $E = \hbar\omega$ ¹ besitzen und (das war gegenüber der Planckschen Hypothese neu) einen Impuls der Größe $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, wobei \vec{k} der Wellenvektor ist. Dessen Richtung ist die Fortschreiterichtung der Welle, und sein Betrag ist $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, wobei λ die Wellenlänge des Lichtes ist.

Dies ist aber nun eine für die damalige Zeit völlig verrückte Vorstellung, und selbst heute, fast 100 Jahre nach Entdeckung der Quantentheorie, tun wir uns noch schwer damit: Das Licht sollte aus Teilchen bestehen, dessen mechanische Parameter aber durch die Welleneigenschaften desselben Phänomens gegeben waren? Allerdings konnte Einstein auch gewichtige experimentelle Gründe für seine Idee vorbringen.

Lenard hatte nämlich den lichtelektrischen Effekt entdeckt, demzufolge aus Metallen durch die Einstrahlung von Licht Elektronen² herausgeschlagen werden. Allerdings verhielten sich diese Elektronen äußerst merkwürdig. Nach der klassischen Vorstellung der Wechselwirkung von Licht mit geladenen Teilchen³ sollten die Elektronen zum einen nämlich erst nach einer gewissen Einstrahlzeit aus dem Metall herauskommen und dann sollte deren Energie mit der Intensität des Lichtes anwachsen. Diese Erwartung war aber völlig im Widerspruch zu den Lenardschen Experimenten! Die Elektronen kamen ohne merkliche Zeitverzögerung aus dem Metall heraus, und die Energie war unabhängig von der Intensität des Lichtes, wohl aber abhängig von der Frequenz desselben. Lediglich die Anzahl der Elektronen erhöhte sich mit steigender Lichtintensität.

Einstein schrieb eigentlich nur eine wesentliche Formel in seine bahnbrechende Lichtquantenarbeit, nämlich die, daß das Licht ein Teilchenstrom ist, dessen Teilchen eine Energie von $E = \hbar\omega$ hat. Es war eine gewisse „Austrittsarbeit“ notwendig, um die Elektronen aus dem Metallverband herauszulösen. Zusammen mit dem Energiesatz bedeutete das, daß

$$E_{\text{el}} = \hbar\omega - W_A \quad (1.1.1)$$

sein mußte. Die Energie der Elektronen wurde durch die heute noch bei Schulversuchen angewandte Methode der Gegenspannung ermittelt. Die Elektronen werden durch eine Spannung, die entgegen der Emissionsrichtung aus dem Metall angelegt wird, gebremst, und der fließende Strom gemessen. Die Spannung U , bei der gerade kein Strom mehr fließt, muß also der Energie der Elektronen entsprechen. Damit kann man über $E_{\text{el}} = eU$ die Energie der Elektronen messen, und aus der Steigung der Geraden im $E_{\text{el}}-\omega$ -Diagramm das Plancksche Wirkungsquantum bestimmen. Der Wert ergab sich in guter Übereinstimmung mit dem durch die Präzisionsmessungen der Hohlraumstrahlung durch Anfitzen der Planckschen Strahlungsformel ermittelten Resultat. Ironischerweise zeigt aber der Photoeffekt gerade nicht die Quantennatur des elektromagnetischen Feldes. Vielmehr läßt sich der Photoeffekt im Rahmen der modernen Quantentheorie aus der Wechselwirkung einer klassischen elektromagnetischen Welle mit einem gebundenen Elektron erklären.

¹Wir benutzen im folgenden stets die moderne Notation mit $\hbar = h/(2\pi)$.

²nach längerem Hin und Her durch die Untersuchungen J. J. Thomsons (1897) als geladene Teilchen anerkannt

³eine Theorie, die kurz zuvor vor allem durch Lorentz als Elektronentheorie entwickelt worden war, und den „Fremdkörper“ Elektron in die Wellentheorie des Elektromagnetismus einverleibt hatte

1.1. Die historische Entwicklung der Quantenmechanik

Wirklich anerkannt wurde die Lichtquantenhypothese allerdings erst durch die Erklärung des Comptoneffekts (1923). Das ist ein klassischer elastischer Stoßprozeß⁴, der sich mit Hilfe der Lichtquantenhypothese auch so behandeln ließ. Man brauchte nur die Energie- und Impulsbilanz des Prozesses aufzustellen, wobei dann auch die Einsteinsche Beziehung $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, die den Impuls des Lichtes mit der Wellenbeschreibung desselben verknüpfte, zur Anwendung kam. Aus der Energie des einfallenden Photons und dem Impuls sowie dem Streuwinkel des auslaufenden Elektrons konnte die Energie des auslaufenden Photons und damit die beobachtete Frequenzverschiebung des Lichtes aufgrund der Streuung erklärt werden. Die Comptonstreuung ist also seit Einstein als elastische Elektron-Photonstreuung zu deuten. Auch hier ist aber die Lichtquantenhypothese nicht zwingend notwendig, weil in niedrigster Ordnung der korrekte Streuquerschnitt ebenfalls in der semiklassischen Näherung mit einer einstrahlenden klassischen elektromagnetischen Welle und einem quantisierten Elektron folgt.

Ein anderes Mysterium war das 1911 von Rutherford aufgrund seines berühmten „Goldfolienversuchs“ aufgestellte Atommodell. Rutherford hatte α -Teilchen, also zweifach geladene Heliumatome, die aus radioaktiven Zerfällen stammten, auf eine Goldfolie geschossen und bemerkt, daß diese quasi aus gar nichts besteht. Genauer gesagt, die meisten α -Teilchen flogen fast unbehelligt durch die Goldfolie hindurch. Einige wurden allerdings auch stark abgelenkt. Damit war klar, daß die Atome nicht massive positiv geladene Körper, in die die negativen Elektronen eingelagert waren (ein Modell, das als Thomsonsches Rosinenkuchenmodell damals aktuell war) sein konnten. Das Atom mußte vielmehr selbst zusammengesetzt sein aus einem Kern, der nahezu die gesamte Masse des Atoms ausmachte und der entsprechend der Ordnungszahl des Atoms geladen war, und einer der Ladung des Kerns entsprechenden Zahl Elektronen. Rutherford hatte auch sofort den aus dieser Hypothese zu erwartenden Streuquerschnitt der α -Teilchen berechnet, und zwar indem er einfach die von der Himmelsmechanik her bekannten Keplerschen Gesetze benutzte. Die Gravitation wurde natürlich durch die elektrostatischen Kräfte, die der Kern auf das α -Teilchen ausübte, ersetzt, und da hier wegen der gleichnamigen Ladung von α -Teilchen und Kern eine abstoßende Kraft vorliegt, erhält man nur Hyperbeln (also sozusagen Kometenbahnen). Aber mit der gefundenen heute nach Rutherford benannten Streuformel konnte er exakt die gemessenen Wirkungsquerschnitte reproduzieren.

Allerdings ergab sich damit ein neues Bild vom Atom, das jetzt als mikroskopisches Planetensystem angesehen werden mußte (mit dem Kern als Sonne, den Elektronen als Planeten und der elektrostatischen Coulombkraft des Kerns anstelle der Gravitation). Andererseits besagte die klassische Elektrodynamik, daß die Elektronen, die sich der Rutherfordtheorie zufolge auf Ellipsenbahnen um den Kern bewegen würden, eigentlich strahlen müßten, weil beschleunigte Ladungen zufolge der Maxwell'schen Theorie strahlen und auch die abgestrahlte Strahlungsleistung genau ausgerechnet werden konnte.

Das widersprach aber eklatant der Stabilität der chemischen Elemente, die zudem noch wohl definierte Spektren emittierten und keine kontinuierliche Synchrotronstrahlung⁵. Es konnten im Atom also nicht beliebige Bahnen vorliegen, sondern nur ganz bestimmte, die die Stabilität der Atome dadurch gewährleisteten, daß das genau die Bahnen sind, auf denen die Elektronen keine elektromagnetische Strahlung emittieren. Es war natürlich wieder ein Widerspruch zur klassischen Physik, daß es solche Bahnen überhaupt geben kann.

Zum Glück war Thomson an der Doktorarbeit eines jungen Dänen namens Bohr überhaupt nicht interessiert, so daß sich dieser sofort nach Manchester zu Rutherford begab und da in ein ihm völlig unbekanntes Gebiet eindrang. Bohr wurde also sofort mit dem Problem des Planetenmodells konfrontiert, und nach einigen Wochen intensiver Rechnerei konnte er aus der Einsteinschen Lichtquantenhy-po-

⁴vorausgesetzt es sind nach dem Stoß wieder ein Elektron und ein Photon vorhanden, d.h. es treten keine anderen Prozesse auf wie z.B. Paarerzeugung

⁵Das ist der moderne Name für die Strahlung kreisender Ladungen.

1. Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

these sein berühmtes Atommodell gewinnen. Hier war es wieder das Teilchenmodell der klassischen Mechanik, das die Lösung herbeiführte. Anders als in der Makrophysik sollten aber die stabilen Bahnen durch das Plancksche Strahlungsgesetz bestimmt sein. Ein Elektron sollte nur noch dann Energie abstrahlen, wenn es von einer energetisch höher gelegenen Bahn auf eine energetisch niedriger gelegene Bahn „springt“. Die Bahnen wurden demzufolge durch einen bestimmten diskreten Wert für die sog. Wirkungsvariable bestimmt, die ein ganzzahliges Vielfaches von $h = 2\pi \hbar$ sein mußte.

Hatte man die Annahme diskreter Quantenbahnen erst einmal hingenommen, konnte diese Theorie auf „natürliche“ Art und Weise das empirisch bereits seit 1885 bekannte Balmer'sche Seriengesetz der Spektrallinien des Wasserstoffs erklären. Ebenso fand das Ritz'sche Kombinationsprinzip eine theoretische Herleitung, demzufolge die Spektrallinien als Differenzen einfacher Terme beschrieben werden konnten.

Bohr's Theorie wurde alsbald von Sommerfeld mathematisch ausgebaut und konnte auf vielerlei Probleme angewandt werden. Sogar die relativistische Behandlung war kein Problem mehr, und die brachte einen entscheidenden Gewinn in der Präzision, konnte sie doch die sogenannte Feinstruktur der Spektrallinien erklären. Auch die Aufspaltung der Spektrallinien im schwachen Magnetfeld (Zeemann-Effekt) und elektrischen Feld (Stark-Effekt) konnte zumindest qualitativ verstanden werden.

Allerdings gab es schon beim nächstkomplizierteren Atom, dem Heliumatom mit zwei Elektronen, Probleme, die die Grenzen der Bohrschen ad hoc-Hypothese aufzeigten. In der Zwischenzeit hatte de Broglie aber diese Bohrschen Hypothese mit der Einführung der Materiewellen auf die Bedingung stehender Wellen als stationäre Zustände zurückgeführt. De Broglie hatte in seiner Doktorarbeit in einem kühnen Analogieschluß zum Welle-Teilchen-Dualismus beim Licht auch den Teilchen (damals also vornehmlich den Elektronen) Welleneigenschaften zugewiesen. Diese These wurde mit größter Vorsicht aufgenommen, und erst die positive Bewertung der Arbeit durch Einstein, den man sozusagen als externen Gutachter hinzugezogen hatte, ließ diese als Doktorarbeit überhaupt durchgehen.

Die Wellenvorstellung der Teilchen diente nun Schrödinger als Ausgangspunkt, durch eine systematische Analyse des Übergangs von der Wellen- zur Strahlenoptik, die schon Hamilton im 19. Jh. geleistet hatte, die aber zu der Zeit in Vergessenheit geraten war, seine berühmte Wellengleichung aufzustellen, die wir sogleich im nächsten Abschnitt durch einen wesentlich vereinfachten Analogieschluß gewinnen werden. Interessant ist es übrigens zu bemerken, daß Schrödinger zunächst wie de Broglie eine relativistische Gleichung herleiten wollte, aber alsbald große physikalische Probleme bemerkte, die erst einige Jahre später durch die Entwicklung der relativistischen Quantenfeldtheorie gelöst werden sollten.

Schon ein wenig früher hatte Heisenberg in seiner berühmten Arbeit von der „Quantenmechanischen Umdeutung mechanischer Größen“ eine Quantentheorie hergeleitet, die die physikalischen Größen durch abstrakte Zahlenschemata (unendlichdimensionale Matrizen) ersetzte, die von der Bohrschen Bahnvorstellung vollständig abstrahierte. Schrödinger konnte dann relativ schnell zeigen, daß seine „Wellenmechanik“ mathematisch und physikalisch äquivalent zu der in kurzer Zeit von Heisenberg, Born und Jordan ausgearbeiteten Matrizenmechanik war.

Nun ergab sich aber ein für die Physik neuartiges Problem. War die klassische Mechanik mehr oder weniger gradlinig von den Erscheinungen ausgehend zu ihren theoretischen Grundbegriffen gelangt, d.h. die Zuordnung der mathematischen Begriffe zu in der Natur oder im Experiment gegebenen Beobachtungstatsachen war unmittelbar gegeben, hatte man nun einen mathematischen Formalismus gefunden, der sich hervorragend eignete, um die atomaren Spektren zu beschreiben, der aber keinesfalls in allen Teilen physikalisch verstanden war. So ergab sich z.B. durch die Einführung der Schrödinger'schen Wellenfunktion die Frage, was diese physikalisch zu bedeuten hatte oder umgekehrt, wie beim Licht die Teilchenvorstellungen, die sich mit den Photonen verbanden, zu deuten waren. Schrödingers Materiewellen zeigten nämlich die für Wellen typische Eigenschaft der Dispersion, d.h. wenn man ein

1.2. Die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Wellenpaket „mikroskopischer“ Ausmaße vorgab, lief es mit der Zeit unter Einfluß der freien Schrödingergleichung auseinander, und die stehenden Wellen, die Elektronen im Atom beschrieben, zeigten überhaupt keine irgendwie geartete „Lokalisierung“. Wollte man aber die Elektronen in allen Situationen als Teilchen verstehen, konnte das schwer möglich sein, wenn man die Wellen als klassische Wellen auffaßte, die in der makroskopischen Welt, also bei hinreichend grober Messung als Teilchen erscheinen. Beim Licht war es eher umgekehrt. Es fragte sich, wie die Teilcheneigenschaften, die beim Compton-Effekt zu einer so einfachen, quantitativ korrekten Erklärung geführt hatten, mit den typischen Interferenzversuchen vereinbar sein sollten.

Bei der Anwendung der neuen Quantentheorie auf Streuprobleme (1926) fand nun Born, der zusammen mit Jordan in Göttingen maßgeblich an einer systematischen Ausformulierung der noch recht verworrenen Gedanken Heisenbergs zur Matrizenmechanik beteiligt war, eine einfache Erklärung: Die Schrödingerschen Materiefelder waren keine Felder im klassischen Sinne, also sich als kontinuierliche Entität im Raum fortplanzende Ströme von Energie und Impuls. Vielmehr war durch $w(t, \vec{x}) = \psi^*(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeit pro Volumenelement (also die Wahrscheinlichkeitsdichte), zur Zeit t ein Teilchen, dem die Wellenfunktion ψ zugeordnet war, am Ort \vec{x} zu finden. Diese Idee stellte er in einer erläuternden Fußnote seiner Streutheoriearbeit dar und erhielt dafür später den Nobelpreis.

Das bedeutete aber, daß man über die Teilchen generell nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen konnte, was ihre klassischen Meßgrößen wie Ort, Impuls usw. betraf. Dies führte zu der wohl berühmtesten Debatte in der ganzen Wissenschaftsgeschichte, nämlich der zwischen Bohr und Einstein über die begriffliche Klärung der Quantenphysik, die bekanntlich nie zu einer Einigung kam. Auf diese grundlegenden Probleme der Interpretation, insbesondere auf die mit ihr auf's engste verknüpften Heisenbergschen Unschärferelationen (1927) gehen wir weiter unten näher ein, wenn wir den mathematischen Apparat der Quantentheorie etwas weiter entwickelt haben. Genau darum soll es im nächsten Abschnitt gehen.

1.2 Die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall des freien Teilchens, um uns der Idee der Schrödingerschen Materiewellen zu nähern. Ausgangspunkt ist die Einsteinbeziehung für Lichtquanten $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, die de Broglie auf materielle Teilchen angewandt hatte.

Ein freies Teilchen zeichnet sich dadurch aus, daß keinerlei äußere Einflüsse auf es stattfinden. Das einzige, was wir über das Teilchen wissen müssen, um eine Wellengleichung aufzustellen, die es beschreiben soll, ist die sog. *Dispersionsrelation*, d.h. den Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz ω und Wellenvektor \vec{k} . Diese Beziehung können wir aber vermöge der klassischen Mechanik durch den Zusammenhang zwischen Energie und Impuls unter Zuhilfenahme der Einstein–de Broglie–Beziehung gewinnen. Für ein freies nichtrelativistisches Punktteilchen ist die Energie identisch mit der kinetischen Energie, und die ist durch die Beziehung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.2.1)$$

gegeben, wobei \vec{p} der Impuls des Teilchens und m seine Masse ist. Hier ist die Masse der einzige das Teilchen näher charakterisierende Parameter, ansonsten ist es als völlig unstrukturiert punktförmig abstrahiert. Setzen wir die Einstein–de Broglie–Beziehung ein, finden wir die gesuchte Dispersionsrelation:

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2m} \Rightarrow \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}. \quad (1.2.2)$$

1. Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

Die einfachste Form einer Welle ist nun die aus der allgemeinen Wellenlehre bekannte ebene Welle, die durch eine Sinuswelle beschrieben wird. Aus rechentechnischen Gründen verwenden wir hier die Form der Exponentialfunktion und komplexe Zahlen. Wir werden sogleich sehen, daß die Schrödingersche Wellenfunktion ohnehin am bequemsten mit komplexwertigen Funktionen beschrieben wird. Wir setzen also an

$$\psi(t, \vec{x}) = A \exp(-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}). \quad (1.2.3)$$

Die Dispersionsbeziehung (1.2.2) muß nun durch eine Wellengleichung gegeben sein, also eine partielle Differentialgleichung, der ψ identisch genügen muß. Dazu leiten wir den Ansatz (1.2.3) einmal nach t und zweimal nach \vec{x} ab:

$$\partial_t \psi(t, \vec{x}) = -i\omega \psi(t, \vec{x}), \quad \Delta_{\vec{x}} \psi(t, \vec{x}) = -\vec{k}^2 \psi(t, \vec{x}) \quad \text{mit } \Delta = \nabla \cdot \nabla = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2. \quad (1.2.4)$$

Vergleichen wir dies mit (1.2.2) sehen wir, daß die Wellenfunktion der Gleichung

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \psi \quad (1.2.5)$$

zu genügen hat, damit die Dispersionsbeziehung identisch erfüllt wird. Dies ist schon die gesuchte *Schrödingergleichung des freien Teilchens*.

Erinnern wir uns jetzt der Bornschen Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude. Demnach sollte also

$$W(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2 \quad (1.2.6)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte der Teilchen sein, also die Wahrscheinlichkeit pro Volumenelement, zur Zeit t ein Teilchen der Masse m am Ort \vec{x} zu finden. Setzen wir da unsere ebene Welle ein, finden wir für W eine Konstante. Damit aber unsere Welle eine Interpretation in dem Bornschen Wahrscheinlichkeitssinne überhaupt besitzen kann, muß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen überhaupt irgendwo im Raum zu finden, auf 1 normierbar sein. Das ist aber offenbar nicht der Fall, denn eine Konstante läßt sich gewiß nicht mit endlichem Resultat über den ganzen Raum integrieren.

Die ebene Welle entspricht auch ganz und gar nicht unserer Vorstellung von einem Teilchen, ist es doch zu dem einen Zeitpunkt t überall gleich wahrscheinlich, es zu finden, denn es ist für die ebene Welle ja $W = |A|^2 = \text{const.}$ Unserer Teilchenvorstellung käme also ein Wellenpaket viel näher, d.h. eine Lösung der Schrödingergleichung, die auf einem relativ schmalen Gebiet eine große Amplitude besitzt, entsprechend einer hohen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einer mehr oder weniger großen Umgebung⁶ eines Punktes. Weiter weg von diesem Punkt soll das Wellenpaket eine vernachlässigbare Amplitude besitzen.

Nun hat die Schrödingergleichung (1.2.5) die sehr angenehme Eigenschaft, daß sie *linear* ist, d.h. für sie gilt das Superpositionsprinzip. Das bedeutet, daß zu zwei Lösungen ψ_1 und ψ_2 der Schrödingergleichung auch jede Linearkombination der Gestalt $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ eine Lösung derselben ergibt, wobei c_1 und c_2 beliebige komplexe Konstanten sind. Das kann man mit beliebig vielen Lösungen so machen und sogar mit kontinuierlich vielen. Auf diese Weise werden wir sehr natürlich auf die *Fourierdarstellung* der Wellenfunktion geführt, d.h. wir machen den Ansatz:

$$\psi(t, x) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp[-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}]. \quad (1.2.7)$$

⁶Wir werden weiter unten bemerken, daß die Größe dieser Umgebung durch das prinzipiell stets endliche Auflösungsvermögen eines Teilchendetektors, also eines Meßgeräts für die Anwesenheit des Teilchens, bestimmt ist. Im Unterschied zur klassischen Physik weist dies darauf hin, daß in der Quantenphysik stets der Meßprozeß mitberücksichtigt wird, auch wenn von konkreten Meßgeräten gar nicht die Rede ist.

1.2. Die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Dabei ist der Faktor $1/(2\pi)^{(3/2)}$ nur aus Bequemlichkeitsgründen eingeführt. Damit dieser Ansatz die Schrödinger-Gleichung erfüllt, gehen wir davon aus, daß das Integral absolut konvergiert und wir Integration und Differentiation vertauschen können. Unter diesen Bedingungen die Schrödinger-Gleichung auf (1.2.7) angewandt ergibt sofort wieder die schon oben benutzte Dispersionsrelation:

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}. \quad (1.2.8)$$

Diese Dispersionsrelation in (1.2.7) eingesetzt gewährleistet allein schon die Erfüllung der Schrödinger-Gleichung, und zwar für beliebige *Spektralfunktionen* A ! Das bedeutet wir können für A irgendeine Funktion einsetzen, die absolut über $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ integrierbar ist.

Um unsere Forderung nach einem Wellenpaket zu erfüllen, setzen wir die einfachst mögliche Form ein, nämlich eine *Gaußverteilung*. Wegen der allgemein großen Bedeutung von Gaußverteilungen in der Physik wollen wir hier die Fouriertransformation (1.2.7) ausführlich vorrechnen.

Es sei also die Spektralverteilung gegeben zu

$$A(\vec{k}) = N \exp \left[-\frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{4\alpha} \right]. \quad (1.2.9)$$

Wir finden folglich für die Schrödingersche Wellenfunktion gemäß (1.2.7 und (1.2.8):

$$\psi(t, \vec{x}) = N \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{4\alpha} - i \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t + i \vec{k} \vec{x} \right]. \quad (1.2.10)$$

Wir bemerken als erstes, daß sich in diesem Fall die Wellenfunktion in Form eines Produktes aus Wellenfunktionen für jede der drei Raumrichtungen schreiben läßt, d.h. es ist $\psi(t, \vec{x}) = \psi_1(t, x_1) \psi_2(t, x_2) \psi_3(t, x_3)$ mit

$$\psi_1(t, x_1) = N' \int \frac{dk_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(k_1 - k_{01})^2}{4\alpha} - i \frac{\hbar k_1^2}{2m} t + i k_1 x_1 \right]. \quad (1.2.11)$$

Zur Ausführung dieses Integrals berechnen wir zunächst

$$I = \int \frac{dk_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp(-Ak_1^2 + 2ABk_1 + C) \quad (1.2.12)$$

Zunächst führen wir im Argument der Exponentialfunktion eine quadratische Ergänzung und eine Substitution $k'_1 = k_1 - B$ aus. Dann folgt

$$I = \exp(C + AB^2) \int \frac{dk'_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp(-Ak_1'^2). \quad (1.2.13)$$

Verbleibt das letzte Integral zu berechnen. Dazu bemerken wir, daß dieses Integral für A mit positivem Realteil existiert. Für reelle A ist das Integral positiv, und wir können schreiben

$$\begin{aligned} I &= \exp(C + AB^2) \sqrt{\int dk_1 \int dk_2 \exp[-A(k_1^2 + k_2^2)]} \\ &= \exp(C + AB^2) \sqrt{\int_0^\infty K dK \int_0^{2\pi} \exp(-AK^2)} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp(C + AB^2). \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

1. Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

Damit haben wir das Integral vollständig berechnet. Es sind nur noch die Werte für die Parameter A , B und C einzusetzen. Am bequemsten ist die folgende Form:

$$\psi_t(t, x_1) = \frac{N'}{2\pi} \sqrt{\frac{4\pi m\alpha}{m^2 + 2i\hbar\alpha t}} \exp\left[-\frac{m^2\alpha}{m^2 + 4\hbar^2\alpha^2 t^2} \left(x_1 - \frac{\hbar k_{01} t}{m}\right)^2\right] \exp[i\Phi(t, x_1)] \quad (1.2.15)$$

mit der Phase

$$\Phi(t, x_1) = \frac{m\alpha}{m^2 + 4\hbar^2\alpha^2 t^2} \left(2\hbar\alpha t x_1^2 + \frac{m x_1 k_{01}}{\alpha} - \frac{\hbar k_{01}^2 t}{2\alpha}\right). \quad (1.2.16)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich daraus zu

$$w_1(t, x_1) = \frac{|N'|^2 \sqrt{4\alpha m}}{\sqrt{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2}} \exp\left\{-\frac{2\alpha m^2}{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2} \left[x_1 - \frac{k_{01} \hbar}{m} t\right]^2\right\}. \quad (1.2.17)$$

Die Normierungskonstante N' ist so zu bestimmen, daß

$$\int dx_1 w_1(t, x_1) = 1 \quad (1.2.18)$$

wird, entsprechend der Forderung, daß das Teilchen mit Wahrscheinlichkeit 1 an einem Ort mit der 1-Komponente $x_1 \in \mathbb{R}$ gefunden wird. Unter Verwendung des Integrals (1.2.14) ergibt sich

$$|N'| = \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{1/4}. \quad (1.2.19)$$

Wir bemerken, daß die Normierungskonstante *zeitunabhängig* ist. Weiter ist klar, daß bisher keinerlei Hinweise aus irgendeiner Forderung aufgetreten sind, wie der Phasenfaktor (also eine komplexe Zahl vom Betrag 1) von N bzw. N' bestimmt werden soll.

Bevor wir in der allgemeinen Entwicklung der Quantentheorie fortfahren, die diese Beobachtungen klären wird, wollen wir kurz die Implikationen betrachten, die unser spezielles Resultat ergeben hat. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(t, \vec{x})$, die sich durch Multiplikation von drei Faktoren der Form w_1 ausdrückt, ist wieder ein Gaußsches Wellenpaket. Das verwundert weiter nicht, denn Gaußsche Glockenkurven sind invariant unter Fouriertransformationen. Physikalisch interessant sind aber die Parameter dieses Gaußschen Pakets.

Wir erinnern kurz an die Bedeutung dieser Parameter. Die allgemeine Form einer Gaußverteilung ist

$$w_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}\right]. \quad (1.2.20)$$

Der Erwartungswert für x ist

$$\langle x \rangle = \int dx x w_G(x) = x_0. \quad (1.2.21)$$

Das rechnet man übrigens am geschicktesten durch Ableiten des Normierungsintegrals nach x_0 aus. Das ergibt natürlich wegen des von x_0 unabhängigen Wertes 0. Die Ableitung ist aber $\langle x - x_0 \rangle / \sigma = 0$. Genauso findet man die Varianz, also die mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert. Der Trick mit der Ableitung ergibt

$$\left\langle \frac{\sigma - (x-x_0)^2}{\sigma^2} \right\rangle = 0 \rightarrow \Delta x^2 = \langle (x-x_0)^2 \rangle = \sigma. \quad (1.2.22)$$

1.2. Die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Wenden wir das auf (1.2.17) an, ergibt sich

$$\langle \vec{x} \rangle = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} t, \quad (1.2.23)$$

d.h. der Erwartungswert des Ortes des Teilchens ergibt die freie Bewegung eines Newtonschen Massepunktes mit dem Impuls $\hbar \vec{k}_0$. Die Ortsunschärfe wächst allerdings mit der Zeit, gemäß

$$\Delta x^2 = \frac{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2}{4\alpha m^2}. \quad (1.2.24)$$

Zur Zeit $t = 0$ beträgt die Ortsunschärfe

$$\Delta x^2|_{t=0} = \frac{1}{4\alpha}. \quad (1.2.25)$$

Für unsere Anfangsverteilung für den Impuls war sie hingegen:

$$\Delta p^2 = \hbar^2 \Delta k^2 = \alpha. \quad (1.2.26)$$

Es gilt also

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (1.2.27)$$

Wir werden im nächsten Abschnitt zeigen, daß dies die unterste überhaupt mögliche Grenze für den Ausdruck $\Delta x \Delta p$ ist (*Heisenbergsche Unschärferelation*), und daß dies genau für die Gaußverteilung, die wir als Anfangsbedingung für die Schrödingergleichung angegeben hatten, zutrifft. In gewissem Sinne ist unser Gaußsches Wellenpaket das Beispiel, das größtmögliche Annäherung an ein klassisches Teilchen bietet, die im Rahmen der Quantentheorie möglich ist. Da der Impuls für das freie Teilchen eine Erhaltungsgröße ist, ändert sich auch dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht mit der Zeit, und die anfängliche Impulsunschärfe bleibt erhalten. Entsprechend dieser Impulsunschärfe wird jedoch die Ortsunschärfe mit der Zeit immer größer, d.h. die anfängliche „Minimalität“ der Orts-Impulsunschärfe relation geht mit der Zeit verloren, und zwar desto schneller, je größer die Impulsunschärfe anfänglich war.

1. Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

Kapitel 2

Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

2.1 Basisunabhängige Formulierung der Quantentheorie

Wir wollen in diesem Abschnitt unsere eben gewonnenen Erfahrungen mit der einfachen Wellenlösung der Schrödingergleichung nutzen, um die Physik der Schrödingergleichung zu präzisieren und auf Teilchen in äußeren Potentialfeldern zu erweitern.

Zunächst bemerken wir, daß die oben mehr heuristisch gefundene Methode zur Gewinnung von Lösungen der freien Schrödingergleichung eine sehr einfache mathematische Erklärung besitzt. Betrachten wir einmal für einen Moment die Lösung dieser Gleichung als rein mathematische Aufgabe, d.h. wir fragen uns, welche Eigenschaften die Lösungen dieser Gleichung bestimmen. Die Schrödingergleichung besitzt die Gestalt:

$$i\hbar\partial_t\psi(t,\vec{x}) = -\frac{\hbar^2\Delta_x}{2m}\psi(t,\vec{x}). \quad (2.1.1)$$

Aufgrund der Linearität dieser Gleichung bietet sich ein Ansatz in Form einer Fouriertransformierten an:

$$\psi(t,\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d\omega d^3\vec{k}}{(2\pi)^2} \tilde{\psi}(\omega,\vec{k}) \exp(-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}). \quad (2.1.2)$$

Diesen Ansatz in die Gleichung eingesetzt ergibt eine rein algebraische Gleichung

$$\left(\omega - \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}\right)\tilde{\psi}(\omega,\vec{k}) = 0. \quad (2.1.3)$$

Damit muß aber $\tilde{\psi}$ zu einer Diracschen δ -Distribution proportional sein, die das Verschwinden der Klammer auf der rechten Seite sicherstellt:

$$\tilde{\psi}(\omega,\vec{k}) = \sqrt{2\pi}A(\vec{k})\delta\left(\omega - \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}\right), \quad (2.1.4)$$

wobei A eine beliebige Funktion des Wellenvektors \vec{k} sein darf¹. Wir werden durch Resubstitution dieser allgemeinen Lösung in (2.1.2) wieder auf unser schon heuristisch gefundenes Resultat (1.2.7)

¹der Faktor $\sqrt{2\pi}$ dient wieder nur dazu, unsere Konvention einzuhalten, auf deren Wahl wir sogleich noch zurückkommen werden.

geführt:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp\left(-i \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t + i \vec{k} \vec{x}\right) \quad (2.1.5)$$

geführt. Wir erkennen, daß die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung eine willkürliche Funktion $A(\vec{k})$ enthält. Diese Funktion hatten wir oben als Gaußpaket gewählt, um ein Beispiel vor Augen zu haben. Hier wollen wir nun die physikalische Bedeutung dieser Funktion näher untersuchen.

Die Schrödingergleichung beschreibt offenbar, ganz unabhängig von der Interpretation der Wellenfunktion selber, einen dynamischen Prozeß in Raum und Zeit. Die Lösungen haben nämlich gemäß (2.1.5) Wellencharakter, beschreiben also einen Bewegungsvorgang. Hier haben wir es mit freien Wellen zu tun, also solchen, die keine Quelle besitzen. Wie wir aus der Elektrodynamik oder der Vorstellung von Wasserwellen her wissen, besitzen solche Gleichungen stets die Freiheit der Wahl der Anfangsbedingungen. Die spezifische Situation der Wellenerscheinung wird durch diese Anfangsbedingungen determiniert, und diese Anfangsbedingungen sind durch die Erregung der Wellen zu einem früheren Zeitpunkt bestimmt. Damit beschreibt die Schrödingergleichung einen **kausalen Vorgang**: Aus der „Wellenerregung“ am Anfang der Ausbreitung derselben läßt sich der gesamte Vorgang nach Beendigung der Erregung vollständig aus der Bewegungsgleichung (hier also der Schrödingergleichung) berechnen.

Kehren wir wieder zur mathematischen Analyse der Schrödingergleichung zurück. Die Freiheit der Wahl der Anfangsbedingung ist bei unserem Zugang zur Beschreibung der Lösung durch eine Fouriertransformation (2.1.5) in der Willkür der Wahl der Wellenzahlverteilungsfunktion $A(\vec{k})$ versteckt. Diesem Mangel können wir aber sofort abhelfen, denn für $t = 0$ gilt gemäß (2.1.5)²:

$$\begin{aligned} \psi(0, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp(i \vec{k} \vec{x}) \Leftrightarrow \\ A(\vec{k}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{y}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(0, \vec{y}) \exp(-i \vec{k} \vec{y}). \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

Nun können wir aber auch ohne Umweg über den Wellenzahlbereich der Fouriertransformation die Zeitentwicklung angeben, indem wir dieses Resultat in (2.1.5) einsetzen:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{y}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(0, \vec{y}) \exp\left[-i \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t + i \vec{k}(\vec{x} - \vec{y})\right]. \quad (2.1.7)$$

Könnten wir nun die Integration nach \vec{k} mit der nach \vec{y} vertauschen, könnten wir schreiben

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{y} U(t, \vec{x}, \vec{y}) \psi(0, \vec{y}). \quad (2.1.8)$$

Das bedeutet, daß $\psi(t, \vec{x})$ sich durch eine lineare Abbildung aus der willkürlich vorgegebenden Anfangsbedingung $\psi(0, \vec{y})$ berechnen läßt. Nun zeigt aber der Grenzfall $t \rightarrow 0$ schon, daß U keine gewöhnliche Funktion sein kann. Denn dann muß sich ja auf der rechten Seite $\psi(0, \vec{x})$ ergeben, und zwar für alle Funktionen $\psi(0, \vec{x})$, die nach \vec{x} quadratintegrierbar sind (und die folglich auf 1 gemäß der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation normiert werden können), denn mehr brauchen wir physikalisch von dem Anfangszustand $\psi(0, \vec{x})$ nicht zu fordern. Das bedeutet aber, daß in diesem Grenzfall

$$\text{w-lim}_{t \rightarrow 0^+} U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (2.1.9)$$

²Wir wählen $t = 0$ willkürlich als besonders bequemen „Anfangszeitpunkt“.

2.1. Basisunabhängige Formulierung der Quantentheorie

gilt, wobei δ die Diracsche δ -Distribution ist. Wir haben der Genauigkeit halber auf der linken Seite den schwachen Limes (weak limit) geschrieben um zu kennzeichnen, daß die Limesbildung im Sinne der Distributionentheorie zu verstehen ist, d.h. erst nach Integration von $U(t, \vec{x}, \vec{y})\phi(\vec{y})$ mit ϕ aus einem geeigneten Testfunktionenraum über \vec{y} kann ein gewöhnlicher Limes gebildet werden.

Es ist somit zu erwarten, daß auch für $t > 0$ der **Propagator** $U(t, \vec{x}, \vec{y})$ eine Distribution sein wird. Wir können nun aber durch Regularisierung dieser Distribution ihre konkrete Gestalt ausrechnen. Dazu nutzen wir die Tatsache, daß die hier auftretenden Distributionen als Grenzwerte komplexer Funktionen dargestellt werden können. Betrachten wir nämlich den durch naives Vertauschen der beiden Integrationen in (2.1.8) Ausdruck, erkennen wir, daß wir durch die Ersetzung $t \rightarrow t - i\epsilon$ mit $\epsilon > 0$, wieder auf ein wohldefiniertes Gaußintegral zurückgeführt werden:

$$U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \text{w-lim}_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \exp \left[-\frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} (\epsilon + it) + i\vec{k}(\vec{x} - \vec{y}) \right]. \quad (2.1.10)$$

Wir wenden wieder unsere Formel (1.2.14) an, und finden sofort

$$U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{im(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\hbar t} \right], \quad (2.1.11)$$

wobei die Problematik, auf welchem Riemannblatt die Wurzel für $\epsilon \rightarrow 0$ zu nehmen ist, hier irrelevant ist, weil sich die verschiedenen Möglichkeiten nur um einen von t , \vec{x} und \vec{y} unabhängigen Faktor vom Betrag 1 unterscheiden, und ein solcher „Phasenfaktor“ ist, wie wir im vorigen Abschnitt schon gesehen haben, unerheblich für den physikalischen Gehalt der Wellenfunktion.

Jetzt können wir aber die allgemeine mathematische Struktur, die hinter der Schrödingergleichung steckt, klar erkennen: Da die Gleichung linear ist, bilden alle Lösungen zusammen einen komplexen linearen Raum (Vektorraum mit \mathbb{C} als Skalarkörper). Damit die **Bornsche Interpretation** der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude sinnvoll ist, muß eine physikalisch sinnvolle Wellenfunktion weiter **quadratintegrierbar** sein, d.h. eine physikalische Wellenfunktion $\psi(t, \vec{x})$ muß nicht nur der Schrödingergleichung genügen, sondern es muß auch das Normierungsintegral $\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x})$ existieren. Diese Funktionen³ bilden einen Funktionenraum, den man als **Hilbertschen Funktionenraum** L^2 bezeichnet. Die Norm einer in diesem Raum gelegenen Funktion ist gerade durch das Normierungsintegral gegeben.

Allerdings besitzt dieser Raum noch eine viel weitergehende Struktur. Seien dazu ψ und ϕ beides L^2 -Funktionen. Dann existiert das Integral

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}), \quad (2.1.12)$$

und die Klammer $\langle \psi | \phi \rangle$ besitzt alle Eigenschaften einer positiv definiten Sesquilinearform, die den Funktionenraum zu einem **Hilbertraum** macht, also einem Vektorraum mit Skalarprodukt.

Wir erwähnen hier ohne Beweis, daß dieser Raum auch vollständig ist, d.h. jede Funktionenfolge, die bzgl. der durch das Skalarprodukt induzierten Norm eine **Cauchyfolge** ist, besitzt einen in L^2 gelegenen Grenzwert.

An diesem Resultat erkennen wir, daß die Aufgabe, die Dynamik eines Teilchens zu beschreiben, durch einen linearen Operator, der auf dem Raum der quadratintegrierbaren Ortsfunktionen wirkt, gegeben ist, den wir in Form des Integrals (2.1.8) geschrieben haben.

³Wir gehen nicht auf die Subtilität ein, daß wir eigentlich Klassen von Funktionen, die sich voneinander nur auf Lebesgueschen Nullmengen unterscheiden, betrachten müßten

In den folgenden Abschnitten fassen wir die nunmehr grob skizzierte mathematische Struktur der Quantentheorie etwas ausführlicher zusammen. Wir stellen dazu der Einfachheit halber diese Struktur in Form von Grundpostulaten an die Spitze unserer Betrachtungen.

2.2 Die Grundpostulate der Quantentheorie

Wir stellen zunächst die Struktur der Quantentheorie in einigen **Grundpostulaten** zusammen und erläutern sie in den folgenden Abschnitten genauer:

1. Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch einen normierten Vektor $|\psi\rangle$ eines Hilbertraums \mathcal{H} repräsentiert.
2. Jede physikalische Observable O wird durch einen (auf einem dichten Teilraum von \mathcal{H} definierten) selbstadjungierten Operator \mathbf{O} repräsentiert.

Die möglichen Meßwerte der Observablen sind durch die (verallgemeinerten) Eigenwerte des ihr zugeordneten Operators gegeben.

3. Die (verallgemeinerten) Eigenvektoren $|o, \alpha\rangle$ des Operators \mathbf{O} zum (verallgemeinerten) Eigenwert o können normiert und zueinander orthogonal bzw. auf die δ -Distribution normiert gewählt werden, d.h. so, daß

$$\langle o', \alpha' | o, \alpha \rangle = \delta o' - o \delta(\alpha' - \alpha). \quad (2.2.1)$$

Dabei bezeichnet α einen oder mehrere Parameter, die im Falle einer Entartung des Eigenraums die Eigenvektoren durchnummerieren. Diese Parameter können sowohl kontinuierliche als auch diskrete Werte durchlaufen, und die δ -Symbole in Gl. (2.2.1) bezeichnen entsprechend δ -Distributionen oder Kronecker- δ 's. Ist das System bei einer Messung der Observablen O im normierten Zustand $|\psi\rangle$ präpariert, so ist die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung der Observablen O den Eigenwert o des ihr zugeordneten Operators \mathbf{O} zu finden, ist durch die **Bornsche Formel**

$$w_\psi(o) = \sum \int d\alpha |\langle o, \alpha | \psi \rangle|^2 \quad (2.2.2)$$

gegeben, wobei das kombinierte Summations-Integrations-Symbol den kontinuierlichen und die Summe über den diskreten Teil des Parameters α bedeutet.

4. Die Dynamik des Systems wird eindeutig durch die Zuordnung eines selbstadjungierten nach unten beschränkten Operators \mathbf{H} , des **Hamiltonoperators** des Systems, bestimmt.

Ist \mathbf{O} der die Observable O repräsentierende selbstadjungierte Operator, so repräsentiert die kovariante Zeitableitung

$$\dot{\mathbf{O}} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}, \mathbf{H}] + \partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O} \quad (2.2.3)$$

die zeitliche Ableitung $\dot{\mathbf{O}}$ der Observablen O .

2.3 Der Hilbertraum

Erinnern wir uns zur Erläuterung dieser Grundpostulate zunächst an den Begriff des **Hilbertraums**. Dieser ist zunächst einmal ein **Vektorraum** über dem Körper der komplexen Zahlen, d.h. für irgendwelche Elemente $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle \in \mathcal{H}$ und Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ gibt es die Verknüpfung der **Addition von Vektoren** $|\psi\rangle + |\phi\rangle$ und der **Multiplikation eines Vektors mit einer komplexen Zahl** $\lambda_1 |\psi\rangle$, die folgende Eigenschaften besitzen:

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \quad (2.3.1)$$

$$(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + |\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + (|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle) \quad (2.3.2)$$

$$\exists 0 \in \mathcal{H} : |\psi_1\rangle + 0 = |\psi_1\rangle, \quad (2.3.3)$$

$$\lambda_1(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_1|\psi_2\rangle, \quad (2.3.4)$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2)|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_1\rangle, \quad (2.3.5)$$

$$\underbrace{0}_{\in \mathbb{C}} |\psi_1\rangle = \underbrace{0}_{\in \mathcal{H}}, \quad 1|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.3.6)$$

Daraus ergibt sich unter anderem auch, daß es zu jedem Vektor $|\psi\rangle$ einen Vektor $|- \psi\rangle := (-1)|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ gibt, so daß $|\psi\rangle + |- \psi\rangle = 0$. Wegen (2.3.6) und (2.3.5) ist nämlich

$$0 = (1 - 1)|\psi\rangle = 1|\psi\rangle + (-1)|\psi\rangle =: |\psi\rangle + |- \psi\rangle. \quad (2.3.7)$$

Weiter ist auf dem Hilbertraum noch ein **Skalarprodukt**, das zwei Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ auf eine komplexe Zahl $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ abbildet, definiert. Es besitzt die folgenden Eigenschaften:

$$\langle \psi_1 | \lambda_1 \psi_2 + \lambda_2 \psi_3 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle, \quad (2.3.8)$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \quad (2.3.9)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (2.3.10)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0. \quad (2.3.11)$$

Eine wichtige Folgerung aus (2.3.8) und (2.3.9) ist

$$\langle \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 | \psi_3 \rangle = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle, \quad (2.3.12)$$

d.h. das Skalarprodukt ist bzgl. des zweiten Arguments **linear** aber bzgl. des ersten Arguments **antilinear**, d.h. die Zahlenfaktoren in der Linearkombination sind beim Herausziehen aus dem ersten Argument komplex zu konjugieren. Der Beweis folgt einfach aus (2.3.9) und (2.3.8) sowie einfachen Eigenschaften der komplexen Konjugation für komplexe Zahlen:

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 | \psi_3 \rangle &= (\langle \psi_3 | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle)^* = (\lambda_1 \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle)^* \\ &= \lambda_1^* \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle^* + \lambda_2^* \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle^* = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle. \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Auf dem Hilbertraum wird mit dem Skalarprodukt zugleich auch eine **Norm** definiert:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \geq 0. \quad (2.3.14)$$

Diese Definition erfüllt in der Tat die Eigenschaften einer Vektorraumnorm, d.h. es gilt

$$\|\lambda\psi\| = |\lambda| \|\psi\|. \quad (2.3.15)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Der Beweis ist eine sehr einfache *Übungsaufgabe*.

Etwas schwieriger ist der Beweis der **Dreiecksungleichung**

$$\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\|. \quad (2.3.16)$$

Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} \|\psi_1 + \psi_2\|^2 &= \langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \\ &= \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Nun ist (2.3.16) offenbar gleichbedeutend mit

$$\|\psi_1 + \psi_2\|^2 \stackrel{?}{\leq} \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 + 2\|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (2.3.18)$$

Wir müssen also nachweisen, daß

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 2\operatorname{Re}(\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle) \stackrel{?}{\leq} 2\|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (2.3.19)$$

Dazu beweisen wir die auch für sich genommen wichtige **Cauchy-Schwarzsche Ungleichung**

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \leq \|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (2.3.20)$$

Wir können dabei annehmen, daß $|\psi_1\rangle \neq 0$ und $|\psi_2\rangle \neq 0$, denn andernfalls wären beide Seiten der Ungleichung = 0, und somit die Behauptung erfüllt.

Zum Beweis von (2.3.20) setzen wir

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle - \frac{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}{\|\psi_2\|^2} |\psi_2\rangle. \quad (2.3.21)$$

Dann folgt aus der positiven Definitheit des Skalarprodukts (2.3.10)

$$0 \leq \langle \psi | \psi \rangle = \|\psi_1\|^2 + \frac{|\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2}{\|\psi_2\|^2} - 2 \frac{|\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2}{\|\psi_2\|^2} = \|\psi_1\|^2 - \frac{|\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2}{\|\psi_2\|^2}, \quad (2.3.22)$$

und daraus folgt durch einige einfache Umformungen (2.3.20). Daraus ergibt sich aber sofort auch (2.3.19), denn es gilt

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \leq |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle| \leq 2|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \leq 2\|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (2.3.23)$$

Damit ist die Dreiecksungleichung (2.3.18) bewiesen.

Physikalisch impliziert die Hilbertraumstruktur der Zustände das **Superpositionsprinzip**, dem gemäß für zwei oder mehr Zustandsvektoren auch jede Linearkombination wieder einen möglichen Zustand repräsentiert.

Wichtige **Beispiele** für konkrete Hilberträume, die in der Quantentheorie eine Rollen spielen, sind der **Hilbertsche Funktionenraum der quadratintegralen Funktionen** $L^2(\mathbb{R}^3)$ und der **Hilbertsche Folgenraum der quadratsummierbaren Folgen** ℓ^2 .

Der erste Fall $L^2(\mathbb{R}^3)$ entspricht der Formulierung der Quantentheorie als **Schrödingersche Wellenmechanik**. Dabei werden die quantenmechanischen Zustände durch Funktionen $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ repräsentiert, für die das Integral

$$\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 \quad (2.3.24)$$

2.3. Der Hilbertraum

existiert. Für zwei solcher Funktionen existiert dann auch das Skalarprodukt

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_1^*(\vec{x}) \psi_2(\vec{x}). \quad (2.3.25)$$

Es ist eine einfache *Übungsaufgabe* nachzuweisen, daß die Axiome (2.3.1-2.3.6) und (2.3.8-2.3.11) gelten. Hinsichtlich (2.3.11) müssen wir allerdings vereinbaren, daß wir Funktionen, für die (2.3.24) verschwindet mit der Funktion $\psi(\vec{x}) \equiv 0$ identifizieren. Das bedeutet anders ausgedrückt, daß zwei Funktionen bereits als gleich angesehen werden, wenn sie sich nur in abzählbar vielen Stellen des \mathbb{R}^3 voneinander unterscheiden.

Entsprechend besteht der Folgenraum ℓ^2 aus allen Folgen $\psi = (\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, für die

$$\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \quad (2.3.26)$$

existiert, und das Skalarprodukt wird durch

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{1n}^* \psi_{2n} \quad (2.3.27)$$

definiert. Die Darstellung der quantenmechanischen Zustandsvektoren als solche Folgen führt zur Formulierung der Quantentheorie als **Heisenbergsche Matrizenmechanik**.

Der Zusammenhang zwischen diesen verschiedenen Darstellungen der Quantentheorie ist durch den **Diracschen darstellungsfreien Formalismus** im abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} , wie wir ihn hier zusammenfassen, gegeben. Wir kommen darauf weiter unten noch zurück.

Betrachten wir also wieder den abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} . Die wichtigste Begriffsbildung, die wir aus dem gegebenen Axiomensystem aufbauen können, ist der der **Konvergenz** und der damit zusammenhängenden **vollständigen Orthonormalsysteme**. Eine Folge von Vektoren $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ heißt konvergent gegen einen Vektor $|\psi\rangle$ im Sinne der Hilbertraum-Norm (2.3.14), wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi\| = 0 \quad (2.3.28)$$

gilt.

Im folgenden wird weiterhin postuliert, daß der **Hilbertraum vollständig** ist, d.h. jede **Cauchy-Folge** zu einem Vektor im Hilbertraum konvergiert. Dabei heißt $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ definitionsgemäß Cauchy-Folge genau dann, wenn zu jedem $\epsilon > 0$ eine natürliche Zahl $N \in \mathbb{N}$ existiert, so daß für alle $m, n \in \mathbb{N}$ mit $m, n > N$

$$\|\psi_m - \psi_n\| < \epsilon \quad (2.3.29)$$

gilt. Wir bemerken ohne Beweis, daß sowohl der Hilbertsche Funktionenraum L^2 als auch der Hilbertsche Folgenraum ℓ^2 vollständig ist (zu solchen eher mathematischen Fragestellungen sei auf [FK07, FK08, FK06] verwiesen).

Eine Folge von Vektoren $(|u_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ heißt **Orthonormalsystem**, wenn für alle $m, n \in \mathbb{N}$

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn} := \begin{cases} 1 & \text{falls } m = n, \\ 0 & \text{falls } m \neq n \end{cases} \quad (2.3.30)$$

ist. Falls die Reihe

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |u_n\rangle \quad (2.3.31)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

konvergiert, gilt offenbar

$$\langle u_m | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \langle u_m | u_n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \delta_{mn} = \psi_m. \quad (2.3.32)$$

Ist umgekehrt ein beliebiger Vektor $|\psi\rangle$ gegeben und definieren wir

$$\psi_n = \langle u_n | \psi \rangle, \quad (2.3.33)$$

so ist die Reihe (2.3.31) konvergent, denn für jede Partialsumme gilt

$$0 \leq \left\| \psi - \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \|\psi\|^2 + \left\| \sum_n \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 - \left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \right\rangle - \left\langle \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \left| \psi \right\rangle \right. \quad (2.3.34)$$

Nun ist aber

$$\left\| \sum_n \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \sum_{n,m=1}^N \psi_m^* \psi_n \underbrace{\langle u_m | u_n \rangle}_{=\delta_{mn}} = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 \quad (2.3.35)$$

und

$$\left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \right\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n \langle \psi | u_n \rangle = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 = \left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \right\rangle^* = \left\langle \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \left| \psi \right\rangle \right. \quad (2.3.36)$$

Dies in (2.3.35) eingesetzt liefert die **Besselsche Ungleichung**

$$\left\| \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 \leq \|\psi\|^2. \quad (2.3.37)$$

Die Teilsummenfolge der aus den positiven Gliedern $|\psi_n|^2$ gebildeten Reihe ist also beschränkt und diese folglich konvergent. Nennen wir den entsprechenden Grenzwert

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 = L^2. \quad (2.3.38)$$

Daraus folgt, daß die Teilsummenfolge

$$|S_k\rangle = \sum_{n=1}^k \psi_n |u_n\rangle \quad (2.3.39)$$

eine Cauchyfolge ist, denn zu $\epsilon > 0$ können wir ein $N > 0$ angeben, so daß für alle $n > N$

$$\left| L^2 - \sum_{k=1}^n |\psi_k|^2 \right| < \frac{\epsilon^2}{2} \quad (2.3.40)$$

ist. Dann gilt aber für die Teilsummenfolge (2.3.39) für alle $m > n > N$:

$$\|S_m - S_n\|^2 = \left\| \sum_{k=n+1}^m \psi_k |u_k\rangle \right\|^2 = \sum_{k=n+1}^m |\psi_k|^2 \leq \left| L^2 - \sum_{k=1}^n |\psi_k|^2 \right| + \left| L^2 - \sum_{k=1}^m |\psi_k|^2 \right| \stackrel{(2.3.40)}{\leq} \epsilon^2, \quad (2.3.41)$$

2.3. Der Hilbertraum

d.h. für alle $m > n > N$ gilt

$$\|S_m - S_n\| < \epsilon. \quad (2.3.42)$$

Da wir oben $\epsilon > 0$ beliebig wählen konnten, ist also (2.3.39) eine Cauchyfolge und folglich (wegen der Vollständigkeit des Hilbertraums) die Reihe (2.3.31) mit den Koeffizienten (2.3.33) gegen einen Vektor $|\psi'\rangle$ konvergent:

$$|\psi'\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |u_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle. \quad (2.3.43)$$

Ein Orthonormalsystem heißt **vollständig**, wenn für jeden Vektor $|\psi\rangle$ die Reihe gegen diesen Vektor konvergiert, wenn also in (2.3.43) $|\psi'\rangle = |\psi\rangle$ ist. Dies können wir symbolisch auch dadurch ausdrücken, daß wir

$$\sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbb{1} \quad (2.3.44)$$

schreiben. Dabei ist $\mathbb{1}$ der **Einheitsoperator im Hilbertraum** \mathcal{H} , d.h. für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\mathbb{1} |\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.3.45)$$

Weiter definieren wir das **dyadische Produkt** zweier Vektoren $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ als den Operator, der einen beliebigen Vektor $|\psi_3\rangle$ in den Vektor

$$(|\psi_1\rangle \langle \psi_2|) |\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle \quad (2.3.46)$$

abbildet. Eine Summe oder unendliche Reihe dyadischer Produkte wirkt entsprechend auf Vektoren gemäß

$$\left(\sum_n |\psi_1\rangle \langle \phi_n| \right) |\psi_2\rangle = \sum_n |\psi_1\rangle \langle \phi_n | \psi_2 \rangle. \quad (2.3.47)$$

Damit ist die Gültigkeit von (2.3.44) in der Tat gleichbedeutend mit

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle \quad (2.3.48)$$

also mit der **Vollständigkeit** des Orthonormalsystems $(|u_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$.

Es ist sehr leicht, ein **Beispiel** für ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) im Folgenraum ℓ^2 anzugeben. Offenbar ist ein solches nämlich durch

$$u_n = (0, 0, \dots, \underbrace{1}_{n\text{-ter Eintrag}}, 0, \dots) \quad (2.3.49)$$

gegeben. Es gilt jedenfalls

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (2.3.50)$$

und ist dann

$$\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots) \in \ell^2, \quad (2.3.51)$$

so ist offenbar in der Tat

$$\psi_n = \langle u_n | \psi \rangle \quad (2.3.52)$$

und weiter

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n u_n = (\psi_1, \psi_2, \dots) = \psi. \quad (2.3.53)$$

Also ist (2.3.49) tatsächlich ein VONS.

Auf dem Funktionenraum L^2 ist ein VONS z.B. durch die **Energieeigenfunktionen des Harmonischen Oszillators** gegeben. Wir können auf den Beweis hier nicht eingehen und verweisen diesbezüglich auf die oben zitierte mathematische Literatur.

Wir bemerken noch, daß ein Hilbertraum, in dem es wenigstens ein **VONS aus abzählbar vielen Vektoren** gibt, genauer als **separabler Hilbertraum** bezeichnet wird. Da die Hilberträume ℓ^2 und L^2 separabel sind und die Quantentheorie eines Teilchens in diesen Hilberträumen formulierbar ist, ist also der quantenmechanische Hilbertraum in diesem Falle separabel. Für die praktische Anwendung der Quantentheorie spielt dies allerdings eher eine untergeordnete Rolle.

2.4 Lineare Operatoren im Hilbertraum

Mit diesen Betrachtungen haben wir das 1. Postulat für unsere Zwecke hinreichend erläutert. Wenden wir uns also dem 2. Postulat zu. Dazu rekapitulieren wir zunächst einmal den Begriff des **linearen Operators**. Es sei $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{H}$ ein Untervektorraum von \mathcal{H} . Ein Operator $\mathbf{O} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt linear, wenn für alle Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$ und alle Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ (für die voraussetzungsgemäß auch der Vektor $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$ ist)

$$\mathbf{O}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\mathbf{O}|\psi_1\rangle + \lambda_2\mathbf{O}|\psi_2\rangle \quad (2.4.1)$$

gilt.

Existiert zu dem linearen Operator \mathbf{O} ein linearer Operator $\mathbf{O}^\dagger : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$, so daß für alle $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$

$$\langle \psi_1 | \mathbf{O} \psi_2 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (2.4.2)$$

gilt, so heißt \mathbf{O}^\dagger der zu \mathbf{O} **adjungierte Operator**. Gilt für einen Operator $\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}$, so heißt er **hermitesch**. Ist für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{D}$ auch $\mathbf{O}|\psi\rangle \in \mathcal{D}$ und ist \mathcal{D} **dicht im Hilbertraum** \mathcal{H} , so heißt \mathbf{O} **selbstadjungiert**. Ein Untervektorraum \mathcal{D} heißt dabei dicht im Hilbertraum, wenn es zu jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eine Folge $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $|\psi_n\rangle \in \mathcal{D}$ gibt, so daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.4.3)$$

Postulat 2 besagt nun, daß die Observablen im quantenmechanischen Formalismus durch selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum repräsentiert werden.

Beispiele für selbstadjungierte Operatoren im Funktionenraum sind die Operatoren für die Orts- und Impulskomponenten \mathbf{x}_k und \mathbf{p}_k ($k \in \{1, 2, 3\}$), die durch

$$\mathbf{x}_k \psi(\vec{x}) = x_k \psi(\vec{x}), \quad \mathbf{p}_k \psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{x}) \quad (2.4.4)$$

gegeben sind. Es ist offensichtlich, daß diese Operatoren nicht auf dem ganzen Hilbertraum definiert sein können. Betrachten wir zum Beispiel die Funktion

$$\psi(\vec{x}) = \frac{\sin(\vec{k} \cdot \vec{x})}{\vec{k} \cdot \vec{x}} \in L^2, \quad (2.4.5)$$

so ist $\mathbf{x}_k \psi(\vec{x}) \notin L^2$. Entsprechendes gilt für den Impulsoperator. Ohne dies hier formal beweisen zu wollen, können wir als dichten Teilraum \mathcal{D} für den Definitionsbereich für die Orts- und Impulsoperatoren den sog. **Schwartzschen Raum der schnell fallenden Funktionen** wählen. Dies ist der Raum

2.4. Lineare Operatoren im Hilbertraum

der beliebig oft stetig partiell differenzierbaren Funktionen, deren Beträge im Unendlichen schneller abfallen als jedes Polynom $P(\vec{x})$, d.h. für jedes $\psi \in \mathcal{D}$ strebt für jedes Polynom $P(\vec{x})\psi(\vec{x}) \rightarrow 0$, wenn \vec{x} in irgendeiner Richtung $\rightarrow \infty$ gesetzt wird. Es ist eine einfache *Übungsaufgabe*, zu zeigen, daß die so definierten Operatoren **selbstadjungiert** sind.

Ist nun \mathbf{O} ein linearer Operator, so heißt $|u_o\rangle$ **Eigenvektor** von \mathbf{O} zum Eigenwert o , wenn

$$\mathbf{O}|u_o\rangle = o|u_o\rangle \quad (2.4.6)$$

ist.

In der Quantentheorie müssen wir aber diesen Begriff des Eigenvektors **verallgemeinern**. Wir gehen hier auf die mathematisch strenge Begründung dieser Verallgemeinerung nicht ein, sondern verweisen diesbezüglich auf die mathematische Spezialliteratur (z.B. [FK08]) oder für eine modernere Formulierung mittels sogenannten „rigged Hilbert spaces“ [Bal98, GP90]. Hier begnügen wir uns mit der übliche weniger strikten Handhabung, wie sie in der Physik üblich ist.

Machen wir uns daher die Problematik an einem typischen Beispiel klar und betrachten den Impulsoperator (2.4.4) im L^2 . Der Einfachheit halber betrachten wir ein Teilchen, das sich nur eindimensional entlang der x -Achse bewegt. Der Hilbertraum ist dann einfach $L^2(\mathbb{R})$, der Raum der quadratintegrablen Funktionen $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Wir suchen also Eigenwerte und Eigenfunktionen für den Differentialoperator $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, d.h. wir suchen Lösungen der Differentialgleichung

$$\mathbf{p}u_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}u_p(x) = pu_p(x). \quad (2.4.7)$$

Offensichtlich gibt es zunächst für $p \in \mathbb{C}$ eine Lösung, nämlich

$$u_p(x) = N_p \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right). \quad (2.4.8)$$

Dabei ist $N_p = \text{const.}$ Offensichtlich ist für kein p die Funktion $u_p \in \mathcal{D}$. Sie liegt noch nicht einmal in L^2 ! Für $p \in \mathbb{R}$ ist allerdings die Funktion wenigstens beschränkt, während sie für $\text{Im } p \neq 0$ für $x \rightarrow \infty$ unbeschränkt ist. Wie wir gleich noch sehen werden, ist es für die Quantenmechanik allerdings nicht so wichtig, daß wir es mit echten Eigenvektoren zu tun haben. Vielmehr ist die Entwicklung beliebiger Zustandsvektoren nach Eigenvektoren, die im Falle selbstadjungierter Operatoren orthornormiert gewählt werden können, wichtig. Existieren wie hier keine echten Eigenvektoren, so existieren doch welche im Sinne verallgemeinerter Funktionen oder **Distributionen**. In der Tat gilt im gegebenen Fall der **verallgemeinerten Impulseigenfunktionen** für $p, p' \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \langle u_{p'} | u_p \rangle &= N_{p'}^* N_p \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left[\frac{i(p-p')x}{\hbar}\right] = |N_p|^2 2\pi \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= 2\pi \hbar |N_p|^2 \delta(p-p'). \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Hierbei ist δ die **Diracsche δ -Distribution**⁴. Üblicherweise wählt man in der nichtrelativistischen Quantentheorie die Normierungskonstante in (2.4.8) so, daß

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta(p-p') \Rightarrow |N_p| = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \quad (2.4.10)$$

⁴Näheres zur Fouriertransformation und zur δ -Distribution finden Sie in [CH10].

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

gilt. Wie wir weiter unten noch genauer ausführen werden, ist die nun immer noch unbestimmte **Phase** der Wellenfunktion irrelevant. Wir können also $N_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ wählen. Damit sind unsere verallgemeinerten Impulseigenfunktionen durch die **ebenen Wellen**

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \quad (2.4.11)$$

gegeben.

Untersuchen wir nun, in welchem Sinne dieses verallgemeinerte Orthonormalsystem **vollständig** ist. Zunächst müssen wir für eine Funktion $\psi \in L^2$ gemäß (2.3.48) das verallgemeinerte Skalarprodukt

$$\tilde{\psi}(p) = \langle u_p | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \psi(x) \quad (2.4.12)$$

bilden. Weiter haben wir die Funktion

$$\psi'(x) = \int_{\mathbb{R}} dp \tilde{\psi}(p) u_p(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) \exp\left(+\frac{ipx}{\hbar}\right) \quad (2.4.13)$$

zu betrachten. Wegen der Fourierschen Umkehrformel gilt in der Tat

$$\psi'(x) = \psi(x), \quad (2.4.14)$$

so daß also unser verallgemeinertes orthonormales System u_p von Impulseigenfunktionen in der Tat vollständig ist. Man spricht auch vom Übergang von der **Ortsdarstellung** $\psi(x)$ des quantenmechanischen Zustandes zur **Impulsdarstellung** $\tilde{\psi}(p)$.

Genauso können wir natürlich auch nach den Eigenfunktionen des Ortsoperators fragen. Es sei also $u_x(x')$ Eigenvektor zum Ortsoperator, d.h. es soll gelten

$$\mathbf{x} u_x(x') = x' u_x(x') \stackrel{!}{=} x u_x(x') \Rightarrow (x - x') u_x(x') = 0. \quad (2.4.15)$$

Folglich muß also $x \in \mathbb{R}$ und

$$u_x(x') = \delta(x' - x) \quad (2.4.16)$$

sein, wobei wir wieder die Normierung in der üblichen Form für kontinuierliche Eigenwerte gewählt haben. Es ist klar, daß dies wieder ein vollständiger Satz verallgemeinerter Eigenfunktionen ist, denn es gilt für $\psi \in \mathcal{D}$

$$\psi(x') = \int_{\mathbb{R}} dx u_x^*(x') \psi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx \delta(x - x') \psi(x). \quad (2.4.17)$$

Wir können nun den Zusammenhang dieser wellenmechanischen Formulierung zum abstrakten Hilbertraumformalismus vollziehen. Es sei also $|\psi\rangle$ ein Zustandsket im Definitionsbereich \mathcal{D} der Operatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} . Mit $|x\rangle$ bzw. $|p\rangle$ bezeichnen wir die verallgemeinerten Eigenvektoren dieser Operatoren. Dann ist

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle, \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle, \quad (2.4.18)$$

$$u_x(x') = \langle x' | x \rangle = \delta(x' - x), \quad (2.4.19)$$

$$u_p(x) = \langle x | p \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right), \quad (2.4.20)$$

$$u_x(p) = \langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right). \quad (2.4.21)$$

2.4. Lineare Operatoren im Hilbertraum

Die Vollständigkeitsrelationen für die verallgemeinerten Eigenkets lauten dann

$$\int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}, \quad \int_{\mathbb{R}} dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{1}. \quad (2.4.22)$$

Durch Einschleiben solcher Identitäten können wir leicht von einer Darstellung in die andere umrechnen. Deshalb hat man in der Frühzeit der Quantentheorie diesen auf Dirac zurückgehenden Formalismus auch als **Transformationstheorie** bezeichnet. Wollen wir z.B. den Ortsoperator in der Impulsdarstellung finden, müssen wir berechnen

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) := \langle p | \mathbf{x} \psi \rangle. \quad (2.4.23)$$

Es ist klar, daß sich hier ein Einschleiben der Identität $\mathbb{1}$ mit verallgemeinerten Ortseigenvektoren empfiehlt:

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p | x \rangle \langle x | \mathbf{x} \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p | x \rangle \langle \mathbf{x} x | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle. \quad (2.4.24)$$

Nun ist aber

$$\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \Rightarrow x \langle p | x \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p | x \rangle. \quad (2.4.25)$$

Wir können also schreiben

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) = i\hbar \frac{d}{dp} \int_{\mathbb{R}} dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle = i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p). \quad (2.4.26)$$

Der **Ortsoperator in der Impulsdarstellung** ist also $i\hbar d/dp$.

Wie wir anhand dieser Beispiele gesehen haben, besitzen selbstadjungierte Operatoren stets ein **reelles Spektrum**⁵, und die dazugehörigen (verallgemeinerten) Eigenvektoren zu verschiedenen Spektralwerten sind zueinander (im verallgemeinerten Sinne) orthogonal. Ohne Beweis nehmen wir an, daß diese (verallgemeinerten) Eigenzustände nach geeigneter Normierung insgesamt ein **vollständiges (verallgemeinertes) Orthogonalsystem** bilden. Im folgenden schreiben wir bei allgemeinen Betrachtungen die Gleichungen stets für diskrete Eigenwerte. Für verallgemeinerte Eigenwerte gelten die Gleichungen entsprechend im Sinne von Distributionen. Sind z.B. o_1 und o_2 echte voneinander verschiedene reelle Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators, so gilt

$$\langle o_1 | o_2 \rangle = 0 \quad \text{falls} \quad o_1 \neq o_2. \quad (2.4.27)$$

Falls die Werte hingegen zum kontinuierlichen Teil des Spektrums des Operators gehören, gilt (nach entsprechender Normierung)

$$\langle o_1 | o_2 \rangle = \delta(o_1 - o_2). \quad (2.4.28)$$

Wir wollen die Orthogonalität (2.4.27) der Eigenvektoren und die Realität der Spektralwerte selbstadjungierter Operatoren beweisen. Seien also $|o_k\rangle$ Eigenvektoren des selbstadjungierten Operators \mathbf{O} zu den Eigenwerten o_k . Wir nehmen an, daß all diese Vektoren auf 1 normiert sind, d.h.

$$\langle o_k | o_k \rangle = 1. \quad (2.4.29)$$

⁵Man nennt die Menge aller echten und verallgemeinerten Eigenwerte eines Operators sein **Spektrum**.

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Zum Beweis, daß die Eigenwerte reell sind, verwenden wir die Selbstadjungiertheit des Operators \mathbf{O} :

$$o_1 = \langle o_1 | \mathbf{O} o_1 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger o_1 | o_1 \rangle = \langle \mathbf{O} o_1 | o_1 \rangle = o_1^* \langle o_1 | o_1 \rangle = o_1^*. \quad (2.4.30)$$

Das bedeutet aber in der Tat, daß $o_1 \in \mathbb{R}$ ist. Weiter gilt einerseits

$$\langle o_1 | \mathbf{O} o_2 \rangle = o_2 \langle o_1 | o_2 \rangle, \quad (2.4.31)$$

denn $|o_2\rangle$ ist Eigenvektor von \mathbf{O} zum Eigenwert o_2 . Andererseits gilt aber wegen der Selbstadjungiertheit von \mathbf{O} und der Realität von o_1

$$\langle o_1 | \mathbf{O} o_2 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger o_1 | o_2 \rangle = \langle \mathbf{O} o_1 | o_2 \rangle = o_1 \langle o_1 | o_2 \rangle. \quad (2.4.32)$$

Ziehen wir dieses Resultat von (2.4.31) ab, erhalten wir schließlich

$$(o_2 - o_1) \langle o_1 | o_2 \rangle = 0. \quad (2.4.33)$$

Falls nun $o_1 \neq o_2$, d.h. $o_2 - o_1 \neq 0$ ist, folgt daraus in der Tat (2.4.28).

Falls es zu einem Eigenwert o_k von \mathbf{O} mehr als einen linear unabhängigen Eigenvektor gibt, bezeichnen wir die Eigenzustände mit $|o_k, \alpha\rangle$, wobei α eine diskrete oder kontinuierliche Variable ist, welche die verschiedenen Eigenvektoren zu diesem gleichen Eigenwert durchnumeriert. Man nennt diesen Eigenwert dann **entartet**. Diese Vektoren spannen den **Eigenraum** des Operators zum Eigenwert o_k auf. Wir können dann mit Hilfe des **Schmittschen Orthonormierungsverfahrens** [CH10] dafür sorgen, daß die Eigenvektoren in diesem Unterraum wieder ein Orthonormalsystem bilden, d.h. im Falle diskreter Werte α

$$\langle o_k, \alpha | o_k, \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \alpha = \alpha', \\ 0 & \text{falls } \alpha \neq \alpha' \end{cases} \quad (2.4.34)$$

und für kontinuierliche Werte

$$\langle o_k, \alpha | o_k, \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (2.4.35)$$

2.5 Verträglichkeit von Observablen

Damit haben wir alle Vorbereitungen getroffen, um die physikalische Bedeutung der Zustandsvektoren, die durch das **Bornsche Postulat (2.2.2)** gegeben ist, auszuarbeiten. Zunächst wollen wir klären, wie eine **vollständige Präparation eines Zustandes** erfolgen kann. Wir werden sehen, daß wir dazu einen **vollständigen Satz kompatibler Observabler** für das betrachtete System festlegen müssen. Wir wollen also zunächst überlegen, wann zwei oder mehrere Observable zugleich einen wohlbestimmten Wert besitzen können.

Nach dem Postulat (2.2.2) besitzt eine Observable A einen wohlbestimmten Wert genau dann, wenn der Systemzustand $|\psi\rangle = |a_k, \alpha_j\rangle$ ist, wobei a_k ein Eigenwert des der Observablen zugeordneten selbstadjungierten Operators \mathbf{A} ist. Wir nehmen der Einfachheit halber wieder an, daß die Eigenwerte dieses Operators (und die Werte α_j im Fall der Entartung) nur diskrete Werte annehmen. Wir gehen weiter unten noch auf den Fall des kontinuierlichen Spektrums näher ein. Ist das System nämlich im Zustand $|\psi\rangle$ mit $\|\psi\| = 1$ präpariert, so ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A den Wert a_k zu finden

$$w_\psi(a_k) = \sum_j \left| \langle a_k, \alpha_j | \psi \rangle \right|^2. \quad (2.5.1)$$

2.5. Verträglichkeit von Observablen

Da nun voraussetzungsgemäß die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{jk} |a_k, \alpha_j\rangle \langle a_k, \alpha_j| = \mathbb{1} \quad (2.5.2)$$

gilt und folglich

$$\sum_{jk} \langle \psi | a_k, \alpha_j \rangle \langle a_k, \alpha_j | \psi \rangle = \sum_k w_\psi(a_k) = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.5.3)$$

ist und $w_\psi(a_k) \geq 0$ ist, ist also $w_\psi(a_k) = 1$ genau dann, wenn

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j |a_k, \alpha_j\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_j |c_j|^2 = 1 \quad (2.5.4)$$

für genau einen Eigenwert a_k ist. Für alle anderen Eigenwerte $a_{k'}$ muß dann außerdem $w_\psi(a_{k'}) = 0$ sein, und nur genau in diesem Falle besitzt die Observable A aufgrund der Präparation des Systems im Zustand $|\psi\rangle$ den wohlbestimmten Wert a_k . Es muß also $|\psi\rangle$ tatsächlich ein Eigenvektor zu diesem Meßwert a_k sein.

In dem Fall, daß a_k ein entarteter Eigenwert ist, d.h. wenn es mehrere linear unabhängige Eigenvektoren zu diesem Eigenwert gibt, genügt eine Festlegung der Observablen A auf diesen Wert nicht, um den Zustand eindeutig festzulegen, und wir müssen eine weitere Observable B messen, um den Zustand genauer zu bestimmen. Dabei müssen wir allerdings darauf achten, daß diese Messung mit der Festlegung des Meßwertes der Observablen A **kompatibel** ist. Es muß also für jeden möglichen Meßwert a_k der Observablen A und jeden möglichen Meßwert b_l der Observablen B wenigstens ein **gemeinsamer Eigenvektor** der dazugehörigen Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} existieren. Nehmen wir also an, daß dies der Fall ist und bezeichnen diese gemeinsamen Eigenvektoren mit $|a_k, b_l, \beta_m\rangle$, wobei β_m wieder die, bei einer möglicherweise immer noch bestehenden Entartung dieser gemeinsamen Eigenwerte, zueinander orthonormiert gewählten Eigenvektoren durchnumeriert. Wir wollen nun herausfinden, was dies für die Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} bedeutet.

Dazu bemerken wir, daß wir wegen der Vollständigkeit der gemeinsamen Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_{klm} \mathbf{A} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \sum_{klm} a_k |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m|, \\ \mathbf{B} &= \sum_{klm} \mathbf{B} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \sum_{klm} b_l |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m|. \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

schreiben können. Das bedeutet aber

$$\begin{aligned} \mathbf{AB} &= \sum_{klm} \sum_{k'l'm'} a_k b_{l'} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \underbrace{\langle a_k, b_l, \beta_m | a_{k'}, b_{l'}, \beta_{m'} \rangle}_{\delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}} \langle a_{k'}, b_{l'}, \beta_{m'}| \\ &= \sum_{klm} a_k b_l |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \mathbf{BA}. \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

Die Reihenfolge der Operatormultiplikation ist in diesem Fall also unerheblich, d.h. die Operatoren **kommutieren**. Definieren wir also den Kommutator zweier beliebiger Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} vermöge

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{AB} - \mathbf{BA}, \quad (2.5.7)$$

bedeutet unsere obige Rechnung, daß es für das Vorliegen eines vollständigen Orthonormalsystems von gemeinsamen Eigenvektoren zweier selbstadjungierter Operatoren *notwendig* ist, daß der Kommutator dieser Operatoren verschwindet:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0. \quad (2.5.8)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Man kann zeigen, daß diese Bedingung auch *hinreichend* ist.

Um nun also den Zustand des Systems $|\psi\rangle$ vollständig festzulegen, müssen wir die Werte eines **vollständigen Satzes voneinander unabhängiger miteinander kompatibler Observabler** A, B, C, \dots bestimmen. Dabei heißt ein Satz von Observablen kompatibel, wenn die dazugehörigen selbstadjungierten Operatoren untereinander kommutieren, so daß ein vollständiges Orthonormalsystem von simultanen Eigenzuständen dieser Operatoren existiert. Ein Satz solcher kompatibler Observabler heißt vollständig, wenn es zu allen möglichen Tupeln von Eigenwerten (a, b, c, \dots) **genau einen linear unabhängigen simultanen Eigenvektor** gibt. Die Unabhängigkeit der Observablen bedeutet, daß nicht ein Operator Z in dem Satz als Funktion der übrigen Operatoren geschrieben werden kann, d.h. $Z \neq f(A, B, \dots, Y)$.

In diesem Zusammenhang ist insbesondere die **Exponentialabbildung** eines Operators

$$\exp(\lambda \mathbf{A}) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} \mathbf{A}^k \quad (2.5.9)$$

wichtig. Dabei bezeichnet λ eine beliebige reelle oder komplexe Zahl. Es ist dann auch klar, daß die Ableitung nach dem Parameter λ durch

$$\frac{d}{d\lambda} \exp(\lambda \mathbf{A}) = \mathbf{A} \exp(\lambda \mathbf{A}) = \exp(\lambda \mathbf{A}) \mathbf{A} \quad (2.5.10)$$

gegeben ist.

Wir müssen nun noch kurz auf die Besonderheiten eingehen, die sich für eventuell auftretende kontinuierliche Spektralwerte von Operatoren ergeben. Formal sind dann in dem oben zusammengefaßten Formalismus zunächst lediglich die Summen durch die entsprechenden Integrale zu ersetzen. Die wesentlichste Änderung liegt eher in der Interpretation der Resultate.

Nehmen wir der Einfachheit halber an, wir hätten ein System von nur einem Freiheitsgrad vorliegen, d.h. schon ein Operator \mathbf{A} bildet einen vollständigen Satz. Um ein konkretes Beispiel vor Augen zu haben, betrachten wir wieder ein Teilchen, das sich nur entlang der x -Achse bewegt, und wir können dann die Ortskoordinate x als diese Observable wählen. Wir gelangen dann, wie oben ausgeführt, zur Formulierung der Quantenmechanik als Wellenmechanik in der Ortsdarstellung. Wie wir ebenfalls oben gesehen haben, besitzt der dazugehörige Ortsoperator \mathbf{x} ganz \mathbb{R} als Spektrum. Es liegen hier also keine diskreten Eigenwerte vor. Die dazugehörigen verallgemeinerten Eigenvektoren $|x\rangle$ sind **keine Hilbertraumvektoren** sondern Distributionen über dem entsprechenden dicht definierten Unterraum \mathcal{D} , der den Definitionsbereich des Operators \mathbf{x} bildet. Entsprechend können wir das Teilchen **nie präzise lokalisieren**. Ein echter Hilbertraumzustand, der ein Teilchen beschreibt, das sich „in der Nähe“ des Ortes x_0 aufhält, wird durch

$$|\psi_{x_0}\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx A_{x_0}(x) |x\rangle \quad (2.5.11)$$

gegeben sein. Die Wellenfunktion ist

$$\psi_{x_0}(x) = \langle x | \psi_{x_0} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' A_{x_0}(x') \underbrace{\langle x | x' \rangle}_{\delta(x-x')} = A_{x_0}(x). \quad (2.5.12)$$

Dabei muß $A_{x_0} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine quadratintegrale Funktion sein. Damit $|\psi_{x_0}\rangle$ auf 1 normiert ist, verlangen wir

$$\langle \psi_{x_0} | \psi_{x_0} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx |\psi_{x_0}(x)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx |A_{x_0}(x)|^2 = 1. \quad (2.5.13)$$

2.6. Die Heisenbergsche Unschärferelation

Da gemäß dem Bornschen Postulat (2.2.2) die Wahrscheinlichkeitsverteilung, das Teilchen am Ort x zu finden, durch

$$w(x) = |\psi_{x_0}(x)|^2 \quad (2.5.14)$$

gegeben ist, wird die Lokalisierung „in der Nähe von x_0 “ lediglich bedeuten, daß diese Wahrscheinlichkeitsverteilung um x_0 stark gepeakt ist. Sie wird aber eine gewisse **Breite** aufweisen. Entsprechend wird der **Erwartungswert** für den Ort

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x |\psi_{x_0}(x)|^2 = \int_{\mathbb{R}} \langle \psi_{x_0} | \mathbf{x} x \rangle \langle x | \psi_{x_0} \rangle = \langle \psi_{x_0} | \mathbf{x} \psi_{x_0} \rangle \quad (2.5.15)$$

mit einer gewissen **statistischen Unsicherheit** Δx „in der Nähe von x_0 “ liegen. Diese Unsicherheit kann, wie in der **Statistik** üblich, durch die **Standardabweichung** definiert werden:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \psi_{x_0} | \mathbf{x}^2 \psi_{x_0} \rangle - \langle x \rangle^2}. \quad (2.5.16)$$

2.6 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Eine wichtige Folgerung aus der statistischen Interpretation des quantentheoretischen Zustandsbegriffs über die Bornsche Regel (2.2.2) ist die **Heisenbergsche Unschärferelation**. Seien dazu A und B zwei Observablen, die zueinander kompatibel oder inkompatibel sein können, und $|\psi\rangle$ irgendein Zustand⁶ des Systems. Dann gibt es eine **untere Schranke** für das Unschärfeprodukt $\Delta A \Delta B$.

Heisenberg ist auf diese Folgerung anhand des Beispiels von Ort und Impuls gekommen. Haben wir nämlich, wie in dem gerade besprochene Beispiel der Lokalisierung eines Teilchens in der Nähe des Ortes x_0 , eine Wellenfunktion $\psi_{x_0}(x)$, die scharf um diesen Ort gepeakt ist, so wird die entsprechende Impulsverteilung durch die Fouriertransformierte der Wellenfunktion gegeben sein (vgl. (2.4.12)). Die daraus resultierende Impulsverteilung wird aber desto breiter und entsprechend Δp desto größer sein je schärfer die Ortsverteilung (also je kleiner Δx) ist.

Der bis jetzt entwickelte quantentheoretische Formalismus läßt bereits eine Quantifizierung der Schranke für ΔA und ΔB zu. Um diese zu finden, definieren wir hilfsweise die neuen Operatoren

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \langle A \rangle \mathbb{1}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{B} - \langle B \rangle \mathbb{1}. \quad (2.6.1)$$

Die Erwartungswerte sind dabei bzgl. des betrachteten Zustandes $|\psi\rangle$ zu bilden. Dann gilt nämlich

$$\langle A' \rangle = \langle B' \rangle = 0, \quad \Delta A^2 = \langle A'^2 \rangle, \quad \Delta B^2 = \langle B'^2 \rangle, \quad [\mathbf{A}', \mathbf{B}'] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (2.6.2)$$

Es sei weiter $\lambda \in \mathbb{R}$. Dann definieren wir das quadratische Polynom

$$P(\lambda) = \langle (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi | (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{A}' - i\lambda \mathbf{B}') (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi \rangle. \quad (2.6.3)$$

Ausmultiplizieren des Operatorprodukts liefert dann unter Verwendung von (2.6.2)

$$P(\lambda) = \Delta A^2 + \lambda^2 \Delta B^2 + \lambda \langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle. \quad (2.6.4)$$

Da \mathbf{A} und \mathbf{B} selbstadjungiert sind, gilt

$$\{i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\}^\dagger = -i(\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A})^\dagger = -i(\mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger - \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B}^\dagger) = -i(\mathbf{B}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{B}) = +i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (2.6.5)$$

⁶Es ist hier wichtig, daß es sich um einen „echten“ Hilbertraumvektor handelt und nicht um einen verallgemeinerten Eigenvektor zu einem Wert im kontinuierlichen Spektrum eines Operators!

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Es ist also auch $i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ selbstadjungiert und folglich der Koeffizient von λ in (2.6.4) reell:

$$\langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle \in \mathbb{R}. \quad (2.6.6)$$

Das quadratische Polynom (2.6.4) ist also reell und wegen der positiven Definitheit des Skalarprodukts gilt für alle $\lambda \in \mathbb{R}$

$$P(\lambda) \geq 0. \quad (2.6.7)$$

Demnach besitzt dieses Polynom entweder eine einzige doppelte reelle Nullstelle oder zwei verschiedene zueinander komplex konjugierte Nullstellen. Nach der Lösungsformel für quadratische Gleichungen muß also für die Diskriminante des Polynoms

$$\frac{1}{4} \langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle^2 - \Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0 \quad (2.6.8)$$

oder

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle| \quad (2.6.9)$$

gelten. Dies ist die **Heisenbergsche Unschärferelation** für irgendwelche Observablen A und B . Sind insbesondere A und B kompatibel, können also deren Werte simultan scharf festgelegt werden, so kommutieren die entsprechenden Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} , und die rechte Seite der Ungleichung verschwindet, und die Ungleichung ergibt dann keine echte Einschränkung für das Produkt der Standardabweichungen.

Betrachten wir die Unschärferelation insbesondere für **Ort und Impuls**. Aus der konkreten Darstellung der entsprechenden Operatoren für die Orts- und Impulskomponenten im Ortsraum (2.4.4) ergeben sich die Kommutatorrelationen (**Heisenberg-Algebra**)

$$[\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k] = [\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k] = 0, \quad [\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}. \quad (2.6.10)$$

Dies in (2.6.9) eingesetzt ergibt die bekannte Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und Impuls

$$\Delta x_j \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk}. \quad (2.6.11)$$

Es können also nur Komponenten von Ort und in Impuls in zueinander senkrechten Richtungen gleichzeitig scharf bestimmt sein. Ein vollständiger Satz kompatibler Observabler kann in diesem Falle als die drei Orts- oder die drei Impulskomponenten oder z.B. x_1 und p_2, p_3 etc. gewählt werden.

2.7 Unitäre Abbildungen

Unitäre Abbildungen sind dadurch definiert, daß sie linear sind und Skalarprodukte beliebiger Vektoren ungeändert lassen, d.h. es gilt für alle Vektoren $|\psi\rangle_1, |\psi\rangle_2 \in \mathcal{H}$

$$\langle \mathbf{U}\psi_1 | \mathbf{U}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle. \quad (2.7.1)$$

Offensichtlich ist dies genau dann der Fall, wenn

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1} \quad (2.7.2)$$

2.7. Unitäre Abbildungen

ist. Dies folgt daraus, daß für ein VONS $\{|u_j\rangle\}_{j \in \mathbb{N}}$ des Hilbertraums

$$\delta_{jk} = \langle \mathbf{U}u_j | \mathbf{U}u_k \rangle = \langle u_j | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}u_k \rangle = (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U})_{jk} \quad (2.7.3)$$

und folglich

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \sum_{jk} \underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U})_{jk}}_{\delta_{jk}} |u_j\rangle \langle u_k| = \sum_j |u_j\rangle \langle u_j| = \mathbb{1} \quad (2.7.4)$$

ist. Also ist \mathbf{U} eine **umkehrbar eindeutige lineare Abbildung des Hilbertraums in sich**, d.h. der Operator besitzt ein Inverses, und es gilt

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger. \quad (2.7.5)$$

Ein wichtiges Beispiel für unitäre Operatoren sind Operatoren der Form

$$\mathbf{U}(\lambda) = \exp(i\lambda \mathbf{A}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (2.7.6)$$

Aus der Reihendarstellung (2.5.9) folgert man nämlich sofort, daß

$$\mathbf{U}^\dagger(\lambda) = [\exp(i\lambda \mathbf{A})]^\dagger = \exp(-i\lambda \mathbf{A}^\dagger) = \exp(-i\lambda \mathbf{A}). \quad (2.7.7)$$

Nun ist offenbar

$$\mathbf{U}^\dagger(\lambda) \mathbf{U}(\lambda) = \exp(-i\lambda \mathbf{A}) \exp(i\lambda \mathbf{A}) = \exp(0) = \mathbb{1}. \quad (2.7.8)$$

Dabei haben wir allerdings verwendet, daß wir für die Operatorexponentialabbildung für beliebige **kommutierende Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B}** die Gleichung

$$\exp(\mathbf{A}) \exp(\mathbf{B}) = \exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \quad \text{falls} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0 \quad (2.7.9)$$

verwenden dürfen, als ob \mathbf{A} und \mathbf{B} reelle oder komplexe Zahlen wären. Daß dies tatsächlich der Fall ist, folgert man daraus, daß für *kommutierende* Operatoren die binomische Formel wie für Zahlen gilt, d.h.

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mathbf{A}^k \mathbf{B}^{n-k} \quad \text{falls} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0. \quad (2.7.10)$$

Nun gilt

$$\exp(\mathbf{A}) \exp(\mathbf{B}) = \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \frac{1}{n_1! n_2!} \mathbf{A}^{n_1} \mathbf{B}^{n_2}. \quad (2.7.11)$$

Ohne Beweis nehmen wir an, daß wir diese Doppelreihe beliebig umordnen dürfen. Dann können wir stets Operatorprodukte mit gleichen $n = n_1 + n_2$ zusammenfassen. Es folgt

$$\exp(\mathbf{A}) \exp(\mathbf{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!(n-k)!} \mathbf{A}^k \mathbf{B}^{n-k} \stackrel{(2.7.10)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\mathbf{A} + \mathbf{B})^n =: \exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}). \quad (2.7.12)$$

Dabei haben wir die Beziehung

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (2.7.13)$$

verwendet. Es ist klar, daß wir all diese Manipulationen *nicht* hätten durchführen können, wenn \mathbf{A} und \mathbf{B} nicht kommutieren. Dann gilt auch (2.7.9) i.a. nicht mehr.

2.8 Unitäre Symmetrietransformationen

Als Symmetrietransformation bezeichnen wir eine umkehrbar eindeutige simultane Abbildung der Zustände $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$ und Operatoren $\mathbf{O} \rightarrow \mathbf{O}'$, die alle **physikalischen Aussagen** bzgl. des betrachteten Systems ungeändert lassen.

Betrachten wir die Abbildung

$$|\psi'\rangle = \mathbf{U}|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger \quad (2.8.1)$$

für einen beliebigen **unitären Operator** \mathbf{U} , so haben wir eine Symmetrietransformation vorliegen. Zum einen wird ein VONS von Eigenvektoren $|o, \alpha\rangle$ von \mathbf{O} in ein VONS $|o', \alpha'\rangle$ von Eigenvektoren von \mathbf{O}' zum gleichen Eigenwert $o' = o$ abgebildet:

$$\mathbf{O}'|o', \alpha'\rangle = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = \mathbf{U}\mathbf{O}|o, \alpha\rangle = o\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = o|o', \alpha'\rangle. \quad (2.8.2)$$

Es ist also $|o', \alpha'\rangle$ in der Tat ein Eigenvektor des Operators \mathbf{O}' zum Eigenwert $o' = o$. Die Vollständigkeit dieses Systems von Eigenvektoren ergibt sich ebenfalls sofort aus der Unitarität von \mathbf{U} und der Vollständigkeit von $|o, \alpha\rangle$:

$$\sum_{o', \alpha'} |o', \alpha'\rangle\langle o', \alpha'| = \sum_{o, \alpha} \mathbf{U}^\dagger |o, \alpha\rangle\langle o, \alpha| \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \left(\sum_{o, \alpha} |o, \alpha\rangle\langle o, \alpha| \right) \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \mathbb{1} \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1}. \quad (2.8.3)$$

Es ist also auch das System $|o', \alpha'\rangle$ vollständig. Daß es auch ein Orthonormalsystem ist, folgt aus der Invarianz des Skalarprodukts (2.7.1). Es ist also auch $|o', \alpha'\rangle$ ein VONS. Aus der dazugehörigen Spektralzerlegung von \mathbf{O}' folgt daraus insbesondere auch sofort, daß mit \mathbf{O} auch \mathbf{O}' selbstadjungiert ist. Damit ist klar, daß bei einer Verwendung von \mathbf{O}' als Operator, der die Observable O repräsentiert, hinsichtlich der möglichen Meßwerte dieselben Vorhersagen gemacht werden wie wenn wir \mathbf{O} verwenden, denn das Spektrum beider Operatoren ist identisch. Im folgenden können wir also schreiben

$$\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = |o, \alpha'\rangle. \quad (2.8.4)$$

Es bleiben auch alle Wahrscheinlichkeitsaussagen der Theorie erhalten, wenn wir entsprechend alle Zustände $|\psi\rangle$ gemäß (2.8.1) transformieren. So ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Observablen O einen bestimmten Wert o zu finden gemäß der Bornschen Regel durch

$$w_\psi(o) = \sum_\alpha |\langle o, \alpha | \psi \rangle|^2 = \sum_{\alpha'} |\langle o, \alpha' | \psi' \rangle|^2 \quad (2.8.5)$$

gegeben. Wir erhalten also dieselbe Wahrscheinlichkeitsverteilung für die möglichen Meßwerte, wenn wir statt der ursprünglichen Eigenvektoren $|\mu, \alpha\rangle$ und dem ursprünglichen Zustandsvektor ψ die gemäß (2.8.1) transformierten Vektoren verwenden. Insgesamt ändert sich also an den Vorhersagen eines quantentheoretischen Modells nichts, wenn man alle Vektoren und Operatoren dieser Transformation unterzieht. Sie ist also tatsächlich eine **Symmetrietransformation**.

Auch die Kommutatorrelationen ändern sich nicht, denn es gilt für irgendwelche zwei Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B}

$$\mathbf{A}'\mathbf{B}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{B}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{U}^\dagger \quad (2.8.6)$$

und folglich

$$[\mathbf{A}', \mathbf{B}'] = \mathbf{U}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{U}^\dagger. \quad (2.8.7)$$

2.8. Unitäre Symmetrietransformationen

Wir bemerken noch, daß auch allgemeinere Transformationen Symmetrietransformationen sein können, denn es müssen nicht die Skalarprodukte selbst ungeändert bleiben sondern nur ihre Beträge. Es muß also lediglich

$$|\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle| = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \quad (2.8.8)$$

gelten. Man kann zeigen, daß sich Abbildungen mit dieser Eigenschaft, die keine **unitären Abbildungen** der Art (2.8.1) sind, als sog. **antiunitäre Abbildungen** beschreiben lassen. Wir wollen dieses sog. **Theorem von Wigner und Bargmann** [Bar64, Mes99] hier nicht beweisen. In der Physik benötigt man diesen Fall für die Beschreibung der **Zeitumkehrsymmetrie**. Wir kommen darauf später noch im Zusammenhang mit der relativistischen Quantentheorie noch ausführlich zu sprechen.

Ein besonders einfacher (wenngleich wichtiger) Spezialfall einer unitären Symmetrie ist die **Phaseninvarianz** der Quantentheorie. Setzen wir nämlich

$$\mathbf{U} = \exp(i\varphi)\mathbb{1} \quad \text{mit} \quad \varphi \in \mathbb{R}, \quad (2.8.9)$$

so ist gemäß (2.8.1)

$$|\psi'\rangle = \exp(i\varphi)|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{O}. \quad (2.8.10)$$

Daß \mathbf{U} unitär ist, ist klar, denn es gilt

$$\mathbf{U}^\dagger = \exp(-i\varphi)\mathbb{1}^\dagger = \exp(-i\varphi)\mathbb{1}. \quad (2.8.11)$$

Wir können also alle Vektoren $|\psi\rangle$ mit **demselben Phasenfaktor** multiplizieren, ohne daß sich an den Aussagen über das physikalische System etwas ändert, d.h. insbesondere, daß der Vektor $|\psi'\rangle = \exp(i\varphi)|\psi\rangle$ denselben Zustand des Systems repräsentiert wie $|\psi\rangle$.

Als weiteres weniger triviales Beispiel betrachten wir

$$\mathbf{U}_T(\vec{\xi}) = \exp\left(\frac{i\vec{\xi} \cdot \vec{\mathbf{p}}}{\hbar}\right). \quad (2.8.12)$$

Wir wollen zeigen, daß dieser Operator **räumliche Translationen** beschreibt. Das ist insofern plausibel als auch in der **klassischen Mechanik** der Impuls die zur **räumlichen Translationssymmetrie** gehörige Erhaltungsgröße und im Poissonklammernformalismus der Hamiltonschen Mechanik **Generator dieser räumlichen Translationen** ist (Noethertheorem! Vgl. [Hee08a]). Wir gehen darauf in Kapitel 2 dieses Manuskripts noch sehr genau ein.

Betrachten wir zunächst die Wirkung des Operators $\mathbf{U}_T(\vec{\xi})$ auf die Orts- und Impulsoperatoren gemäß (2.8.1). Da die Impulsoperatoren wegen (2.6.10) untereinander und folglich auch mit jeder Funktion von Impulsoperatoren vertauschen, gilt

$$\vec{\mathbf{p}}' = \mathbf{U}_T(\vec{\xi})\vec{\mathbf{p}}\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{p}}\mathbf{U}_T(\vec{\xi})\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{p}}. \quad (2.8.13)$$

Der Impulsoperator bleibt also ungeändert, so wie es ja räumlichen Translationen entspricht.

Etwas schwieriger ist die Herleitung der Transformation des Ortsoperators. Dazu betrachten wir den transformierten Operator als Funktion der Parameter $\vec{\xi}$:

$$\mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi})\mathbf{x}_j\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (2.8.14)$$

Bilden wir nun die Ableitung nach ξ_k :

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \left[\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \right] \mathbf{x}_j \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) + \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \mathbf{x}_j \frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (2.8.15)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Da alle drei Impulsoperatoren untereinander vertauschen, gilt

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) = \frac{i}{\hbar} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \mathbf{p}_k, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_k \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (2.8.16)$$

Dies in (2.8.15) eingesetzt ergibt nach einigen einfachen Umformungen

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \underbrace{[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k]}_{i\hbar \delta_{jk}} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \delta_{jk} \mathbb{1} \quad (2.8.17)$$

Dies können wir wieder integrieren, um

$$\mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \mathbf{x}'_j(0) + \xi_j \mathbb{1} \quad (2.8.18)$$

zu erhalten. Wegen $\mathbf{U}_T(0) = \mathbb{1}$ ist $\mathbf{x}'_j(0) = \mathbf{x}_j$, d.h. es gilt

$$\vec{\mathbf{x}}'(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi} \mathbb{1}. \quad (2.8.19)$$

Auch dies entspricht der erwarteten Translation des Koordinatensystems um den Vektor $\vec{\xi}$.

Die Wirkung des Operators (2.8.12) auf die Hilbertraumvektoren untersuchen wir am einfachsten in der Ortsdarstellung. Zunächst gilt für die Ortseigenvektoren

$$\vec{\mathbf{x}} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle \stackrel{(2.8.19)}{=} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) \vec{\mathbf{x}}' |\vec{x}\rangle = \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) (\vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi} \mathbb{1}) |\vec{x}\rangle = (\vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi}) \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle. \quad (2.8.20)$$

Es ist also $\mathbf{U}^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle$ Eigenvektor des Ortsoperators zum Eigenwert $\vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi}$. Im folgenden wählen wir die Ortseigenvektoren als

$$|\vec{x}\rangle = \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) |0\rangle. \quad (2.8.21)$$

Dabei bezeichnet $|0\rangle$ den Eigenvektor von $\vec{\mathbf{x}}$ zum Eigenwert 0. Da die simultanen Ortseigenvektoren bis auf einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt sind, entspricht die Wahl (2.8.21) lediglich einer bequemen Phasenkonvention für die verallgemeinerten Ortseigenvektoren. Physikalische Aussagen sind nämlich unabhängig von der Wahl dieser Phasen.

Damit können wir aber die Wirkung des Translationsoperators auf die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung berechnen

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{x}) &= \langle \vec{x} | \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \psi \rangle = \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) 0 | \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \psi \rangle = \\ &= \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) 0 | \psi \rangle = \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x} + \vec{\xi}) 0 | \psi \rangle = \psi(\vec{x} + \vec{\xi}). \end{aligned} \quad (2.8.22)$$

Die Wellenfunktion verhält sich also bzgl. Translationen wie ein **skalares Feld**.

Wir bemerken noch, daß die Translationen eine **Abelsche Gruppe** bilden. Die Hintereinanderausführung zweier Translationen um die Verschiebungsvektoren $\vec{\xi}_1$ bzw. $\vec{\xi}_2$ ergibt nämlich wieder eine Verschiebung mit dem Verschiebungsvektor $\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2$. Dabei ist die Reihenfolge der Verschiebungen offenbar unerheblich, denn es gilt $\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2 = \vec{\xi}_2 + \vec{\xi}_1$. In der Quantentheorie hatten wir die Translationen mit dem unitären Operator (2.3.35) dargestellt. Wegen der Kommutativität der Impulsoperatoren gilt (die übrigens bei den obigen Rechnungen bereits benutzte!) Beziehung

$$\mathbf{U}_T(\vec{\xi}_2) \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1) \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_2). \quad (2.8.23)$$

Die Hintereinanderausführung der quantenmechanischen Translationsoperatoren liefert also dieselbe Gruppenbeziehung wie die Transformationsgruppe. MaW. bezeichnen wir die Translation des Ortsvektors mit $T(\vec{\xi})$, so gilt

$$T(\vec{\xi}_2)T(\vec{\xi}_1) = T(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2) = T(\vec{\xi}_1)T(\vec{\xi}_2), \quad (2.8.24)$$

d.h. die in diesem Fall abelsche Gruppenmultiplikation erfüllt dieselben Relationen wie sie auch die unitären Operatoren gemäß (2.8.23) besitzen. Wir haben also mit den unitären Transformationen (2.8.12) eine Abbildung der **Translationsgruppe** \mathcal{T} des \mathbb{R}^3 in die Gruppe der **unitären Transformationen** im Hilbertraum $\mathcal{U}(\mathcal{H})$. Diese Abbildung der Gruppenelemente erfüllt dieselben Gruppenverknüpfungsregeln wie die Elemente der Gruppe selbst (vgl. (2.8.23) mit (2.8.24)!). Man nennt dies eine **unitäre Darstellung der Gruppe im Hilbertraum**.

Allgemein entspricht also einer Symmetriegruppe in der klassischen Theorie (hier der Newtonschen Mechanik) in der ihr entsprechenden Quantentheorie einer **unitären Darstellung** dieser Gruppe im Hilbertraum⁷. Man gelangt allerdings eher umgekehrt durch die Betrachtungen der unitären Darstellung der Symmetriegruppe der klassischen Theorie und durch Ableitung (analog zu unserem Vorgehen in Gl. (2.8.17)) zu den **Kommutatorrelationen** der entsprechenden selbstadjungierten Operatoren, aus denen sich wiederum die Eigenschaften der Wellenfunktionen dieser Quantentheorie und damit eine zur praktischen Lösung von physikalischen Problemen verwendbare Realisierung derselben ergibt. Wir könnten z.B. die oben besprochene Realisierung der nichtrelativistischen Quantentheorie eines Teilchens allein aus den Kommutatorregeln der Heisenberg-Algebra (2.6.10) gewinnen. Darauf kommen wir im nächsten Kapitel noch ausführlich zurück.

2.9 Die Dynamik im Schrödingerbild

Wir beschäftigen uns nun mit der Beschreibung der **Zeitentwicklung** der die Observablen repräsentierenden selbstadjungierten Operatoren und der Zustandsvektoren im Hilbertraum. Wir wollen zunächst die dynamische Beschreibung eines Quantensystems in einer speziellen Form, dem sog. **Schrödingerbild** gewinnen. Dieses erhalten wir durch unmittelbare Identifikation der Operatoren und Zustände mit den entsprechenden Elementen in der Ortsdarstellung. Die **Wellenfunktion** ist **zeitabhängig**, während die fundamentalen Observablen (z.B. Ort und Impuls für ein spinloses Teilchen), durch die sich alle anderen Observablenoperatoren ausdrücken lassen, durch **zeitunabhängige** Differentialoperatoren beschrieben werden. Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion wird dabei durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \hat{H} \psi(t, \vec{x}) \quad (2.9.1)$$

beschrieben. Der **Hamiltonoperator**⁸ \mathbf{H} ist dabei für den einfachsten Fall eines Teilchens in einem äußeren Kraftfeld mit Potential V durch

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{x}}) \quad (2.9.2)$$

gegeben. Dieser besitzt wegen (2.4.4) in der in (2.9.1) benötigten Ortsdarstellung die Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \quad (2.9.3)$$

⁷Die einzige Ausnahme bilden die Zeitumkehrtransformationen, die (wie schon oben erwähnt) durch eine antiunitäre Abbildung repräsentiert werden müssen.

⁸Um den Operator bzgl. der Ortsdarstellung von dem abstrakten Operator im Hilbertraum zu unterscheiden bezeichnen wir den ersteren mit \hat{H} und den letzteren mit \mathbf{H} . Der Zusammenhang ist durch $\hat{H}\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \mathbf{H} \psi \rangle$ gegeben.

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

mit dem **Laplaceoperator**

$$\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.9.4)$$

Statt der hier angegebenen Form in kartesischen Koordinaten kann man ihn freilich in irgendwelchen anderen dem jeweiligen Problem angepaßten Koordinaten, z.B. Kugel- oder Zylinderkoordinaten, verwenden (s. dazu [CH10]). Da der Hamiltonoperator \mathbf{H} die **Zeitentwicklung** des Systems beschreibt, repräsentiert er die **Energie** des Systems. Dies entspricht unserem Postulat 4, auf das wir gleich noch näher eingehen werden. Da \mathbf{H} selbstadjungiert ist, ist die Zeitentwicklung eine **unitäre Transformation**. Insbesondere bleibt die Normierung der Wellenfunktion zeitlich erhalten. Sind nämlich ψ_1 und ψ_2 irgendwelche Lösungen der Schrödingergleichung (2.9.1), so folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle &= i\hbar \left(\left\langle \frac{d}{dt} \psi_1(t) \middle| \psi_2(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1(t) \middle| \frac{d}{dt} \psi_2(t) \right\rangle \right) \\ &= \left\langle -i\hbar \frac{d}{dt} \psi_1(t) \middle| \psi_2(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1(t) \middle| i\hbar \frac{d}{dt} \psi_2(t) \right\rangle \\ &= -\langle \mathbf{H} \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle + \langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle \\ &= -\langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle + \langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle = 0, \end{aligned} \quad (2.9.5)$$

d.h. die Skalarprodukte von beliebigen Zustandsvektoren ändern sich nicht mit der Zeit, und damit ist die Zeitentwicklung eine unitäre Transformation. Insbesondere bleibt die zum Anfangszeitpunkt vorgenommene **Normierung der Zustandsvektoren** erhalten:

$$\|\psi(t)\|^2 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1. \quad (2.9.6)$$

Da die Ortsoperatoren zeitunabhängig sind, sind auch deren **Eigenfunktionen zeitunabhängig**. Identifizieren wir also über die verallgemeinerten Eigenzustände des Ortsoperators die Wellenfunktionen mit Kets im Hilbertraum vermöge

$$|\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \psi(t, \vec{x}), \quad (2.9.7)$$

ist der Zustandsket eine Funktion der Zeit. Leiten wir diese Gleichung nach der Zeit ab, erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) \quad (2.9.8)$$

und mit der Schrödingergleichung (2.9.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(t, \vec{x}) = \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \mathbf{H} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H} |\psi(t)\rangle. \quad (2.9.9)$$

Wir haben oben auch gesehen, daß aufgrund der Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators die Zeitentwicklung in der Ortsdarstellung durch eine unitäre Transformation der Wellenfunktion gegeben ist. Entsprechend verallgemeinert sich diese Beobachtung auf die darstellungsunabhängigen Zustandskets. Es gibt also für jedes $t > t_0$ eine unitäre Transformation $\mathbf{U}(t, t_0)$, so daß

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.9.10)$$

ist. Es muß natürlich insbesondere $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ gelten.

2.9. Die Dynamik im Schrödingerbild

Um die Bewegungsgleichung für $\mathbf{U}(t, t_0)$ zu finden, leiten wir (2.9.10) nach der Zeit ab:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) \right] \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle. \quad (2.9.11)$$

Der Vergleich mit (2.9.9) ergibt

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) \right] \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}. \quad (2.9.12)$$

Nun gilt

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbb{1} \Rightarrow (\partial_t \mathbf{U})\mathbf{U}^\dagger + \mathbf{U}(\partial_t \mathbf{U}^\dagger) = 0. \quad (2.9.13)$$

Die letzte Beziehung bedeutet, daß

$$\mathbf{H} = i\hbar [\partial_t \mathbf{U}(t, t_0)] \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \quad (2.9.14)$$

tatsächlich selbstadjungiert ist. Dies ist konsistent mit der Forderung, daß der Hamiltonoperator \mathbf{H} die Energie des Teilchens repräsentiert. Multiplizieren von (2.9.14) von rechts mit $i\hbar \mathbf{U}$ ergibt

$$i\hbar \partial_t \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H}\mathbf{U}(t, t_0). \quad (2.9.15)$$

Wir zeigen weiter, daß dabei \mathbf{H} lokal in der Zeit sein muß, d.h. \mathbf{H} hängt höchstens von t , nicht aber von t_0 ab. Dazu bemerken wir, daß der Zeitentwicklungsoperator \mathbf{U} die Bedingung

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{U}(t, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0) \quad (2.9.16)$$

erfüllen muß, denn die Hintereinanderausführung der Zeitentwicklung der Zustände von der Zeit t_0 bis zur Zeit t_1 und dann von t_1 bis t muß zusammengenommen der Zeitentwicklung von t_0 bis t entsprechen. Leitet man dies nach t ab und benutzt (2.9.15), folgt sofort, daß auch

$$\mathbf{H} = i\hbar \mathbf{U}^\dagger(t, t_1) \partial_t \mathbf{U}(t, t_1) \quad (2.9.17)$$

gilt, d.h. \mathbf{H} ist höchstens eine Funktion von t , nicht vom Anfangszeitpunkt t_0 . In abgeschlossenen Systemen ist \mathbf{H} definitionsgemäß zeitunabhängig.

Die genaue Form des Hamiltonoperators für ein gegebenes System ist natürlich durch physikalische Prinzipien zu gewinnen und kann nicht mathematisch hergeleitet werden. Als sehr tragfähig haben sich in der gesamten modernen Physik die Symmetrieprinzipien erwiesen, aus denen heraus man Wechselwirkungen postulieren kann. Dabei spielt das **Noethertheorem** eine wesentliche Rolle, also daß jeder unabhängigen Symmetrieoperation (das sind in der Quantentheorie im wesentlichen die unitären Transformationen), die den Hamiltonoperator invariant läßt, ein Erhaltungssatz entspricht. Durch die empirische Beobachtung von Erhaltungsgrößen lassen sich nun aber umgekehrt auch die Symmetrieprinzipien gewinnen, die zur Aufstellung des Hamiltonoperators benutzt werden können. Wir gehen auf diese fundamentalen Symmetrieprinzipien im nächsten Kapitel noch ausführlich ein.

Nehmen wir nun an, der Hamiltonoperator sei zeitunabhängig. In dem bis jetzt ausschließlich benutzten Schrödingerbild heißt das, daß er eine Funktion der fundamentalen Operatoren \vec{x} und \vec{p} und nicht der Zeit ist. Dann ist die Lösung der Differentialgleichung (2.9.15) formal sehr einfach. Wir können dann nämlich diese Gleichung genauso wie eine Differentialgleichung für komplexwertige Funktionen behandeln, denn es treten keine Probleme mit der Nichtkommutativität von Operatoren auf. Demnach ist die formale Lösung durch

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \mathbf{H} \right] \quad (2.9.18)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

gegeben. Daß dies tatsächlich die Lösung ist, weist man sehr leicht durch Ableiten der Gleichung nach. Dabei ist es entscheidend, daß in diesem Fall \mathbf{U} mit \mathbf{H} für jedes t vertauscht. Wäre \mathbf{H} zeitabhängig, wäre dies nicht mehr unbedingt der Fall und die Lösung des Problems weitaus verwickelter. Wir kommen darauf weiter unten noch zurück.

Wichtig ist noch die Frage nach den stationären Zuständen. Dies war ja einer der Ausgangspunkte für die Entwicklung der Quantentheorie, nämlich die Lösung des Problems, wie es stabile Atome geben kann, was klassisch ja nicht mit den Rutherford'schen Beobachtungen bzgl. der um den Kern „kreisenden“ Elektronen vereinbar ist. Für die Quantentheorie stellt das deshalb kein Problem dar, weil wir nach Zuständen suchen können, die sich zeitlich nicht ändern. Beobachtbar sind aber Zustände nicht direkt, nur die Meßwerte von Observablen (Eigenwerte der dazugehörigen Operatoren) am Einzelsystem bzw. deren Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten für eine große Zahl von gleich präparierten Systemen (Ensembles). Das bedeutet aber, daß zwei Zustände $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$, die sich nur durch einen „Phasenfaktor“, also durch Multiplikation mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1, unterscheiden, die gleiche physikalische Situation beschreiben und im Sinne der Quantentheorie als der gleiche Zustand angesehen werden müssen. Damit ist $|\psi(t)\rangle$ ein stationärer Zustand, wenn für jeden Zeitpunkt t eine reelle Zahl $\alpha(t)$ existiert, so daß

$$|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \exp[-i\alpha(t)]|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad (2.9.19)$$

gilt.

Andererseits folgt aus (2.9.9) für einen stationären Zustand

$$\hbar\dot{\alpha}(t)|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \mathbf{H}(t)|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} \quad (2.9.20)$$

Das bedeutet aber, daß $|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}}$ zu jedem Zeitpunkt ein Eigenvektor des Hamiltonoperators $\mathbf{H}(t)$ zum Eigenwert $\hbar\dot{\alpha}(t)$ sein muß. Es ist also notwendig

$$\mathbf{H}(t)|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} = E(t)|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad \text{mit} \quad E(t) = \hbar\dot{\alpha}(t). \quad (2.9.21)$$

Falls \mathbf{H} zeitunabhängig ist, ist auch $E(t) = E = \text{const}$, und es gilt wegen (2.9.18)

$$|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E\right]|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad (2.9.22)$$

Wir können also festhalten: Stationäre Zustände eines Systems sind genau die **Eigenzustände des Hamiltonoperators**. Wegen ihrer Wichtigkeit nennt man die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung auch **zeitunabhängige Schrödingergleichung**.

Es ist klar, daß bei gegebener Anfangsbedingung in Form der Wellenfunktion $\psi_0(\vec{x}) = \psi(t_0, \vec{x})$ die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung am einfachsten durch Entwicklung nach Energieeigenfunktionen gegeben ist. Ist nämlich $|E, \alpha\rangle$ ein vollständiger Satz von Energieeigenzuständen, wobei α eventuelle weitere den Zustand charakterisierende diskrete und kontinuierliche Parameter bezeichnet, so können wir (2.9.18) wie folgt verwenden:

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \langle \vec{x} | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \int dE \int d\alpha \langle \vec{x} | E, \alpha \rangle \langle E, \alpha | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle \\ &= \int dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \int d\alpha \phi_{E, \alpha}(\vec{x}) \langle E, \alpha | \psi(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (2.9.23)$$

2.10. Bildtransformationen

Dabei definieren wir die Energieeigenfunktionen

$$\begin{aligned} \phi_{E,\alpha}(\vec{x}) &= \langle \vec{x} | E, \alpha \rangle \quad \text{mit der Normierung} \\ \langle E', \alpha' | E, \alpha \rangle &= \delta(E - E') \delta(\alpha - \alpha') = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi_{E',\alpha'}^*(\vec{x}) \phi_{E,\alpha}(\vec{x}). \end{aligned} \quad (2.9.24)$$

Die kombinierten Summations-Integralzeichen über E und α bedeuten wieder Integrale über den kontinuierlichen und Summen über den diskreten Teil des Spektrums der betreffenden Operatoren des gerade verwendeten vollständigen Satzes kompatibler Observabler. Ebenso bedeuten die δ -Distributionen in (2.9.24) im diskreten Teil des Spektrums Kronecker-Symbole.

Die Komponenten des Anfangszustandes sind durch

$$\langle E, \alpha | \psi(t_0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle E, \alpha | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi(t_0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi_{E,\alpha}^*(\vec{x}) \psi_0(\vec{x}) \quad (2.9.25)$$

gegeben. Haben wir also den vollständigen Satz von Energieeigenfunktion gemäß (2.9.24) bestimmt, können wir die Lösung des Anfangswertproblems der zeitabhängigen Schrödingergleichung sofort angeben.

2.10 Bildtransformationen

Wir haben oben schon mehrfach betont, daß die Elemente der Quantentheorie, nämlich die selbstadjungierten Operatoren, die Observablen repräsentieren, und die Hilbertraumvektoren, die die Zustände des Systems repräsentieren, selbst nicht direkt beobachtbar sind. Mögliche Meßwerte von Observablen sind durch die Eigenwerte der sie repräsentierenden Observablen bestimmt. Bei einer Präparation des Systems, das die Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler festlegt, befindet sich das System in den zu diesen simultanen Meßwerten gehörigen eindeutig bestimmten Eigenzustand. Allen Observablen, zu dem dieser Zustand nicht Eigenzustand ist, kommt kein eindeutiger Wert zu, es können aber Erwartungswerte solcher Observablen und die Wahrscheinlichkeit des Eintretens bestimmter möglicher Meßwerte gewonnen werden.

Alle an realen Systemen durch Messung prinzipiell überhaupt erfaßbaren Größen (wie die möglichen Meßwerte einer Observablen, Erwartungswerte von Observablen oder Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Werte von Observablen) ändern sich offenbar nicht, wenn wir eine unitäre Transformation \mathbf{B} wie folgt auf Zustandskets und Observablen repräsentierende Operatoren wirken lassen:

$$|\psi'\rangle = \mathbf{B} |\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{B} \mathbf{O} \mathbf{B}^\dagger, \quad (2.10.1)$$

denn dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \phi' | \psi' \rangle &= \langle \mathbf{B} \phi | \mathbf{B} \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B} \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \\ \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} &= \langle \mathbf{B} \psi | \mathbf{B} \mathbf{O} \mathbf{B}^\dagger | \mathbf{B} \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{O} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.10.2)$$

Es ist auch klar, daß selbstadjungierte Operatoren unter dieser unitären Transformation selbstadjungiert bleiben und Kommutatoren sich kovariant transformieren:

$$[\mathbf{O}'_1, \mathbf{O}'_2] = \mathbf{B} [\mathbf{O}_1, \mathbf{O}_2] \mathbf{B}^\dagger. \quad (2.10.3)$$

Da in all diesen Manipulationen an Zuständen und Observablenoperatoren die Zeit keine Rolle spielt, darf dabei \mathbf{B} offenbar auch zeitabhängig sein. Im vorigen Abschnitt haben wir allerdings angenommen,

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

daß die Operatoren zeitunabhängig und die Zustandskets zeitabhängig sind. Ist nun \mathbf{B} **zeitabhängig**, ist dies für die gemäß (2.10.1) transformierten Objekte nicht mehr notwendig der Fall, während aber die physikalischen Aussagen der Theorie ungeändert bleiben. Wir haben also eine recht große Freiheit, die Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren zu verteilen, ohne daß dies den physikalischen Gehalt dieser Objekte ändert. Man nennt eine konkrete Realisierung dieser Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren **Wahl des Bildes der Zeitentwicklung**. Eine zeitabhängige unitäre Transformation (2.10.1) heißt daher auch **Bildtransformation**, da sie von einem Bild der Zeitentwicklung zu einem anderen wechselt.

Im folgenden wollen wir die Dynamik des Systems in einem beliebigen Bild formulieren, so daß wir kein spezielles, z.B. das Schrödingerbild, mehr benötigen. Gleichwohl machen wir vom Schrödingerbild zur Herleitung dieser Gleichungen Gebrauch. Seien also $|\psi\rangle$ und \mathbf{O} Zustandskets und Operatoren im Schrödingerbild und $|\psi'\rangle$ und \mathbf{O}' die gemäß (2.10.1) transformierten Objekte. Dann ergibt sich

$$\frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = \frac{d\mathbf{B}(t)}{dt} |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} \mathbf{B}(t) \mathbf{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.10.4)$$

wobei wir von (2.9.9) Gebrauch gemacht haben. Setzen wir jetzt auf der rechten Seite die gemäß (2.10.1) transformierten Objekte ein, folgt

$$\frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{Y}(t) |\psi'(t)\rangle \quad \text{mit} \quad \mathbf{Y}(t) = \mathbf{H}'(t) + i\hbar \frac{d\mathbf{B}(t)}{dt} \mathbf{B}^\dagger(t). \quad (2.10.5)$$

Dabei ist $\mathbf{H}'(t) = \mathbf{B}(t) \mathbf{H} \mathbf{B}^\dagger(t)$ der Hamiltonoperator im neuen Bild. Offensichtlich ist $\mathbf{Y}(t)$ selbstadjungiert. Da nämlich \mathbf{H} selbstadjungiert ist, trifft dies auch auf $\mathbf{H}'(t)$ zu. Bleibt der zweite Term in (2.10.5) zu überprüfen. Da $\mathbf{B}(t)$ unitär ist, gilt

$$\mathbf{B}(t) \mathbf{B}^\dagger(t) = \mathbb{1}. \quad (2.10.6)$$

Leiten wir diese Gleichung nach der Zeit ab, folgt

$$\mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) + \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t) = \mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) + [\mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t)]^\dagger = 0. \quad (2.10.7)$$

Dabei verwenden wir wie in der Mechanik den Punkt, um die Zeitableitung zu bezeichnen. Dann folgt aber

$$[i\hbar \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t)]^\dagger = -i\hbar \mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) \stackrel{(2.10.7)}{=} +i\hbar \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t), \quad (2.10.8)$$

d.h. auch der zweite Term in der Definitionsgleichung von $\mathbf{Y}(t)$ (2.10.5) ist selbstadjungiert, d.h. es gilt tatsächlich

$$\mathbf{Y}^\dagger(t) = \mathbf{Y}(t). \quad (2.10.9)$$

Für die Observablen folgt durch eine einfache Rechnung die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\mathbf{O}'}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{X}(t)] + \partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O}' \quad \text{mit} \quad \mathbf{X}(t) = \mathbf{H}'(t) - \mathbf{Y}(t). \quad (2.10.10)$$

Dabei definieren wir

$$\partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O}' = \mathbf{B}(t) (\partial_t \mathbf{O}) \mathbf{B}^\dagger(t), \quad (2.10.11)$$

wobei die Zeitabhängigkeit des Operators \mathbf{O} im Schrödingerbild rein explizit ist. Die fundamentalen Operatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} , aus denen sich jeder Operator $\mathbf{O} = \mathbf{O}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; t)$ aufbauen läßt, sind im Schrödingerbild definitionsgemäß zeitunabhängig.

2.11. Das Heisenbergbild

Die physikalisch relevanten dynamischen Aussagen der Quantentheorie hängen auch im neuen Bild nur von $\mathbf{H}'(t)$ ab, während das Bild durch die willkürliche Festlegung eines der selbstadjungierten Operatoren $\mathbf{X}(t)$ oder $\mathbf{Y}(t)$ definiert werden kann. Diese beiden Operatoren sind durch $\mathbf{X}(t) + \mathbf{Y}(t) = \mathbf{H}'(t)$ miteinander verknüpft, d.h. hat man einen der beiden Operatoren willkürlich gewählt, ist der andere ebenfalls gewählt.

Man kann in der Tat leicht zeigen, daß die Annahme der Bewegungsgleichungen (2.10.5) und (2.10.10) auf eine bildunabhängige Dynamik der relevanten Größen führt. So gilt

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \left\langle \frac{d}{dt} \psi' \left| \mathbf{O}' \right| \psi' \right\rangle + \left\langle \psi' \left| \frac{d\mathbf{O}'}{dt} \right| \psi' \right\rangle + \left\langle \psi' \left| \mathbf{O}' \right| \frac{d}{dt} \psi' \right\rangle. \quad (2.10.12)$$

Setzen wir nun (2.10.5) und (2.10.10) in diese Gleichungen ein, finden wir die bildunabhängige Gleichung

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \langle \dot{\mathbf{O}}' \rangle_{\psi'} \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{O}}' := \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{H}'] + \partial_t^{\text{expl.}} \mathbf{O}'. \quad (2.10.13)$$

Dies ist das **Ehrenfestsche Theorem** in bildunabhängiger Schreibweise. Dabei ist zu beachten, daß der Ring über einem Operator i.a. nicht die mathematische Zeitableitung desselben bedeutet, sondern durch die Kommutatorrelation ergänzt durch die Ableitung aufgrund der expliziten Zeitabhängigkeit definiert ist. Dies ist die sog. **physikalische Zeitableitung** der Quantentheorie, die man als **unter Bildtransformationen kovariante Zeitableitung** betrachten kann. Damit haben wir auch Postulat 4 erklärt. Die Postulate sind damit sowohl **unabhängig von einer konkreten Darstellung**, also der Wahl eines bestimmten vollständigen Satzes kompatibler Observabler zur vollständigen Festlegung des Systemzustandes, als auch **unabhängig von der Wahl des Bildes der Zeitentwicklung**, also der Wahl der Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren.

2.11 Das Heisenbergbild

Als eine Anwendung der bild- und darstellungsunabhängigen Formulierung der quantentheoretischen Dynamik betrachten wir die Herleitung der dynamischen Gleichungen im Heisenbergbild. Dieses Bild ist in gewissem Sinne das genaue Gegenstück zum Schrödingerbild. Die volle Zeitabhängigkeit wird dabei auf die Observablenoperatoren gewälzt. Das bedeutet, daß wir gemäß (2.10.5) und (2.10.10)

$$\mathbf{X}_H = \mathbf{H} \quad \text{und} \quad \mathbf{Y}_H = 0 \quad (2.11.1)$$

zu setzen haben. Explizit heißt das, daß die kovariante Zeitableitung identisch ist mit der totalen Zeitableitung und die Zustandsvektoren überhaupt nicht zeitabhängig sind.

Zeitentwicklung in der Energieeigenbasis

In diesem Bild läßt sich auch sehr einfach der bildunabhängige Zeitentwicklungsoperator für die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung, also der **Propagator der Schrödingergleichung** bei gegebenem Hamiltonoperator, gewinnen. Es gilt wie in jedem Bild

$$\psi(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, t | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle \psi(t_0, \vec{x}'). \quad (2.11.2)$$

Dabei bedeutet $|\vec{x}, t\rangle$ zu jeder Zeit t den verallgemeinerten simultanen Eigenzustand der drei Ortskomponentenoperatoren zum Spektralwert $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, d.h. es gilt für alle $t > t_0$

$$\vec{x}(t) |\vec{x}, t\rangle = \vec{x} |\vec{x}, t\rangle. \quad (2.11.3)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Falls der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig ist, gilt für den Ortsoperator

$$\vec{x}(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]\vec{x}(t_0)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]. \quad (2.11.4)$$

Durch Ableitung nach der Zeit (*Übung!*) sieht man nämlich sofort, daß dann in der Tat die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{x}(t), \mathbf{H}], \quad (2.11.5)$$

wie es gemäß (2.10.10) im Heisenbergbild, das durch (2.11.1) definiert ist, sein muß. Aus (2.11.4) folgt sofort, daß die Zeitentwicklung der Ortseigenvektoren durch

$$|\vec{x}, t\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]|\vec{x}, t_0\rangle \quad (2.11.6)$$

gegeben ist.

Folglich ist

$$U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle = \left\langle \vec{x}, t_0 \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right] \right| \vec{x}', t_0 \right\rangle \quad (2.11.7)$$

und

$$U(t_0, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (2.11.8)$$

Leiten wir (2.11.7) nach der Zeit ab (*Übung!*), folgt sofort, daß für den Propagator die **zeitabhängige Schrödingergleichung**

$$i\hbar\partial_t U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \hat{H}U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \quad (2.11.9)$$

gilt. Dabei ist \hat{H} der Hamilton-Operator in der Ortsdarstellung bzgl. \vec{x} . Gemäß (2.11.2) ist die Zeitentwicklung der Wellenfunktion dann durch

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}')\psi(t_0, \vec{x}') \quad (2.11.10)$$

gegeben. Wegen (2.11.9) erfüllt diese Wellenfunktion in der Tat die zeitabhängige Schrödingergleichung und wegen (2.11.8) auch die Anfangsbedingung.

Adjunktion von (2.11.7) liefert unter Berücksichtigung der Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators

$$U^*(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \left\langle \vec{x}', t_0 \left| \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right] \right| \vec{x}, t_0 \right\rangle = U(t_0, \vec{x}'; t, \vec{x}). \quad (2.11.11)$$

Wir wollen zur Illustration den Propagator des **freien Teilchens** mit dieser Methode berechnen. Definitionsgemäß ist der Hamiltonoperator des freien Teilchens

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (2.11.12)$$

Nach (2.10.10) und (2.11.1) folgt zunächst

$$\frac{d\vec{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{\mathbf{p}}, \mathbf{H}] = 0, \quad \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{H}] = \frac{1}{m}\vec{\mathbf{p}}. \quad (2.11.13)$$

2.11. Das Heisenbergbild

Die Lösung ist in diesem Fall sehr einfach:

$$\vec{\mathbf{p}}(t) = \vec{\mathbf{p}}(t_0) = \vec{\mathbf{p}}_0, \quad \vec{\mathbf{x}}(t) = \vec{\mathbf{x}}_0 + \frac{(t-t_0)}{m} \vec{\mathbf{p}}_0. \quad (2.11.14)$$

Multiplizieren wir die Eigenwertgleichung

$$\vec{\mathbf{x}}(t) |\vec{\mathbf{x}}, t\rangle = \vec{\mathbf{x}} |\vec{\mathbf{x}}, t\rangle \quad (2.11.15)$$

mit $\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 |$ und wenden die Lösung (2.11.14) der Heisenbergschen Operatorbewegungsgleichungen sowie die Hermitezität der Operatoren $\vec{\mathbf{x}}_0$ und $\vec{\mathbf{p}}_0$ an, finden wir die Bestimmungsgleichung

$$\left[\frac{\hbar(t-t_0)}{im} \partial_{\vec{\mathbf{x}}_0} + \vec{\mathbf{x}}_0 \right] \langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle = \vec{\mathbf{x}} \langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle, \quad (2.11.16)$$

wobei wir (2.4.4) benutzt haben. Eine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle = U^*(t, \vec{\mathbf{x}}; t_0, \vec{\mathbf{x}}_0) = N^*(t-t_0) \exp \left[-\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^2 \right]. \quad (2.11.17)$$

Nehmen wir an, daß

$$N^*(t-t_0) = N(t_0-t) \quad (2.11.18)$$

ist, gilt dann nämlich offenbar (2.11.11). Zur Bestimmung von $N(t)$ verwenden wir die Schrödinger-Gleichung (2.11.9), was

$$\dot{N}(t-t_0) = -\frac{3}{2(t-t_0)} N(t) \Rightarrow N(t-t_0) = \frac{N_0}{(t-t_0)^{3/2}} \quad (2.11.19)$$

liefert.

Die noch unbestimmte Normierungskonstante N_0 bestimmt sich aus der Anfangsbedingung

$$\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t_0 \rangle = \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0). \quad (2.11.20)$$

Es ist klar, daß (2.11.17) zu jedem Zeitpunkt als Distribution aufzufassen ist, denn es handelt sich mit Sicherheit nicht um eine quadratintegrale Funktion. Um N_0 zu bestimmen, können wir daher auch nicht einfach $t = t_0$ setzen, und in der Tat wird (2.11.17) dann singulär. Es genügt allerdings, (2.11.17) auf eine beliebige **Testfunktion** anzuwenden. Dazu bietet sich hier eine **Gaußfunktion** an, denn dann können wir die benötigten Integrale geschlossen auswerten. Wählen wir also

$$\psi_0(\vec{\mathbf{x}}) = A \exp \left(-\frac{\vec{\mathbf{x}}^2}{4\sigma^2} \right). \quad (2.11.21)$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_0 U(t, \vec{\mathbf{x}}; t_0, \vec{\mathbf{x}}_0) \psi_0(x_0) \\ &= AN(t) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_0 \exp \left[\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^2 - \frac{\vec{\mathbf{x}}_0^2}{4\sigma^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.11.22)$$

Dieses Integral läßt sich geschlossen auswerten (vgl. Anhang A):

$$\psi(t, \vec{x}) = AN_0 \left[\frac{4\pi\sigma^2 \hbar}{\hbar(t-t_0) - 2im\sigma^2} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{m\vec{x}^2}{4m\sigma^2 + 2i\hbar(t-t_0)} \right). \quad (2.11.23)$$

Damit dies für $t \rightarrow t_0$ mit der Anfangsbedingung (2.11.21) kompatibel ist, muß offenbar

$$N_0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{3/2} \quad (2.11.24)$$

sein. Demnach erfüllt $N(t)$ gemäß (2.11.19) offenbar tatsächlich unsere obige Annahme (2.11.18) Der Propagator für das freie Teilchen ist damit also durch

$$U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}_0) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar(t-t_0)} \right]^{3/2} \exp\left[\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{x} - \vec{x}_0)^2 \right] \quad (2.11.25)$$

gegeben.

2.12 Der Propagator des harmonischen Oszillators

Auch der Propagator des harmonischen Oszillators läßt sich mit der soeben für das freie Teilchen durchgeführten Methode im Heisenbergbild recht bequem berechnen.

Wir beschränken uns auf den eindimensionalen Fall, d.h. wir haben nunmehr als fundamentale Operatoren nur jeweils eine Orts- und Impulskomponente \mathbf{x} bzw. \mathbf{p} , die der kanonischen Vertauschungsrelation

$$\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{x}, \mathbf{p}] = \hbar \mathbb{1} \quad (2.12.1)$$

genügen. Der Hamiltonoperator ist in Anlehnung an den klassischen harmonischen Oszillator durch

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \mathbf{x}^2}{2} \quad (2.12.2)$$

definiert. Dabei ist ω die Frequenz des harmonischen Oszillators.

Die Bewegungsgleichungen der Operatoren im Heisenbergbild lauten

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{1}{\hbar i} [\mathbf{p}, \mathbf{H}] = -m\omega^2 \mathbf{x}, \quad (2.12.3)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{\hbar i} [\mathbf{x}, \mathbf{H}] = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad (2.12.4)$$

wobei wir die allgemeine Beziehung

$$[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B}, \quad (2.12.5)$$

die man sofort aus der Definition des Kommutators beweist, und die kanonischen Vertauschungsrelationen für Ort und Impuls (2.12.1) verwendet haben.

Ableiten der Gleichung (2.12.4) ergibt unter Verwendung von (2.12.3)

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\omega^2 \mathbf{x}, \quad (2.12.6)$$

2.12. Der Propagator des harmonischen Oszillators

und diese Gleichung läßt sich ohne Probleme genauso lösen, als hätten wir es mit gewöhnlichen Zahlen und nicht Operatoren zu tun, weil keine Operatorprodukte vorkommen, in denen es Probleme mit der Operatoranordnung gäbe⁹:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 \cos[\omega(t - t_0)] + \frac{\mathbf{p}_0}{m\omega} \sin[\omega(t - t_0)]. \quad (2.12.7)$$

Für den Propagator gilt wieder

$$U(x, t; x_0, t_0) = \langle x, t | x_0, t_0 \rangle. \quad (2.12.8)$$

Wie oben beim freien Teilchen können wir das Konjugiert Komplexe dazu berechnen, indem wir die verallgemeinerte Eigenwertgleichung mittels (2.12.7) in der Ortsdarstellung anschreiben:

$$\begin{aligned} [A\partial_{x_0} + Bx_0]U^* &= xU^*, \\ A &= \frac{\hbar}{im\omega} \sin[\omega(t - t_0)], \quad B = \cos[\omega(t - t_0)]. \end{aligned} \quad (2.12.9)$$

Um die Lösung der Eigenwertgleichung zu finden, müssen wir sie nur geeignet umformen:

$$\frac{1}{U^*} \frac{\partial U^*}{\partial x_0} = \frac{x - Bx_0}{A}, \quad (2.12.10)$$

und das ergibt aufintegriert

$$U^* = N^*(t, t_0) \exp \left\{ -\frac{1}{A} \left[\frac{B}{2} x_0^2 - x x_0 + f(x) \right] \right\}, \quad (2.12.11)$$

wobei wir die x -abhängige Integrationskonstante $f(x)$ in den Exponenten gezogen haben, so daß N von x und x_0 unabhängig ist.

Wir müssen nunmehr die unbekannt Funktion f und die Konstante N bestimmen. Wir postulieren, daß f eine reelle Funktion ist. Wir werden im folgenden sehen, daß wir mit dieser Annahme zu einer Lösung für den Propagator gelangen.

Zunächst nutzen wir die Eigenschaften des verallgemeinerten Skalarprodukts (2.12.8) aus. Wir sehen sofort, daß

$$U^*(x, t; x_0, t_0) = U(x_0, t_0; x, t). \quad (2.12.12)$$

Dann benutzen wir, daß bei der Vertauschung der Argumente (x, t) und (x_0, t_0) $A \rightarrow -A$ und $B \rightarrow B$ gilt, da der \sin eine ungerade und \cos eine gerade Funktion ist. Weiter ist A rein imaginär und B reell. Daraus ergibt sich mit (2.12.11) die Beziehung

$$N^*(t, t_0) \exp \left\{ -\frac{1}{A} \left[\frac{B}{2} x_0^2 + f(x) \right] \right\} = N(t_0, t) \exp \left\{ -\frac{1}{A} \left[\frac{B}{2} x^2 + f(x_0) \right] \right\}, \quad (2.12.13)$$

wobei wir schon den beiden Seiten gemeinsamen Faktor $\exp(x x_0/A)$ gekürzt haben.

Da N nicht von x und x_0 abhängt, müssen die Exponenten übereinstimmen, und daraus ergibt sich, daß

$$f(x) - \frac{B}{2} x^2 = f(x_0) - \frac{B}{2} x_0^2 \quad (2.12.14)$$

⁹Das ist natürlich der besonders einfachen quadratischen Form des Hamiltonoperators zu verdanken, welche zu linearen Bewegungsgleichungen führt.

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

sein muß. Da diese Beziehung für alle x und x_0 gilt, muß also

$$f(x) - \frac{B}{2}x^2 = g(t, t_0) \quad (2.12.15)$$

sein. Wir können aber $g = 0$ setzen, da diese Abhängigkeit durch den Faktor N bereits parametrisiert ist, so daß also

$$f(x) = \frac{B}{2}x^2 \quad (2.12.16)$$

ist.

Bis jetzt haben wir somit folgende Form für den Propagator gefunden:

$$U(x, t; x_0, t_0) = N(t, t_0) \exp \left\{ \frac{im\omega[(x^2 + x_0^2)\cos[\omega(t - t_0)] - 2xx_0]}{2\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \right\}. \quad (2.12.17)$$

Als nächstes betrachten wir die Vollständigkeitsrelation

$$\begin{aligned} \int dx_0 U(x_1, t; x_0, t_0) U^*(x_2, t; x_0, t_0) &= \int dx_0 \langle x_1, t | x_0, t_0 \rangle \langle x_0, t_0 | x_2, t \rangle \\ &= \langle x_1, t | x_2, t \rangle = \delta(x_1 - x_2). \end{aligned} \quad (2.12.18)$$

Setzen wir hierin (2.12.17) ein, finden wir unter Anwendung des aus der Theorie des Fourierintegrals bekannten Formel

$$\int dk \exp(ikz) = 2\pi \delta(z) \quad (2.12.19)$$

die Beziehung

$$\int dx_0 U(x_1, t; x_0, t_0) U^*(x_2, t; x_0, t_0) = |N(t, t_0)|^2 \frac{2\pi \hbar \sin[\omega(t - t_0)]}{m\omega} \delta(x_1 - x_2), \quad (2.12.20)$$

so daß also

$$N^*(t, t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \exp(i\varphi) \quad (2.12.21)$$

mit $\varphi \in \mathbb{R}$ sein muß. Unter der Wurzel verstehen wir dabei hier und im folgenden den Hauptwert, d.h. für $\sin[\omega(t - t_0)] > 0$ (< 0) ist ihr Imaginärteil < 0 (> 0)¹⁰.

Zur Bestimmung von φ genügt schließlich die Anwendung von U auf eine beliebige Testfunktion, für die wir hier bequemerweise $\exp(-cx_0^2)$ ($c > 0$) wählen:

$$F(x) = \int dx_0 U(x, t; x_0, t_0) \exp(-cx_0^2). \quad (2.12.22)$$

Da für $t \rightarrow t_0$ der Propagator gegen $\delta(x - x_0)$ streben muß, ergibt sich aus der elementaren Auswertung des Integrals (2.12.22), daß $\varphi = 0$ sein muß, so daß sich schließlich der Propagator zu

$$U(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \exp \left\{ \frac{im\omega[(x^2 + x_0^2)\cos[\omega(t - t_0)] - 2xx_0]}{2\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \right\} \quad (2.12.23)$$

ergibt.

¹⁰Der Hauptwert der Wurzel für eine rein imaginäre Zahl ist definitionsgemäß $\sqrt{\pm ir} = \sqrt{r} \exp(\pm i\pi/4)$

2.13 Der Propagator als Green-Funktion der Schrödingergleichung

Wir diskutieren noch ein Weilchen über Propagatoren bzw. Greensche Funktionen der Schrödingergleichung. Der Propagator für ein quantenmechanisches System wird besonders einfach, wenn man nicht wie oben die Ortsdarstellung sondern die **Energieeigenzustände** als Basissystem wählt. Wir schreiben die Zeitentwicklung wieder im **Heisenbergbild** und leiten zunächst die Zeitentwicklungsgleichung der Eigenzustände von nicht explizit zeitabhängigen Operatoren her. Sei also $\mathbf{A}(t)$ der selbstadjungierte Operator einer Observablen A im Heisenbergbild. Dann gilt wegen (2.10.10) und (2.11.1)

$$\frac{d}{dt}\mathbf{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]. \quad (2.13.1)$$

Wir gehen auch von einem nicht explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator aus. Setzen wir in (2.13.1) $\mathbf{A} = \mathbf{H}$ ein, sehen wir, daß der Hamiltonoperator dann zeitlich konstant ist, so daß wir das Zeitargument für diesen gleich weggelassen haben. Dann können wir aber die Lösung der Differentialgleichung (2.13.1) sofort angeben:

$$\mathbf{A}(t) = \exp\left[\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar}\right]\mathbf{A}(t_0)\exp\left[-\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar}\right]. \quad (2.13.2)$$

Setzen wir

$$\mathbf{B}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar}\right], \quad (2.13.3)$$

so ist offenbar $\mathbf{B}(t, t_0)$ unitär, und wir können für (2.13.2) auch

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{B}(t, t_0)\mathbf{A}(t_0)\mathbf{B}^\dagger(t, t_0) \quad (2.13.4)$$

schreiben, was mit (2.10.1) übereinstimmt, wenn wir annehmen, daß zur Zeit t_0 im Schrödinger- und Heisenbergbild dieselben Operatoren verwendet werden, was wir stets tun dürfen. Dabei bezeichnet t_0 wieder den Anfangszeitpunkt, zu dem wir uns das System in irgendeinem Zustand $|\psi\rangle$ präpariert denken. Im Heisenbergbild sind die $|\psi\rangle$ definitionsgemäß zeitlich konstant. Die Eigenzustände von $\mathbf{A}(t)$ sind hingegen wegen (2.13.2) zeitabhängig. Aus

$$\mathbf{A}(t)|a, t\rangle = a|a, t\rangle \quad (2.13.5)$$

folgt durch Einsetzen von (2.13.2)

$$\mathbf{B}(t, t_0)\mathbf{A}(t_0)\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t_0\rangle = a|a, t\rangle. \quad (2.13.6)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung von links mit \mathbf{B}^\dagger , folgt

$$\mathbf{A}(t_0)\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle = a\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle \quad (2.13.7)$$

Daraus folgt, daß $\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle$ Eigenvektor von $\mathbf{A}(t_0)$ zum Eigenwert a ist. Damit ist also

$$\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle = |a, t_0\rangle \Rightarrow |a, t\rangle = \mathbf{B}(t, t_0)|a, t_0\rangle. \quad (2.13.8)$$

Ist dann $|\alpha; t\rangle$ ein VONS von irgendwelchen Energieeigenvektoren (wobei α wieder die Eigenwerte irgendwelcher drei voneinander unabhängiger mit \mathbf{H} kompatibler Observabler bezeichnet), so können

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

wir die Zeitentwicklung der Wellenfunktion in der Energiedarstellung sofort angeben¹¹:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}(t, \alpha) &= \langle \alpha, t | \psi \rangle = \langle \mathbf{B}(t, t_0) \alpha, t_0 | \psi \rangle = \left\langle \exp \left[\frac{i\mathbf{H}(t-t_0)}{\hbar} \right] \alpha, t_0 \mid \psi \right\rangle \\
 &= \left\langle \exp \left[\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right] \alpha, t_0 \mid \psi \right\rangle = \exp \left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right] \langle \alpha, t_0 | \psi \rangle \\
 &= \exp \left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right] \tilde{\psi}(t_0, \alpha).
 \end{aligned} \tag{2.13.9}$$

Damit können wir aber auch die Zeitentwicklung in jeder anderen Basis nach den entsprechenden Energieeigenfunktionen bzgl. dieser Basis ausdrücken, z.B. in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}
 \psi(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x}, t | \psi \rangle = \int d\alpha \langle \vec{x}, t | \alpha, t \rangle \langle \alpha, t | \psi \rangle \\
 &= \int d\alpha u_\alpha(\vec{x}) \exp \left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right] \tilde{\psi}(t_0, \alpha).
 \end{aligned} \tag{2.13.10}$$

Dabei sind die Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung **zeitunabhängig**, denn es gilt wegen der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators (2.13.3)

$$\begin{aligned}
 u_\alpha(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, t | \alpha, t \rangle = \langle \mathbf{B}(t, t_0) \vec{x}, t_0 | \mathbf{B}(t, t_0) \alpha, t_0 \rangle \\
 &= \langle \vec{x}, t_0 | \mathbf{B}^\dagger(t, t_0) \mathbf{B}(t, t_0) \alpha, t_0 \rangle = \langle \vec{x}, t_0 | \alpha, t_0 \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.13.11}$$

Wie wir oben gesehen haben, können wir die $u_\alpha(\vec{x})$ über die **zeitunabhängige Schrödingergleichung** berechnen. Dies folgt im jetzigen Kontext sehr einfach aus

$$\hat{H} u_{E\alpha}(\vec{x}) := \langle \vec{x}, t | \mathbf{H} E, \alpha; t \rangle = E \langle \vec{x}, t | E, \alpha; t \rangle = E u_{E\alpha}(\vec{x}). \tag{2.13.12}$$

Wir wollen noch eine wichtige Darstellung des Propagators mittels dieser Energieeigenzustände herleiten. Dazu müssen wir nur $\psi(t_0, \alpha)$ durch die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung ausdrücken:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}(t_0, \alpha) &= \langle \alpha, t_0 | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \langle \alpha, t_0 | \vec{x}'; t_0 \rangle \langle \vec{x}'; t_0 | \psi \rangle \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' u_{E,\alpha}^*(\vec{x}') \psi(t_0, \vec{x}').
 \end{aligned} \tag{2.13.13}$$

Dies in (2.13.10) eingesetzt liefert

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \sum d\alpha u_\alpha^*(\vec{x}') u_\alpha(\vec{x}) \exp \left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right] \psi(t_0, \vec{x}'). \tag{2.13.14}$$

Der Vergleich mit der Definition des Propagators (2.11.10) liefert die gewünschte Darstellung vermittels Energieeigenzuständen:

$$U(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = \sum d\alpha u_\alpha^*(\vec{x}') u_\alpha(\vec{x}) \exp \left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar} \right]. \tag{2.13.15}$$

¹¹Für das freie Teilchen können wir z.B. für α die drei Komponenten des Impulses wählen, die miteinander und mit \mathbf{H} vertauschen. Für ein Teilchen in einem radialsymmetrischen Potential können wir für α den Energieeigenwert E selbst sowie l und m , also die Bahndrehimpulsbetragsquantenzahl (Eigenwert $\hbar l(l+1)$ von \mathbf{L}^2) und die „Magnetquantenzahl“ entsprechend dem Eigenwert $m\hbar$ von \mathbf{L}_z , verwenden.

2.14. Die Green-Funktion für ein freies Schrödinger teilchen

Dem Leser sei zur *Übung* empfohlen, sich davon zu überzeugen, daß dieselben Resultate auch aus dem **Schrödingerbild** bzw. überhaupt einem **beliebigen Bild der Zeitentwicklung** folgen. Im letzteren Fall werden die Rechnungen allerdings ein wenig komplizierter, da dann sowohl die Zustandsvektoren als auch die Eigenvektoren von Observablen zeitabhängig werden.

Als **Beispiel** betrachten wir wieder das freie Teilchen und legen das **Heisenbergbild** zugrunde. Hier haben wir gleich mehrere Möglichkeiten der Wahl für einen vollständigen Satz kompatibler Observabler für die Energieeigenzustände; z.B. können wir die drei Impulskomponenten \vec{p} oder E, \vec{L}^2, L_z als den vollständigen Satz kompatibler Observabler, die auch mit E kompatibel sind, wählen¹².

Hier verwenden wir die **drei Impulskomponenten** \vec{p} als vollständigen Satz kompatibler Erhaltungsgrößen. Wegen

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (2.13.16)$$

sind diese mit \mathbf{H} verträglich und folglich zugleich **Energieeigenzustände**

$$\mathbf{H} |\vec{p}, t\rangle = \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}, t\rangle = E(\vec{p}) |\vec{p}, t\rangle, \quad (2.13.17)$$

wobei wir die **Dispersionsrelation für das freie Schrödinger-Teilchen**

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (2.13.18)$$

eingeführt haben. Die Energieeigenfunktionen sind dann freilich einfach die ins Dreidimensionale verallgemeinerten Impulseigenfunktionen (2.4.11)

$$\langle \vec{x}, t | \vec{p}, t \rangle = u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right). \quad (2.13.19)$$

Die Zeitentwicklung (2.13.10) nimmt demnach die Form

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tilde{\psi}(t_0, \vec{p}) \exp\left[-i \frac{E(\vec{p})(t-t_0) - \vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right] \quad (2.13.20)$$

an. Gibt man den Anfangszustand in der Ortsdarstellung an, findet man die in (2.13.20) benötigte Wellenfunktion in der Impulsdarstellung durch die entsprechende Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(t_0, \vec{p}) &= \langle \vec{p}, t_0 | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \langle \vec{p}, t_0 | \vec{x}, t_0 \rangle \langle \vec{x}, t_0 | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 x}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(-\frac{i\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right) \psi(t_0, \vec{x}). \end{aligned} \quad (2.13.21)$$

2.14 Die Green-Funktion für ein freies Schrödinger teilchen

Wir können den Propagator des freien Teilchens auch noch in einer anderen (insbesondere für die Vielteilchenphysik in Kapitel 8 äußerst wichtigen) Form schreiben. Dazu gehen wir von der **zeitabhängigen Schrödingergleichung** des freien Teilchens in der Ortsdarstellung aus, die wir in der Gestalt

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m}\right) \psi(t, \vec{x}) = 0 \quad (2.14.1)$$

¹²Es ist klar, daß es sich dabei im hier betrachteten Fall eines nicht explizit von der Zeit abhängigen Hamiltonoperators \mathbf{H} um zueinander kompatible **Erhaltungsgrößen** des Systems handeln muß. Diese kommutieren dann aufgrund der Bewegungsgleichung (2.10.10) im Heisenbergbild, wo definitionsgemäß $\mathbf{X} = \mathbf{H}$ (c.f. Gl. (2.11.1)) gilt, mit \mathbf{H} .

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

schreiben. Diese Gleichung ist unter Vorgabe der Anfangsbedingung

$$\psi(t_0, \vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) \quad (2.14.2)$$

zu lösen. Die physikalische Situation, die wir hier beschreiben, ist wieder, daß wir uns das Teilchen durch Festlegung der Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler in diesem Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ präpariert denken. Physikalisch ist es also irrelevant, wie die Wellenfunktion $\psi(t, \vec{x})$ für Zeiten $t < t_0$ aussieht. Wir machen nun den folgenden Ansatz, der sich gleich noch als nützlich erweisen wird

$$\psi(t, \vec{x}) = \Theta(t - t_0) \psi'(t, \vec{x}), \quad (2.14.3)$$

wobei die **Heavisidesche Einheitssprungfunktion** durch

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_0, \\ 1 & \text{für } t > t_0 \end{cases} \quad (2.14.4)$$

definiert ist. Wir benötigen noch die wichtige Formel

$$\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t_0) = \delta(t - t_0). \quad (2.14.5)$$

Diese ist selbstverständlich im Distributionensinne zu verstehen. Um sie zu beweisen, müssen wir also $\partial_t \Theta(t - t_0)$ auf eine Testfunktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ anwenden. Es gilt definitionsgemäß

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dt f(t) \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t_0) &= - \int_{\mathbb{R}} dt \Theta(t - t_0) \frac{d}{dt} f(t) \\ &= - \int_{t_0}^{\infty} \frac{d}{dt} f(t) = - f(t) \Big|_{t_0}^{\infty} \\ &= + f(t_0) = \int_{\mathbb{R}^3} dt f(t) \delta(t - t_0). \end{aligned} \quad (2.14.6)$$

Da dies für beliebige Testfunktionen f gilt, muß folglich auch (2.14.5) gelten, denn Distributionen sind eindeutig durch ihre Wirkung auf Testfunktionen definiert.

Setzen wir also (2.14.3) in (2.14.1) ein und verwenden bei der Zeitableitung (2.14.5), erhalten wir

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} \right) \Theta(t - t_0) \psi'(t, \vec{x}) &= i\hbar \delta(t - t_0) \psi'(t, \vec{x}) \\ &+ \Theta(t - t_0) \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} \right) \psi'(t, \vec{x})}_{=0} \\ &= i\hbar \delta(t - t_0) \psi_0(\vec{x}). \end{aligned} \quad (2.14.7)$$

Andererseits können wir $\psi(t, \vec{x})$ gemäß (2.11.10) mit Hilfe des Propagators ausdrücken:

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{x}) &= \Theta(t - t_0) \psi'(t, \vec{x}) = \Theta(t - t_0) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}') \\ &=: \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' i\hbar G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}'). \end{aligned} \quad (2.14.8)$$

2.14. Die Green-Funktion für ein freies Schrödingereteilchen

Daraus ergibt sich der Zusammenhang zwischen der Green-Funktion und dem Propagator als

$$i\hbar G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \Theta(t - t_0) U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}'). \quad (2.14.9)$$

Setzen wir dies in (2.14.7) ein, erhalten wir unter Beachtung, daß offenbar für ψ' die Anfangsbedingung

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi(t_0 + 0^+, \vec{x}) = \Theta(0^+) \psi'(t_0, \vec{x}) = \psi'(t_0, \vec{x}) \quad (2.14.10)$$

gilt,

$$i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m} \right) G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}') = i\hbar \delta(t - t_0) \psi_0(\vec{x}). \quad (2.14.11)$$

Da dies für alle möglichen Anfangsbedingungen $\psi_0(\vec{x}')$ gilt, ist also notwendig (wenn wir zur Vereinheitlichung der Schreibweise $t' = t_0$ setzen)

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m} \right) G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \delta(t - t_0) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.14.12)$$

Folglich ist $G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}')$ eine **Greensche Funktion des Schrödingeroperators**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m}. \quad (2.14.13)$$

Die Gleichung (2.14.12) ist wegen (2.14.8) mit der Nebenbedingung

$$G(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = 0 \quad \text{für } t < t' \quad (2.14.14)$$

zu lösen.

Dazu stellen wir G durch ihre **Fouriertransformierte bzgl. der Zeit und des Ortes** dar und berücksichtigen, daß offenbar G eine Funktion von $t - t'$ und $\vec{x} - \vec{x}'$ sein muß:

$$G(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4p}{(2\pi\hbar)^4} \exp \left[-i \frac{p_0(t - t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{\hbar} \right] \tilde{G}(p_0, \vec{p}). \quad (2.14.15)$$

Setzen wir dies auf der linken Seite von (2.14.12) ein und schreiben die δ -Distribution auf der rechten Seite ebenfalls als Fourierintegral,

$$\delta(t - t') \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4p}{(2\pi\hbar)^4} \exp \left[-i \frac{p_0(t - t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{\hbar} \right], \quad (2.14.16)$$

erhalten wir durch Vergleich der Fourierintegrale

$$\tilde{G}(p_0, \vec{p}) = \frac{1}{p_0 - E(\vec{p})} \quad \text{mit} \quad E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (2.14.17)$$

Hierbei tritt nun bei der Transformation (2.14.15) in den t, \vec{x} -Bereich das charakteristische Problem des Pols bei $p_0 = E(\vec{p})$ auf. Dies läßt sich dadurch beheben, daß man den reellen Integrationsbereich für p_0 ein wenig in die komplexe p_0 -Ebene deformiert. Dabei ist darauf zu achten, daß die **Randbedingung** (2.14.14) erfüllt wird. Aufgrund der Exponentialfunktion in (2.14.15) können wir den **Residuensatz**

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

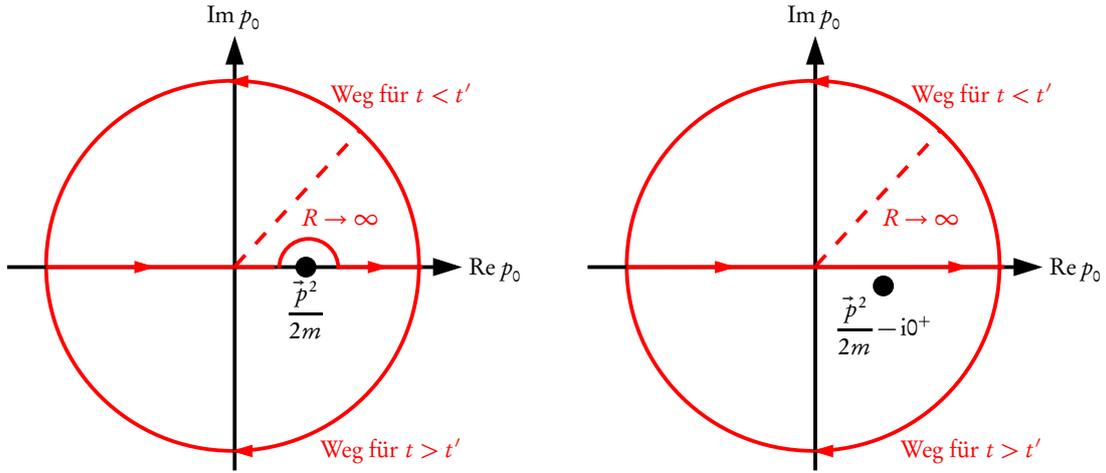


Abbildung 2.1: Links: Integrationskontur für das Integral (2.14.15) für den **retardierte Propagator**. Rechts: Alternative Formulierung durch Verschieben des Pols in die untere Halbebene (cf. (2.14.18)) und Beibehaltung des ursprünglichen reellen Integrationsweges.

anwenden, indem wir den Integrationsweg durch einen sehr großen Halbkreis im Unendlichen schließen, und zwar in der oberen (unteren) Halbebene für $t < t'$ ($t > t'$). Wir müssen mit unserem Integrationsweg den Pol also so umlaufen, daß dieser beim Schließen in der oberen Halbebene für $t < t'$ nicht in dem vom Integrationsweg umschlossenen Gebiet liegt (vgl. Abb. 2.1), denn dann verschwindet das Integral wegen des Cauchyschen Integralsatzes, wie von der Randbedingung (2.14.14) gefordert. Alternativ können wir auch einen kleinen positiven Imaginärteil zum Nenner addieren und diesen nach der p_0 -Integration gegen 0 gehen lassen. Das schreiben wir im Sinne von Distributionen in der Form

$$\tilde{G}_{\text{ret}}(p_0, \vec{p}) = \frac{1}{p_0 - E(\vec{p}) + i0^+}. \quad (2.14.18)$$

Dann liegt der Pol $p_0^{(\text{Pol})} = E(\vec{p}) - i0^+$ nämlich in der unteren Halbebene und dies hat denselben Effekt wie die Deformation des Integrationsweges gemäß Abb. 2.1, wenn wir wieder den ursprünglichen reellen Integrationsweg wählen und diesen in der oberen bzw. unteren Halbebene durch einen unendlich großen Halbkreis schließen. Wir haben jetzt diese Greensche Funktion genauer mit \tilde{G}_{ret} bezeichnet, denn es handelt sich wegen der Randbedingung (2.14.14) offensichtlich um die **retardierte Greensche Funktion der Schrödingergleichung für ein freies Teilchen**.

Führen wir nun in (2.14.15) nur die p_0 -Integration mit (2.14.18) für \tilde{G} aus, erhalten wir die Darstellung der retardierten Greenschen Funktion als Funktion der Zeiten t, t' und \vec{p} , die sog. **Mills-Darstellung**:

$$G'_{\text{ret}}(t, t'; \vec{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{(2\pi\hbar)} \frac{1}{p_0 - E(\vec{p}) + i0^+} \exp\left[-i \frac{p_0(t-t')}{\hbar}\right]. \quad (2.14.19)$$

Wir können dieses Integral mit Hilfe des Residuensatzes auswerten, indem wir die Integrationswege wie in Abb. 2.1 (rechts) eingezeichnet schließen. Dann folgt

$$G'_{\text{ret}}(t, t'; \vec{p}) = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E(\vec{p})(t-t')\right]. \quad (2.14.20)$$

Wir können schließlich auch noch die Integration über \vec{p} ausführen, um die Ortsdarstellung der Green-

2.15. Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

schen Funktion zu erhalten:

$$G_{\text{ret}}(t, \vec{x}; t'; \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} G'(t, t', \vec{p}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t - t') + i\vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \right]. \quad (2.14.21)$$

Um die Formel (A.1.5) anwenden zu können, denken wir uns $t - t' \rightarrow t - t' - i0^+$ gesetzt. Dann folgt

$$G_{\text{ret}}(t, \vec{x}; t'; \vec{x}') = \Theta(t - t') \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{m}{2\pi \hbar i(t - t')} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{im(\vec{x} - \vec{x}')^2}{2\hbar(t - t')} \right]. \quad (2.14.22)$$

Mit (2.14.9) erhalten wir daraus den **Propagator für das freie Teilchen**

$$U(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = \left(\frac{m}{2\pi \hbar i(t - t')} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{im(\vec{x} - \vec{x}')^2}{2\hbar(t - t')} \right]. \quad (2.14.23)$$

2.15 Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

Wir wenden uns nun der Formulierung der Bewegungsgleichungen für die Zustandsvektoren und Observablenoperatoren in einem beliebigen Bild der Zeitentwicklung zu. Stellen wir die Bewegungsgleichungen nochmals übersichtlich zusammen, ohne vom Schrödinger-Bild auszugehen (wie in Abschnitt 2.10). Die physikalische Zeitentwicklung ist durch den **Hamiltonoperator** des Systems gegeben, und dieser repräsentiert die Energie. Wie wir in Abschnitt 2.10 gesehen haben, erlaubt es uns die Freiheit, alle Operatoren und Zustände einer zeitabhängigen unitären Transformation der Form (2.10.1) zu unterziehen, eine in weiten Grenzen willkürliche Verteilung der mathematischen Zeitabhängigkeit auf Zustände und Operatoren. Unabhängig von der Wahl des Bildes ergeben sich stets dieselben Aussagen über (zumindest prinzipiell) beobachtbare Größen wie Wahrscheinlichkeiten für die Werte irgendeiner Observablen oder Erwartungswerte von Observablen etc.

Wir betrachten nun ein allgemeines Bild. Dieses muß nicht, wie in Abschnitt 2.10 durch die Bildtransformation vom Schrödinger- in das andere Bild hergeleitet werden, sondern kann direkt durch die Wahl der Operatoren $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{Y}(t)$ in den Gln. (2.10.5) und (2.10.10) charakterisiert werden. Wir müssen also Gleichungen finden, die unabhängig von der Bildtransformation $\mathbf{B}(t)$ sind. Dazu bedienen wir uns der **Bewegungsgleichungen für die Zustände und Operatoren** (2.10.5) und (2.10.10). Wir lassen im folgenden den Strich an den Operatoren in dem beliebigen Bild weg. Es ist freilich unbedingt darauf zu achten, daß *alle* Zustandsvektoren und Observablenoperatoren in einem bestimmten Bild der Zeitentwicklung zu verwenden sind!

Die Wahl des Bildes der Zeitentwicklung wird also bestimmt durch die Wahl der **selbstadjungierten Operatoren**

$$\mathbf{X}(t) \quad \text{und} \quad \mathbf{Y}(t) = \mathbf{H} - \mathbf{X}(t). \quad (2.15.1)$$

Die **Bewegungsgleichungen für Zustandsvektoren und Observablenoperatoren** lauten dann gemäß (2.10.5) und (2.10.10)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{O}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}(t), \mathbf{X}(t)] \quad (2.15.2)$$

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{Y}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.15.3)$$

Hierbei betrachten wir nur Observablenoperatoren, die *nicht explizit zeitabhängig* sind. Wir denken uns die Operatoren und Zustände zu einem beliebigen **Anfangszeitpunkt** $t_0 = 0$ vorgegeben und wollen

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

die Gleichungen (2.15.2) und (2.15.3) lösen. Da quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten, die Selbstadjungiertheit und Kommutatorrelationen der Observablenoperatoren usw. bei der Zeitentwicklung erhalten bleiben müssen, erwarten wir, daß es **unitäre Zeitentwicklungsoperatoren** für die Zustände und Observablenoperatoren gibt, so daß die Bewegungsgleichungen durch

$$\mathbf{O}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)\mathbf{A}^\dagger(t), \quad (2.15.4)$$

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{C}(t)|\psi(t=0)\rangle \quad (2.15.5)$$

gelöst werden. Dabei gelten die Unitaritätsbedingungen

$$\mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t) = \mathbb{1}, \quad \mathbf{C}^\dagger(t)\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}^\dagger(t)\mathbf{C}(t) = \mathbb{1}. \quad (2.15.6)$$

Aus (2.15.4) folgt auch sofort die Zeitabhängigkeit der Eigenzustände des Operators $\mathbf{O}(t)$. Wir definieren diesen Eigenzustand dadurch, daß er zur Zeit t den fest vorgegebenen Eigenwert o besitzt. Wegen der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators $\mathbf{A}(t)$ ist es klar, daß sich das Spektrum des Operators $\mathbf{O}(t)$ nicht ändert, d.h. $\mathbf{O}(t)$ besitzt dieselben (verallgemeinerten) Eigenwerte wie $\mathbf{O}(t=0)$. Per definitionem ist also stets

$$\mathbf{O}(t)|o, t\rangle = o|o, t\rangle. \quad (2.15.7)$$

Diese Eigenschaft erfüllt nun aber offensichtlich der Vektor

$$|o, t\rangle = \mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle, \quad (2.15.8)$$

denn es ist

$$\begin{aligned} \mathbf{O}(t)\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle &= \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)\mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle \\ &= \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)|o, t=0\rangle = o\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle. \end{aligned} \quad (2.15.9)$$

Da $\mathbf{A}(t)$ unitär ist, durchläuft weiter $\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle$ ein (verallgemeinertes) vollständiges Orthonormalsystem, wenn $|o, t=0\rangle$ ein solches repräsentiert. Wir können also (2.15.8) als ein verallgemeinertes VONS von Eigenzuständen zu $\mathbf{O}(t)$ verwenden, wenn wir ein solches VONS von Eigenzuständen $|o, t=0\rangle$ zu $\mathbf{O}(t=0)$ gefunden haben. Damit ist (2.15.8) eine konsistente Zeitentwicklung für die Eigenzustände von $\mathbf{O}(t)$.

Wenden wir uns nun als erstes der Bewegungsgleichung (2.15.3) für die Zustände zu. Um die entsprechende Bewegungsgleichung für $\mathbf{C}(t)$ zu erhalten, leiten wir (2.15.5) nach der Zeit ab

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \dot{\mathbf{C}}(t)|\psi(t_0)\rangle = \dot{\mathbf{C}}(t)\mathbf{C}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle. \quad (2.15.10)$$

Der Vergleich mit (2.15.3) zeigt, daß $\mathbf{C}(t)$ die Bewegungsgleichung

$$\dot{\mathbf{C}}(t)\mathbf{C}^\dagger(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{Y}(t) \quad (2.15.11)$$

erfüllt. Daß dies mit der Selbstadjungiertheit von \mathbf{Y} verträglich ist, zeigt man unter Verwendung der Unitarität (2.15.6) wie bei der entsprechenden Rechnung für die Bildtransformation (2.10.6-2.10.8). Multiplizieren wir dies von rechts mit \mathbf{C} erhalten wir

$$\dot{\mathbf{C}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{Y}(t)\mathbf{C}(t). \quad (2.15.12)$$

2.15. Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

Diese Gleichung ist unter Berücksichtigung der **Anfangsbedingung**

$$\mathbf{C}(0) = \mathbb{1} \quad (2.15.13)$$

zu lösen. Sie kann nun *nicht* wie eine Differentialgleichung mit gewöhnlichen Funktionen behandelt werden, da $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{C}(t)$ i.a. nicht notwendig kommutieren müssen. Ebenso wenig müssen die Operatoren $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{Y}(t')$ zu verschiedenen Zeiten kommutieren!

Falls allerdings $\mathbf{Y} = \text{const}$ ist, gilt offenbar

$$\mathbf{C}(t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar}\mathbf{Y}\right) \quad \text{falls } \mathbf{Y} = \text{const}, \quad (2.15.14)$$

wie man sofort durch Differenzieren bestätigt.

Um wenigstens eine formale Lösung bei zeitabhängigem \mathbf{Y} zu erhalten, formen wir (2.15.12) zu einer Integralgleichung um, indem wir sie unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung von $t' = 0$ bis $t' = t$ integrieren. Dies liefert

$$\mathbf{C}(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathbf{Y}(t') \mathbf{C}(t'). \quad (2.15.15)$$

Dies ist eine **Rekursionsgleichung**, die wir iterativ lösen können. Setzen wir als Anfangsnäherung für die Lösung $\mathbf{C}_0 = \mathbb{1}$, welche wenigstens die Anfangsbedingung erfüllt, auf der rechten Seite von (2.15.15) ein, und sehen das Resultat als eine verbesserter Näherung von \mathbf{C} an, erhalten wir

$$\mathbf{C}_1(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1). \quad (2.15.16)$$

Diese Näherung setzen wir wieder in (2.15.15) ein, um die nächste Näherung zu erhalten:

$$\mathbf{C}_2(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_2 \mathbf{Y}(t_2) \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_1). \quad (2.15.17)$$

Diese Iteration können wir nun offenbar beliebig fortführen. Wir erhalten dann

$$\mathbf{C}(t) = \mathbb{1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_n) \mathbf{Y}(t_{n-1}) \cdots \mathbf{Y}(t_1)}_{\mathbf{C}^{(k)}(t)}. \quad (2.15.18)$$

Es auch einfach zu zeigen, daß diese iterative Lösung (wenigstens formal) die Gleichung (2.15.12) löst (Übung!). Offensichtlich geht auch (2.15.18) für zeitunabhängiges $\mathbf{Y} = \text{const}$ in (2.15.14) über.

Wir können (2.15.18) noch etwas vereinfachen, indem wir die komplizierte „Schachtelstruktur“ der oberen Grenzen in den Zeitintegralen auflösen. Dabei ist Vorsicht geboten, weil i.a. $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{Y}(t')$ für $t \neq t'$ nicht kommutieren. Es ist allerdings charakteristisch, daß die Operatoren in dem Produkt unter dem Integral stets **zeitgeordnet** sind, d.h. die Zeitargumente sind von rechts nach links gelesen monoton wachsend. Dies werden wir uns sogleich zunutze machen.

Betrachten wir zunächst das Doppelintegral in (2.15.17).

$$\mathbf{C}^{(2)}(t) = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_2) \mathbf{Y}(t_1). \quad (2.15.19)$$

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

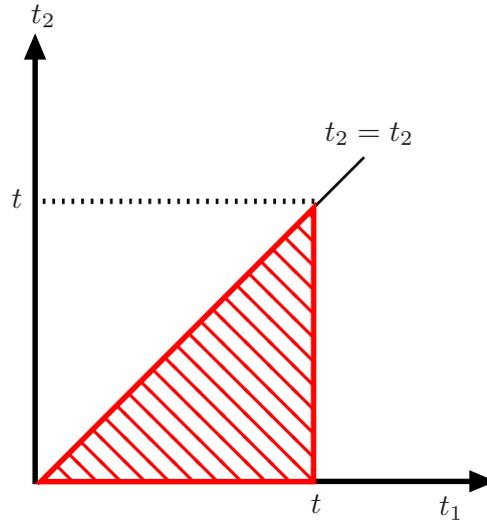


Abbildung 2.2: Zur Berechnung des Doppelintegrals in (2.15.17)

Dies können wir als Flächenintegral in der t_1 - t_2 -Ebene lesen, das über das schraffierte Dreieck in Abb. 2.2 zu nehmen ist. Wir wollen nun die Integration in den Variablen t_1 und t_2 symmetrisieren. Dazu vertauschen wir die Reihenfolge der Integrationsvariablen

$$\mathbf{C}^{(2)}(t) = \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathbf{Y}(t_1)\mathbf{Y}(t_2). \quad (2.15.20)$$

Dabei ist aber genau auf die Operatoranordnung zu achten. Die entscheidende Beobachtung ist, daß sowohl in der ursprünglichen Form (2.15.19) als auch in der Form (2.15.20) die Operatoren von rechts nach links nach wachsenden Zeiten geordnet sind. Dafür definiert man den **kausalen Zeitordnungsoperator** \mathcal{T}_c , der stets auf ein Produkt von Operatoren wirkt und für die Zeitordnung sorgt, in der die Zeiten von rechts nach links in wachsender Folge stehen. Sind die Operatoren in dem Produkt zeitunabhängig, vereinbaren wir, daß der Zeitordnungsoperator die Reihenfolge der Operatoren ungeändert läßt. Für Summen von Operatorprodukten ist \mathcal{T}_c als **linearer Operator** definiert.

Durch Einführung des Zeitordnungsoperators können wir dann in (2.15.20) durch Umbenennen der Integrationsvariablen t_1 und t_2 vertauschen, und wir können die beiden Gleichungen addieren, so daß auf der linken Seite $2\mathbf{C}^{(2)}$ entsteht und auf der rechten das Integral über das gesamte Quadrat $(0, t) \times (0, t)$ integriert wird:

$$2\mathbf{C}^{(2)}(t) = \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \mathbf{Y}(t_1)\mathbf{Y}(t_2). \quad (2.15.21)$$

Wir behaupten nun, daß im allgemeinen Fall

$$\mathbf{C}^{(k)}(t) = \frac{1}{k!} \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n \mathbf{Y}(t_1) \cdots \mathbf{Y}(t_n) \quad (2.15.22)$$

ist. Zum Beweis nehmen wir an, die Behauptung sei für $k = n - 1$ wahr. In der Definition (2.15.18) für $\mathbf{C}^{(k)}(t)$ setzen wir $k = n$. Darin ergeben die $n - 1$ innersten Integrale definitionsgemäß $\mathbf{C}^{(n-1)}(t_1)$. Nach Induktionsannahme ist für dieses Integral die Behauptung wahr, d.h. es gilt

$$\mathbf{C}^{(n)}(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1) \mathcal{T}_c \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_1} dt_n \mathbf{Y}(t_2) \cdots \mathbf{Y}(t_n). \quad (2.15.23)$$

2.15. Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

Jetzt denken wir uns die Rechnung, die wir schon für $\mathbf{C}^{(2)}$ ausgeführt haben, nacheinander jeweils für das äußerste und eines der innersten Integrale ausgeführt und die Ergebnisse der entstehenden Gleichungen addiert. Dann erhält man nach Division durch n

$$\mathbf{C}^{(n)}(t) = \frac{1}{n!} \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n \mathbf{Y}(t_1) \cdots \mathbf{Y}(t_n), \quad (2.15.24)$$

und dies ist die Behauptung für $k = n$, so daß diese nach dem Prinzip der vollständigen Induktion bewiesen ist.

Wir können also nunmehr die Reihe (2.15.18) symbolisch in der Form

$$\mathbf{C}(t) = \mathcal{T}_c \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathbf{Y}(\tau) \right] \quad (2.15.25)$$

schreiben. Damit haben wir unser Anfangswertproblem (2.15.12-2.15.13) gelöst. Wir bemerken noch, daß für einen zeitunabhängigen Operator $\mathbf{Y} = \text{const}$ (2.15.25) tatsächlich in (2.15.14) übergeht.

Schließlich müssen wir uns noch mit der **Zeitentwicklung der Observablenoperatoren** beschäftigen. Leiten wir also (2.15.4) nach der Zeit ab:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{O}}(t) &= \dot{\mathbf{A}}(t) \mathbf{O}(t_0) \mathbf{A}^\dagger(t) + \mathbf{A}(t) \mathbf{O}(t_0) \dot{\mathbf{A}}^\dagger(t) \\ &= \dot{\mathbf{A}}(t) \mathbf{A}^\dagger(t) \underbrace{\mathbf{O}(t) \mathbf{A}(t) \mathbf{A}^\dagger(t)}_{=\mathbb{1}} + \underbrace{\mathbf{A}(t) \mathbf{A}^\dagger(t)}_{=\mathbb{1}} \mathbf{O}(t) \mathbf{A}(t) \dot{\mathbf{A}}^\dagger(t). \end{aligned} \quad (2.15.26)$$

Wie in der Rechnung (2.10.7) folgt aus der Unitarität von $\mathbf{A}(t)$

$$\dot{\mathbf{A}}(t) \mathbf{A}^\dagger(t) = -\mathbf{A}(t) \dot{\mathbf{A}}^\dagger(t). \quad (2.15.27)$$

Setzen wir dies in (2.15.26) ein, erhalten wir

$$\dot{\mathbf{O}}(t) = \left[\mathbf{O}(t), \mathbf{A}(t) \dot{\mathbf{A}}^\dagger(t) \right], \quad (2.15.28)$$

und der Vergleich mit (2.15.2) zeigt, daß für $\mathbf{A}(t)$ die Bewegungsgleichung

$$\mathbf{A}(t) \dot{\mathbf{A}}^\dagger(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{X}(t) \quad (2.15.29)$$

erfüllt sein muß. Multiplikation von links mit $\mathbf{A}^\dagger(t) = \mathbf{A}^{-1}(t)$ und anschließendes Adjungieren der entstehenden Gleichung liefert

$$\dot{\mathbf{A}}(t) = +\frac{i}{\hbar} \mathbf{X}(t) \mathbf{A}(t). \quad (2.15.30)$$

Diese Gleichung ist bis auf das Vorzeichen auf der rechten Seite von der gleichen Bauart wie (2.15.12). Da weiter auch wieder die Anfangsbedingung

$$\mathbf{A}(0) = \mathbb{1} \quad (2.15.31)$$

erfüllt sein muß, können wir also die Lösung unter Berücksichtigung der besagten Vorzeichenänderung sofort von (2.15.25) übernehmen:

$$\mathbf{A}(t) = \mathcal{T}_c \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathbf{X}(t') \right]. \quad (2.15.32)$$

Wir bemerken noch, daß für explizit zeitabhängige Operatoren $\mathbf{O}(t) := \mathbf{O}[\vec{\mathbf{x}}(t), \vec{\mathbf{p}}(t); t]$ die Bewegungsgleichung (2.10.10) durch

$$\mathbf{O}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{O}[\vec{\mathbf{x}}(0), \vec{\mathbf{p}}(0); t]\mathbf{A}^\dagger(t) \quad (2.15.33)$$

gelöst wird, wie man sofort durch Bilden der Zeitableitung und Berücksichtigung von (2.15.29) beweist (Übung!).

2.16 Die Transformation zwischen zwei Bildern

Unser Ausgangspunkt bei der Betrachtung der verschiedenen **Bilder der Zeitentwicklung** in Abschnitt 2.10 war die Tatsache, daß alle physikalischen Aussagen der Quantentheorie invariant unter unitären Transformationen, die auch zeitabhängig sein dürfen, sind. Dadurch sind wir auf die **Zeitentwicklungsoperatoren** der Zustandskets und Observablenoperatoren über die das Bild charakterisierende Zerlegung des Hamiltonoperators (2.15.1) und deren **Bewegungsgleichungen** (2.15.2) und (2.15.3) gekommen, deren Lösungen durch (2.15.4) und (2.15.5) gegeben sind, wobei sich diese **unitären Zeitentwicklungsoperatoren** formal als zeitgeordnete Exponentialausdrücke gemäß (2.15.25) und (2.15.32) schreiben lassen.

Wir betrachten nun die Frage, wie sich zu zwei derart gegebenen Bildern die entsprechende Transformation von einem Bild zum anderen ergibt. Seien also durch $\mathbf{X}^{(j)}(t)$ und $\mathbf{Y}^{(j)}(t)$ bzw. $\mathbf{A}^{(j)}(t, t_0)$ und $\mathbf{C}^{(j)}(t, t_0)$ mit $j \in \{1, 2\}$ zwei Bilder gegeben, die zur Zeit t_0 übereinstimmen. Dann gilt wegen (2.15.5) und der Unitarität der $\mathbf{C}^{(j)}(t, t_0)$

$$|\psi^{(2)}, t\rangle = \mathbf{C}^{(2)}(t, t_0)|\psi, t_0\rangle = \mathbf{C}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{C}^{(1)\dagger}(t, t_0)|\psi^{(1)}, t\rangle. \quad (2.16.1)$$

Daraus folgt, daß die unitäre Transformation, die von Zustandskets im Bild 1 zu denen im Bild 2 führt, durch

$$\mathbf{B}^{(21)}(t, t_0) = \mathbf{C}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{C}^{(1)\dagger}(t, t_0) \Rightarrow |\psi^{(2)}, t\rangle = \mathbf{B}^{(21)}(t, t_0)|\psi^{(1)}, t\rangle \quad (2.16.2)$$

gegeben sein muß.

Betrachten wir andererseits die Zeitentwicklung der Observablenoperatoren, finden wir

$$\mathbf{O}^{(2)}(t) = \mathbf{A}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{O}(t_0)\mathbf{A}^{(2)\dagger}(t, t_0) = \mathbf{A}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{A}^{(1)\dagger}(t, t_0)\mathbf{O}^{(1)}(t)\mathbf{A}^{(1)}(t, t_0)\mathbf{A}^{(2)\dagger}(t, t_0), \quad (2.16.3)$$

so daß demnach die Bildtransformation

$$\tilde{\mathbf{B}}^{(21)}(t, t_0) = \mathbf{A}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{A}^{(1)\dagger}(t, t_0) \Rightarrow \mathbf{O}^{(2)}(t) = \tilde{\mathbf{B}}^{(21)}(t, t_0)\mathbf{O}^{(1)}(t)\tilde{\mathbf{B}}^{(21)\dagger}(t, t_0) \quad (2.16.4)$$

lauten muß. Damit dies konsistent mit (2.16.2) ist, muß

$$\mathbf{B}^{(21)}(t, t_0) = \tilde{\mathbf{B}}^{(21)}(t, t_0) \Rightarrow \mathbf{C}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{C}^{(1)\dagger}(t, t_0) = \mathbf{A}^{(2)}(t, t_0)\mathbf{A}^{(1)\dagger}(t, t_0) \quad (2.16.5)$$

sein. Um dies zu beweisen, multiplizieren wir die letztere Identität von links mit $\mathbf{A}^{(2)\dagger}(t, t_0)$ und dann von rechts mit $\mathbf{C}^{(1)}(t, t_0)$. Demnach sollte

$$\mathbf{G}^{(2)}(t, t_0) := \mathbf{A}^{(2)\dagger}(t, t_0)\mathbf{C}^{(2)}(t, t_0) = \mathbf{A}^{(1)\dagger}(t, t_0)\mathbf{C}^{(1)}(t, t_0) =: \mathbf{G}^{(1)}(t, t_0) \quad (2.16.6)$$

sein.

2.17. Gemischte Zustände

Dies beweisen wir nun dadurch, daß wir die Zeitableitung der Ausdrücke auf beiden Seiten berechnen. Aufgrund der Bewegungsgleichungen (2.15.12) und (2.15.30) gilt für $j \in \{1, 2\}$

$$\begin{aligned}
 \dot{G}^{(j)}(t, t_0) &= \dot{\mathbf{A}}^{(j)\dagger}(t, t_0)\mathbf{C}^{(j)}(t, t_0) + \mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_0)\dot{\mathbf{C}}^{(j)}(t, t_0) \\
 &= -\frac{i}{\hbar}\mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_0)[\mathbf{X}_j^{(j)}(t) + \mathbf{Y}^{(j)}(t)]\mathbf{C}^{(j)}(t) \\
 &= -\frac{i}{\hbar}\mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_0)\mathbf{H}^{(j)}(t)\mathbf{A}^{(j)}(t, t_0)\mathbf{G}^{(j)}(t, t_0) \\
 &= -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t_0)\mathbf{G}^{(j)}(t, t_0).
 \end{aligned} \tag{2.16.7}$$

Demnach erfüllen $\mathbf{G}^{(1)}$ und $\mathbf{G}^{(2)}$ dieselbe Differentialgleichung und dieselbe Anfangsbedingung

$$\mathbf{G}^{(j)}(t_0, t_0) = \mathbb{1}, \tag{2.16.8}$$

und folglich müssen sie übereinstimmen.

Dies ergibt sich auch aus der Forderung, daß die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t einen bestimmten Meßwert für einen vollständigen Satz von Observablen \mathbf{O}_k zu erhalten, wenn das System zur Zeit t_0 im Zustand $|\psi\rangle$, t_0 präpariert wurde, in beiden Bildern den gleichen Wert ergeben muß. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsamplitude ist nämlich durch

$$\begin{aligned}
 \langle \{o_k\}^{(j)}, t \mid \psi^{(j)}, t \rangle &= \langle \{o_k\}, t_0 \mid \mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_0)\mathbf{C}^{(j)\dagger}(t, t_0) \mid \psi, t_0 \rangle \\
 &= \langle \{o_k\}, t_0 \mid \mathbf{G}^{(j)}(t, t_0) \mid \psi, t_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{2.16.9}$$

gegeben. Da dies für alle (verallgemeinerten) simultanen Eigenzustände $|\{o_k\}, t_0\rangle$ des vollständigen Satzes von Observablen und alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ unabhängig vom gewählten Bild der Zeitentwicklung das gleiche Resultat ergeben muß, schließen wir wieder auf die gerade bewiesene Identität

$$\mathbf{G}^{(2)}(t, t_0) = \mathbf{G}^{(1)}(t, t_0). \tag{2.16.10}$$

2.17 Gemischte Zustände

Im Rahmen der Quantentheorie läßt sich ein System nicht genauer determinieren als es durch seine Präparation in einem durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ repräsentierten Zustand möglich ist. Dies kann z.B. dadurch geschehen, daß man ihn zur Zeit $t = 0$ in einem simultanen Eigenzustand eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler präpariert. Die physikalische Bedeutung dieser vollständigsten möglichen Festlegung des Systemzustandes ist allerdings allein durch den **statistischen Gehalt des Zustandsvektors** gemäß der Bornschen Formel (2.2.2) gegeben. Selbst bei vollständiger Präparation des Systems sind somit nicht die Werte aller Observabler festgelegt, sondern nur derjenigen Observablen, die ihrerseits mit den Observablen des vollständigen Satzes kompatibler Observabler kompatibel sind. Die Quantentheorie ist eine **statistische Beschreibung** der Realität, und die Notwendigkeit einer statistischen Beschreibung rührt nicht von unserer mangelnden Kenntnis über den Systemzustand her, sondern ist prinzipieller Natur: Der Quantentheorie zufolge können eben keine zwei nichtkompatiblen Observablen simultan wohlbestimmte Werte besitzen. Die Unbestimmtheit der einen Observable bei Festlegung der anderen ist also unvermeidlich.

In vielen Fällen werden wir aber noch nicht einmal volle Kenntnis vom Systemzustand besitzen, d.h. wir haben i.a. das System gar nicht in einem durch einen Zustandsvektor ψ repräsentierten Zustand¹³

¹³Solche Zustände des Systems werden in diesem Zusammenhang auch genauer als **reine Zustände** bezeichnet.

präpariert. In solchen Fällen kann man aber immer noch „**Quantenstatistik**“ betreiben, d.h. eine statistische Beschreibung im gleichen Sinne wie in der **klassischen Statistischen Mechanik** vornehmen. Diese statistische Beschreibung ist nun von der quantenmechanischen Statistik eines reinen Zustandes qualitativ verschieden, denn es handelt sich um eine statistische Beschreibung aufgrund einer unvollständigen Kenntnis des Systemzustandes, während die statistischen Eigenschaften des reinen Zustandes prinzipiell nicht durch genauere Präparation des Systems beseitigt werden können.

Wenden wir uns also der Frage zu, wie man das System im Falle nicht vollständig vorgenommener Präparation quantenstatistisch beschreiben kann. Eine typische Präparation dieser Art können wir uns folgendermaßen vorstellen: Nehmen wir an, wir könnten Teilchen in reinen Zuständen $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ präparieren, z.B. durch Festlegung der Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler. Diese Sätze von kompatiblen Observablen können dabei aber für jeden dieser reinen Zustände durchaus unterschiedlich sein. Insbesondere können sie auch untereinander inkompatibel sein!

Jedem dieser reinen Zustände entspricht nach der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation ein Ensemble von voneinander unabhängig immer gleichartig präparierten Teilchen, wobei der reine Zustand durch den jeweiligen Zustandsvektor $|\psi_j\rangle$ ($j \in \{1, 2, \dots, n\}$) repräsentiert wird.

Wir können nun ein **gemischtes Ensemble** (kurz ein **Gemisch**) erzeugen, indem wir einem Experimentator zufällig (und unkorreliert) immer jeweils Teilchen von irgendeinem dieser reinen Zustände schicken, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit $P_j \geq 0, \sum_{j=1}^n P_j = 1$, ein im reinen Zustand $|\psi_j\rangle$ präpariertes Teilchen. Welche statistischen Eigenschaften dieses Ensembles von Teilchen wird der Experimentator dann messen?

Diese Frage beantwortet die elementare Wahrscheinlichkeitstheorie. Angenommen der Experimentator mißt irgendeine Observable A . Vorausgesetzt das Teilchen stammt aus dem zum reinen Zustand $|\psi_j\rangle$ gehörigen Ensemble. Dann wäre die Wahrscheinlichkeit, einen möglichen Meßwert a zu erhalten, durch (2.2.2) gegeben. Die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen tatsächlich aus diesem Ensemble stammt, ist nun voraussetzungsgemäß P_j . Da wir weiter voraussetzen, daß die Teilchen unkorreliert, d.h. **stochastisch unabhängig** voneinander aus jeweils einem der n Ensembles stammen, ist für den Experimentator die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A den Meßwert a zu finden, durch

$$P(a, t) = \sum_{j=1}^n P_j w_{\psi_j}(a) = \sum_{j=1}^n P_j \langle a | \psi_j \rangle \langle \psi_j | a \rangle \quad (2.17.1)$$

gegeben.

Dies führt uns dazu, dem Gemisch den **Statistischen Operator**

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^n P_j |\Psi_j(t)\rangle \langle \Psi_j(t)| = \sum_{j=1}^n P_j \mathbf{P}_{\psi_j}(t) \quad (2.17.2)$$

zuzuordnen. Ein reiner Zustand ist bei dieser Betrachtung dann gegeben, wenn der Präparator dem Experimentator jedesmal ein Teilchen, das in genau einem Zustand $|\psi_1\rangle$ präpariert ist, zukommen läßt. Dann ist $P_1 = 1$, und der **Statistische Operator des reinen Zustandes** folglich durch den **Projektoroperator**

$$\mathbf{P}_{\psi_1} = |\psi_1\rangle \langle \psi_1| \quad (2.17.3)$$

gegeben.

Setzen wir (2.17.2) in (2.17.1) ein, ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, beim Messen der Observablen A den Wert a zu erhalten,

$$P(a, t) = \langle a | \mathbf{R} a \rangle. \quad (2.17.4)$$

2.18. Die Bewegungsgleichung für den Statistischen Operator

Diese Gleichung ist offenbar auch für einen reinen Zustand korrekt, d.h. mit der Bornschen Formel (2.2.2) kompatibel, wenn wir (2.17.3) als Statistischen Operator verwenden:

$$\langle a | \mathbf{P}_{\psi_1} a \rangle = \langle a | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | a \rangle = |\langle a | \psi_1 \rangle|^2 = w_{\psi_1}(a). \quad (2.17.5)$$

Der Statistische Operator ist offensichtlich **selbstadjungiert**, und die Wahrscheinlichkeiten sind positiv semidefinit. Summieren bzw. integrieren wir die Wahrscheinlichkeiten über ein VONS von Eigenvektoren von \mathbf{A} , erhalten wir

$$\int da P(a) = \sum_{j=1}^n P_j = 1, \quad (2.17.6)$$

wie es sein muß, denn wir wissen, daß jedes Teilchen des Gemisches, das durch $\mathbf{R}(t)$ beschrieben wird, aus einem der Ensembles, die durch die reinen Zustände $|\psi_j\rangle$ beschrieben werden, stammt und daß man bei der Messung von A mit Sicherheit einen Eigenwert a des dazugehörigen Operators \mathbf{A} erhält. Für den Erwartungswert einer beliebigen Funktion $f(\mathbf{A})$ ergibt sich

$$\langle f(\mathbf{A}) \rangle = \int da f(a) P(a) = \int da \langle a | \mathbf{R} f(\mathbf{A}) | a \rangle =: \text{Tr}[\mathbf{R}(t) f(\mathbf{A})]. \quad (2.17.7)$$

Dabei ist die **Spur** (engl. trace) eines beliebigen Operators \mathbf{B} durch

$$\text{Tr} \mathbf{B} = \int da \langle a | \mathbf{B} | a \rangle \quad (2.17.8)$$

definiert. Man kann leicht nachweisen (Übung!), daß die Spur unabhängig von dem in dieser Definition benutzten VONS $|a\rangle$ ist. Außerdem gilt unabhängig davon, ob die Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} kommutieren oder nicht

$$\text{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{Tr}(\mathbf{B}\mathbf{A}). \quad (2.17.9)$$

2.18 Die Bewegungsgleichung für den Statistischen Operator

Wir arbeiten in einem beliebigen Bild. Die Zeitabhängigkeit der Observablenoperatoren und Zustände ist also durch die Bewegungsgleichungen (2.15.1-2.15.3) bzw. die Lösungen mittels unitärer Transformationen gemäß (2.15.4) bestimmt. Die zeitliche Entwicklung des Statistischen Operators ergibt sich durch Ableiten von (2.17.2) nach der Zeit und Verwendung von (2.15.3)¹⁴:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) = \sum_{j=1}^n P_j \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{Y}(t), \mathbf{P}_{\psi_j}(t)] = -\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{Y}(t)]. \quad (2.18.1)$$

Andererseits muß aber $\mathbf{R}(t)$ der Bewegungsgleichung (2.10.10)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{X}(t)] + \frac{\partial^{\text{expl}}}{\partial t} \mathbf{R}(t) \quad (2.18.2)$$

¹⁴Man beachte, daß die P_j als zeitunabhängig angenommen werden, d.h. die Präparation des Gemisches erfolgt zu allen Zeiten in gleicher Weise.

genügen, wenn er als Funktion irgendwelcher Observabler und evtl. explizit der Zeit geschrieben wird. Ziehen wir davon (2.18.1) ab, erhalten wir wegen $\mathbf{H} = \mathbf{X} + \mathbf{Y}$ die bildunabhängige von **Neumann-Gleichung**

$$\dot{\mathbf{R}}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{H}] + \frac{\partial^{\text{expl}}}{\partial t} \mathbf{R}(t) = 0. \quad (2.18.3)$$

Es ist klar, daß jeder **selbstadjungierte positiv semidefinite Operator** \mathbf{R} als Statistischer Operator dienen kann. Dabei heißt ein hermitescher Operator positiv semidefinit, wenn für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle \psi | \mathbf{R} \psi \rangle \geq 0 \quad (2.18.4)$$

gilt. Für die Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten (evtl. explizit zeitabhängiger) Observabler $O(t)$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle &= \text{Tr} \left[\frac{d\mathbf{O}(t)}{dt} \mathbf{R}(t) + \mathbf{O}(t) \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} \right] \\ &= \text{Tr} \left(\frac{\partial^{\text{expl}} O(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}(t), \mathbf{X}(t)] \mathbf{R}(t) + \mathbf{O}(t) \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{Y}(t), \mathbf{R}(t)] \right). \end{aligned} \quad (2.18.5)$$

Den letzten Term können wir unter Verwendung von (2.17.9) noch weiter umformen:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \mathbf{O}(t) [\mathbf{Y}(t), \mathbf{R}(t)] \} &= \text{Tr} \{ \mathbf{O}(t) \mathbf{Y}(t) \mathbf{R}(t) - [\mathbf{O}(t) \mathbf{R}(t)] \mathbf{Y}(t) \} \\ &= \text{Tr} [\mathbf{O}(t) \mathbf{Y}(t) \mathbf{R}(t) - \mathbf{Y}(t) \mathbf{O}(t) \mathbf{R}(t)] \\ &= \text{Tr} \{ [\mathbf{O}(t), \mathbf{Y}(t)] \mathbf{R}(t) \}. \end{aligned} \quad (2.18.6)$$

Dies in (2.18.5) eingesetzt, ergibt wegen der Definition der **kovarianten Zeitableitung** (2.10.13)

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = \text{Tr} [\dot{\mathbf{O}}(t) \mathbf{R}(t)] = \langle \dot{\mathbf{O}}(t) \rangle, \quad (2.18.7)$$

d.h. das **Ehrenfestsche Theorem** gilt auch für gemischte Zustände.

2.19 Zusammengesetzte Systeme

Wir benötigen weiter die quantenmechanische Beschreibung zusammengesetzter Systeme, z.B. zweier (unterscheidbarer) Teilchen¹⁵. Angenommen, diese beiden Teilchen sind sehr weit voneinander entfernt, so daß wir von Wechselwirkungen absehen können, und voneinander unabhängig präpariert. Dann ist es offenbar möglich, Werte von Observablen A_1 und A_2 , die sich nur auf jeweils eines der Teilchen beziehen, simultan zu determinieren, d.h. die dazugehörigen Operatoren \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 müssen stets kommutieren. Außerdem muß sich die Wahrscheinlichkeit, daß A_1 den Wert a_1 und A_2 den Wert a_2 annehmen als Produkt aus den Einzelwahrscheinlichkeiten ergeben. Bezeichnen wir also den Zustand des Gesamtsystems mit $|\Psi(t)\rangle$, die simultanen Eigenvektoren mit $|(a_1, a_2)\rangle$ und die Zustände der einzelnen Teilchen mit $|\psi_1(t)\rangle$ und $|\psi_2(t)\rangle$, dann muß gelten

$$P_{\Psi}(a_1, a_2; t) = | \langle (a_1, a_2) | \Psi(t) \rangle |^2 = P_{\psi_1}(a_1, t) P_{\psi_2}(a_2, t) = | \langle a_1 | \psi_1(t) \rangle |^2 | \langle a_2 | \psi_2(t) \rangle |^2. \quad (2.19.1)$$

¹⁵Wie wir zu Beginn des nächsten Kapitels noch genauer ausführen werden, sind Teilchen im Rahmen der Quantentheorie nur voneinander unterscheidbar, wenn sie sich in wenigstens einer intrinsischen Eigenschaft voneinander unterscheiden lassen, z.B. wenn sie unterschiedliche elektrische Ladungen oder unterschiedlichen Spin besitzen.

2.19. Zusammengesetzte Systeme

Im Hilbertraumformalismus läßt sich dieses Verhalten durch das **Tensorprodukt** der Zustandsvektoren $|\psi_j(t)\rangle$ der einzelnen Teilchen beschreiben.

Sind \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 die Hilberträume der Zustandsvektoren der beiden Teilchen, ist deren Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ als ein neuer Hilbertraum definiert. Wir müssen dazu nur erklären, wie sich die Vektoren des neuen Vektorraums aus den Vektoren der Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 ergeben. Zunächst betrachten wir sog. **direkte Produkte zweier Vektoren**, die wir mit

$$|(\psi_1, \psi_2)\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle; \quad |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, \quad |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2 \quad (2.19.2)$$

bezeichnen. Dabei soll das Produkt \otimes linear in beiden Argumenten sein, d.h. für $\lambda_j, \mu_j \in \mathbb{C}$ und $|\psi_j\rangle, |\phi_j\rangle \in \mathcal{H}_j$ für $j \in \{1, 2\}$ soll gelten

$$\begin{aligned} (\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\phi_1\rangle) \otimes (\mu_1 |\psi_2\rangle + \mu_2 |\phi_2\rangle) = & \lambda_1 \mu_1 |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \lambda_1 \mu_2 |\psi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \\ & + \lambda_2 \mu_1 |\phi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \lambda_2 \mu_2 |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle. \end{aligned} \quad (2.19.3)$$

Seien nun $|u_n^{(1)}\rangle$ und $|u_n^{(2)}\rangle$ irgendwelche vollständigen Orthonormalbasen von \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 ¹⁶. Dann definieren wir als $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ den Vektorraum, der aus Vektoren besteht, die durch die Vektoren

$$|u_{n_1 n_2}^{(12)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}, u_{n_2}^{(2)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{n_2}^{(2)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{n_2}^{(2)}\rangle \quad (2.19.4)$$

durch (zunächst formale) Reihen der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1 n_2} |u_{n_1 n_2}^{(12)}\rangle \quad (2.19.5)$$

erzeugt werden.

Das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ wird dann auf natürliche Weise definiert, indem man zunächst erklärt, wie die Produktzustände (2.19.4) multipliziert werden,

$$\langle \psi_1, \psi_2 | \phi_1, \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle, \quad (2.19.6)$$

und dann der Braket-Ausdruck für beliebige Vektoren über die Semilinearität im ersten und Linearität im zweiten Element definiert wird. Dann bilden die $|u_{n_1 n_2}^{(12)}\rangle$ ein VONS von \mathcal{H}_{12} , und zusammen mit der Entwicklung (2.19.5) folgt dann

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{n_1, n_2} \phi_{n_1 n_2}^* \psi_{n_1 n_2}. \quad (2.19.7)$$

Es ist klar, daß nun Observablen des Gesamtsystems wieder durch selbstadjungierte Operatoren, die auf dem Hilbertraum \mathcal{H}_{12} definiert sind, repräsentiert werden.

Die einzige Neuerung gegenüber der bisher betrachteten Darstellung von Einteilchenobservablen ist die Möglichkeit, **Tensorprodukte von Einteilchenoperatoren** zu bilden. Seien dazu \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 irgendwelche Operatoren in \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 , dann definiert man ihr Tensorprodukt $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2$ zunächst durch die Wirkung auf beliebige Produktvektoren vermöge

$$\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2 |(\psi_1, \psi_2)\rangle = (\mathbf{A}_1 |\psi_1\rangle) \otimes (\mathbf{A}_2 |\psi_2\rangle) \quad (2.19.8)$$

¹⁶Wir betrachten hier der Einfachheit halber echte VONSs. Die Verallgemeinerung auf Entwicklungen nach verallgemeinerten Eigenzuständen von Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum ist kein weiteres Problem.

und setzt diese Definition mittels Entwicklung allgemeiner Vektoren in \mathcal{H}_{12} nach Produktvektoren (2.19.5) linear auf ganz \mathcal{H}_{12} fort. Es ist dann unmittelbar klar, daß für zwei selbstadjungierte Einteilchenoperatoren \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 auch $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2$ wieder selbstadjungiert ist.

Weiter folgt, daß man Einteilchenobservablen im Gesamtsystem aus zwei Teilchen durch Operatoren der Form $\mathbf{A}_1^{(12)} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbb{1}$ bzw. $\mathbf{A}_2^{(12)} = \mathbb{1} \otimes \mathbf{A}_2$ zu repräsentieren hat. Solche Einteilchenobservablen, die sich auf verschiedene Teilchen beziehen, kommutieren, so daß solche Observablen stets kompatibel sind.

Kommen wir nun auf unsere Ausgangssituation zurück, daß zwei Teilchen voneinander unabhängig präpariert werden, so daß die Wahrscheinlichkeit für das Resultat einer simultanen Messung irgendwelcher Einteilchenobservablen, die sich jeweils auf das eine bzw. das andere Teilchen beziehen, das Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten ergeben sollte. Wir müssen nun noch nachprüfen, daß in dem eben formulierte Ansatz des Produktraums die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation mit dieser Annahme kompatibel ist. Die beiden Teilchen im Zweiteilchenzustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ sind definitionsgemäß dann voneinander unabhängig präpariert, wenn $|\psi\rangle$ ein Produktzustand ist, d.h.

$$|\psi\rangle = |(\psi_1, \psi_2)\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (2.19.9)$$

Sei dann $|(a_1, a_2)\rangle$ ein simultaner Eigenzustand der Einteilchenoperatoren $\mathbf{A}_1^{(12)}$ und $\mathbf{A}_2^{(12)}$. Offenbar ist

$$|(a_1, a_2)\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle \quad (2.19.10)$$

und folglich nach der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation die Wahrscheinlichkeit einer simultanen Messung der jeweiligen Einteilchenobservablen

$$P_\psi(a_1, a_2) = |\langle(a_1, a_2)|\psi\rangle|^2 = |\langle a_1|\psi_1\rangle|^2 |\langle a_2|\psi_2\rangle|^2 = P_{\psi_1}(a_1)P_{\psi_2}(a_2), \quad (2.19.11)$$

wie wir es eingangs gefordert haben.

Es ist klar, daß allgemeinere Zustände, insbesondere solche, die sich aus Produktzuständen durch Zeitentwicklung **wechselwirkender Teilchen** ergeben, i.a. keine Produktzustände sondern allgemeine Superpositionen von Produktzuständen sind.

2.20 Reduzierte Statistische Operatoren

Interessante Fragestellungen treten auch auf, wenn man zusammengesetzte Systeme betrachtet, sich aber nur für das Verhalten von Teilsystemen interessiert. Wie wir in Abschnitt 2.17 gesehen haben, wird man den quantenmechanischen Zustand eines System i.a. durch einen **Statistischen Operator** $\mathbf{R}(t)$ beschreiben. Dabei wird auch gleich der Fall eines reinen Zustandes miteinfaßt. Wie wir oben gesehen haben, liegt ein solcher dann vor, wenn $\mathbf{R}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle\Psi(t)|$ ist. Es ist klar, daß auch für zusammengesetzte Systeme wieder jeder selbstadjungierte positiv semidefinite Operator $\mathbf{R}(t)$ mit $\text{Tr } \mathbf{R}(t) = 1$ als Statistischer Operator auftreten kann (wobei die Zeitabhängigkeit durch die **von Neumann-Gleichung** (2.18.3) gegeben ist).

Betrachten wir nun wieder ein Zweiteilchensystem, so können wir nach statistischen Eigenschaften für eines der beiden Teilchen fragen, wobei das Gesamtsystem in irgendeinem i.a. gemischten Zustand, der durch einen Statistischen Operator $\mathbf{R}_{12}(t)$ beschrieben wird, präpariert sein darf. Wie groß ist also die Wahrscheinlichkeit, daß bei Messung einer Einteilchenobservablen A_1 , im Gesamtraum durch $\mathbf{A}_1^{(12)} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbb{1}$ beschrieben, gerade ein Eigenwert a_1 auftritt? Um diese Frage zu beantworten, verwenden wir ein VONS von Eigenvektoren von $\mathbf{A}_1^{(12)}$. Für irgendeine auf Teilchen 2 bezogene Einteilchenobservable können wir die Produktzustände $|(a_1, a_2)\rangle$ als ein solches VONS verwenden. Gem. (2.17.4)

2.20. Reduzierte Statistische Operatoren

ist die Wahrscheinlichkeit, diese simultanen Eigenwerte zu finden,

$$P_{\mathbf{R}}^{(12)}(a_1, a_2; t) = \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}(t) | (a_1, a_2) \rangle, \quad (2.20.1)$$

d.h. die gesuchte Wahrscheinlichkeit, am Teilchen 1 bei der Messung von A_1 den Wert a_1 zu erhalten, muß durch

$$P_{\mathbf{R}}^{(1)}(a_1; t) = \sum_{a_2} P_{\mathbf{R}}^{(12)}(a_1, a_2; t) =: \langle a_1 | \mathbf{R}_1^{(\text{red})}(t) | a_1 \rangle \quad (2.20.2)$$

gegeben sein. Diese Wahrscheinlichkeiten kann man durch Messung der Observablen A_1 an Teilchen 1 in Ensembles von im Zustand \mathbf{R}_{12} präparierten Zweiteilchensystemen ermitteln. Dabei ist es unerheblich, welchen Wert man für die auf Teilchen 2 bezogene Einteilchenobservable A_2 messen würde. Es ist auch einfach zu zeigen, daß es beim Summieren über a_2 in (2.20.2) auf die konkrete Wahl der Observablen A_2 nicht ankommt, d.h. man erhält dasselbe Resultat, wenn man stattdessen irgendeine andere Einteilchen-Observable B_2 benutzt.

Daher ist es sinnvoll, den in (2.20.2) definierten auf Teilchen 1 bezogenen **reduzierten Statistischen Operator**

$$\mathbf{R}_1^{(\text{red})}(t) = \sum_{a_1} |a_1\rangle \langle a_1| P_{\mathbf{R}}^{(1)}(a_1; t) = \sum_{a_1, a_2} |a_1\rangle \langle a_1| \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}_{12}(t) | (a_1, a_2) \rangle \quad (2.20.3)$$

einzuführen, der unabhängig von dem verwendeten VONS $| (a_1, a_2) \rangle$ ist (Beweis als Übung!). Zur Abkürzung definiert man

$$\text{Tr}_2 \mathbf{R}_{12} := \sum_{a_1, a_2} |a_1\rangle \langle a_1| \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}_{12}(t) | (a_1, a_2) \rangle. \quad (2.20.4)$$

Man beachte, daß dies einen Operator im Produktraum $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ auf einen Operator in \mathcal{H}_1 abbildet. Es ist auch klar, wie die entsprechenden Formeln lauten, wenn A_1 und/oder A_2 ganz oder teilweise kontinuierliche Spektren besitzen.

Man überlegt sich auch leicht, daß $\mathbf{R}_1^{(\text{red})}$ genau dann ein reiner Zustand ist, wenn \mathbf{R}_{12} der Projektionsoperator auf einen Produktzustand, d.h. von der Form $|(\psi_1, \psi_2)\rangle \langle(\psi_1, \psi_2)|$ ist. I.a. führt aber ein reiner Zweiteilchenzustand $\mathbf{R}_{12} = |\Psi\rangle \langle\Psi|$ zu einem gemischten Zustand für den reduzierten Einteilchenzustand $\mathbf{R}_1^{(\text{red})}$. In diesem Fall besitzt dann zwar das Zweiteilchensystem scharf definierte Werte für diejenigen Observablen, für die $|\Psi\rangle$ Eigenzustand ist, aber es gibt keine Einteilchenobservablen, denen scharf bestimmte Werte zukommen. Diese Eigenschaften quantenmechanischer Systeme führen auf das sogenannte **Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon** [EPR35, Boh35], auf das wir hier nicht näher eingehen wollen.

2. Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

Kapitel 3

Eindimensionale Probleme

In diesem Abschnitt wollen wir die einfachsten Energie-Eigenwertprobleme besprechen, und zwar für die Bewegung eines Teilchens in nur einer Raumdimension. Das ermöglicht eine umfassende Analyse des Eigenwertproblems, stellt wichtige analytische Methoden zur Lösung realistischerer Probleme bereit und veranschaulicht grundlegende quantenphysikalische Eigenschaften von Teilchen.

3.1 Allgemeines zur eindimensionalen Schrödingergleichung

3.1.1 Problemstellung

Im folgenden betrachten wir Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem Potential entlang der x -Achse:

$$i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = \mathbf{H}\Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x, t) + V(x)\Psi(x, t). \quad (3.1.1)$$

Wir werden uns auf die grundlegenden physikalischen Argumente beschränken. Eine ausführlichere Behandlung der mathematischen Struktur der Schrödingergleichung findet sich in [Mes99].

Wir betrachten Potentiale, die im Unendlichen bestimmten konstanten Grenzwerten zustreben:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = V_0, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = 0. \quad (3.1.2)$$

Dabei muß die Konvergenz gegen diese Werte schneller als mit $1/x$ erfolgen, d.h. es soll genauer

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x[V(x) - V_0] = 0, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} xV(x) = 0 \quad (3.1.3)$$

gelten. Es ist klar, daß die Wahl 0 des Grenzwertes für $x \rightarrow 0$ keine Beschränkung der Allgemeinheit bedeutet, da wir in dem Falle, daß das Potential dort gegen einen anderen Grenzwert strebt, durch eine einfache Verschiebung des Energienullpunkts die hier betrachtete Situation herstellen können, ohne daß dies den physikalischen Gehalt der Betrachtung ändert.

Wir können nun die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (3.1.1) nach Energieeigenfunktionen entwickeln. Die Energieeigenfunktionen sind durch das Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (3.1.4)$$

3. Eindimensionale Probleme

gegeben. Dabei wird i.a. die Menge der Energieeigenwerte sowohl einen diskreten als auch einen kontinuierlichen Anteil enthalten. Wie wir gleich sehen werden, entsprechen die diskreten Energieeigenwert gebundenen Zuständen, denn die dazugehörigen Energieeigenfunktionen ψ_E sind quadratintegabel und können auf 1 normiert werden. Die Eigenfunktionen zu kontinuierlichen Eigenwerten besitzen im Unendlichen asymptotisch den Charakter ebener Wellen und beschreiben dort somit die ungebundene „quasifreie“ Bewegung des Teilchens. Diese Wellenfunktionen werden auf die δ -Distribution in der Energie normiert.

Numerieren wir die diskreten Energieeigenwerte und -eigenfunktionen mit $n \in \mathbb{N}$ durch (dabei können je nach der konkreten Form des Potentials i.a. sowohl endlich oder unendlich viele als auch gar keine diskreten Energieeigenwerte existieren) und bezeichnen die Menge der kontinuierlichen Eigenwerte mit $C_E \subseteq \mathbb{R}$, so verlangen wir also

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) = \delta_{nn'}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E'}^*(x) \psi_E(x) = \delta(E - E') \quad \text{für } E, E' \in C_E. \quad (3.1.5)$$

Daß die Eigenfunktionen zu verschiedenen Energieeigenwerten orthogonal zueinander sind, folgt allgemein aus der Hermitezität des Hamiltonoperators (s. Vorlesung).

Es ist dann leicht zu zeigen, daß in der Tat jede Funktion

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \psi_n(x) + \int_{C_E} dE c(E) \exp\left(-\frac{iE t}{\hbar}\right) \psi_E(x) \quad (3.1.6)$$

die zeitabhängige Schrödingergleichung (3.1.1) löst.

Wie man leicht mit Hilfe der Orthonormierungsbedingungen (3.1.5) nachweist (vgl. Präsenzübung 6 c), hängt die Normierung von $\Psi(x, t)$ mit der Normierung der c_n und $c(E)$ zusammen vermöge

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_n |c_n|^2 + \int_{C_E} dE |c(E)|^2 \stackrel{!}{=} 1. \quad (3.1.7)$$

Bei vorgegebener Anfangswellenfunktion $\Psi(x, t = 0)$ sind die Koeffizienten c_n und $c(E)$ in (3.1.6) durch

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \Psi(x, t = 0), \quad c(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \Psi(x, t = 0) \quad (3.1.8)$$

bestimmt (man rechne das nach!). Haben wir uns die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen beschafft, können wir also die Schrödingergleichung bei irgendeiner vorgegebenen Anfangsbedingung lösen, wobei i.a. die Entwicklung (3.1.6) i.a. nur numerisch konkret ausgewertet werden kann.

3.1.2 Asymptotik der Energieeigenfunktionen

Betrachten wir nun also das Energieeigenwertproblem für die Potentiale der oben beschriebenen Art. Zur Vereinfachung führen wir die folgenden Variablen ein:

$$\epsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x). \quad (3.1.9)$$

Dann können wir (3.1.4) in der Form

$$\psi_E''(x) = [U(x) - \epsilon] \psi_E(x) \quad (3.1.10)$$

3.1. Allgemeines zur eindimensionalen Schrödingergleichung

schreiben. Wir wollen nun die Form der Wellenfunktion für $x \rightarrow \pm\infty$ herausfinden.

Für $x \rightarrow -\infty$ lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung (3.1.10) aufgrund der Annahmen über das asymptotische Verhalten des Potentials (3.1.2)

$$\psi_E''(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} -\epsilon \psi(x). \quad (3.1.11)$$

Diese lineare Differentialgleichung besitzt zwei linear unabhängige Lösungen $\exp(\pm i\sqrt{\epsilon}x)$, so daß die allgemeine Lösung eine Superposition dieser beiden Lösungen sein muß:

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} A_1 \exp(+i\sqrt{\epsilon}x) + B_1 \exp(-i\sqrt{\epsilon}x). \quad (3.1.12)$$

Wir müssen nun noch genauer über die möglichen Energieeigenwerte nachdenken. Falls nämlich $\epsilon > 0$, so ist ψ_E für $x \rightarrow -\infty$ in jedem Falle ein ungebundener Zustand, d.h. ϵ liegt im kontinuierlichen Spektrum, und es gibt keine weiteren Einschränkungen an ϵ vom asymptotischen Verhalten im Unendlichen, und dann sind allgemeine A_1 und B_1 in (3.1.12) erlaubt. Falls aber $\epsilon \leq 0$, so ist genauer $\sqrt{\epsilon} = i\sqrt{|\epsilon|}$ zu schreiben, und damit die Wellenfunktion für $x \rightarrow \infty$ nicht exponentiell (bzw. für $\epsilon = 0$ linear) anwächst, muß notwendig $A_1 = 0$ sein, d.h. wir haben genauer

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} \begin{cases} A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) & \text{mit } k_1 = \sqrt{\epsilon} \quad \text{falls } \epsilon > 0 \\ B_1 \exp(\chi_1x) & \text{mit } \chi_1 = \sqrt{|\epsilon|}, \quad \text{falls } \epsilon < 0. \end{cases} \quad (3.1.13)$$

Für $x \rightarrow +\infty$ ergibt sich

$$\psi_E''(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\cong} (U_0 - \epsilon)\psi(x), \quad (3.1.14)$$

und wir können exakt analoge Überlegungen wie eben anstellen. Es ergibt sich dann schließlich

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\cong} \begin{cases} A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x) & \text{mit } k_2 = \sqrt{\epsilon - U_0} \quad \text{falls } \epsilon > U_0 \\ A_2 \exp(-\chi_2x) & \text{mit } \chi_2 = \sqrt{U_0 - \epsilon}, \quad \text{falls } \epsilon < U_0. \end{cases} \quad (3.1.15)$$

Nun können wir die verschiedenen möglichen Fälle für ϵ im Hinblick auf das Verhalten der Wellenfunktionen analysieren

- $\epsilon < 0$: Dies entspricht gemäß (3.1.13) und (3.1.15) mit Sicherheit gebundenen Zuständen, d.h. die Wellenfunktion fällt für $x \rightarrow \pm\infty$ exponentiell ab, d.h.

$$\begin{aligned} \psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} B_1 \exp(\chi_1x) & \quad \text{mit } \chi_1 = \sqrt{|\epsilon|} \\ \psi_E(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\cong} A_1 \exp(-\chi_2x) & \quad \text{mit } \chi_2 = \sqrt{U_0 - \epsilon}. \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

Wir werden weiter unten noch zeigen, daß diesen ϵ notwendig diskrete Energieeigenwerte $E = \hbar^2 \epsilon / (2m)$ entsprechen. Daß es sich um gebundene Zustände handeln muß, wird auch physikalisch verständlich, wenn man sich das analoge klassische Problem vor Augen führt: Wenn $E < 0$ ist, kann das Teilchen weder nach $x \rightarrow \infty$ noch nach $x \rightarrow -\infty$ laufen, da sonst der Energiesatz verletzt würde, denn die potentielle Energie $p^2/(2m) = mv^2/2$ ist notwendig positiv und das Potential nach Annahme asymptotisch gleich 0 bzw. $V_0 > 0$. Damit also gebundene Zustände überhaupt möglich werden, muß das Potential irgendwo negativ werden, also eine Art „Potentialmulde“ bilden (vgl. Abb. 3.1). Unsere eben gefundenen asymptotischen Lösungen zeigen aber, daß eine von 0 verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens außerhalb des klassisch erlaubten Bereiches gibt! Dieses Phänomen ist klassisch nicht erklärbar und wird als **Tunnel- oder Gamov-Effekt** bezeichnet.

3. Eindimensionale Probleme

- $0 < \epsilon < U_0$: Gemäß (3.1.13) und (3.1.15) kann sich das Teilchen nach $x \rightarrow -\infty$ hin quasi-frei bewegen, nicht aber nach $x \rightarrow \infty$. Es sind alle $E = \hbar^2 \epsilon / (2m)$ in diesem Bereich erlaubt, so daß E in diesem Falle zum kontinuierlichen Bereich der Energieeigenwerte gehört. Da für $x \rightarrow \infty$ nur genau eine, nämlich die exponentiell fallende Lösung erlaubt ist, gibt es zu jedem Wert für E genau eine Energieeigenfunktion, d.h. dieser Teil der Energieeigenwerte ist **nicht entartet**. Auch hier haben wir wieder einen Tunneleffekt. Der Bereich $x \rightarrow \infty$ ist wie oben erläutert für das Teilchen verboten, aber die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dort nicht 0.
- $\epsilon > U_0$: Gemäß (3.1.13) und (3.1.15) ist das Teilchen bzgl. der Bewegung nach beiden Richtungen $x \rightarrow \pm\infty$ ungebunden. Die entsprechenden Energieeigenwerte sind also alle erlaubt und gehören somit zum kontinuierlichen Teil der Eigenwerte. In beiden Regionen sind allgemeine Superpositionen aus zwei Lösungen erlaubt, d.h. in diesem Bereich sind die Eigenwerte zweifach entartet. Auch das ist an dem klassischen Analogon verständlich: Das Teilchen kann in diesem Fall bei vorgegebener Energie in beiden asymptotischen Regionen sowohl nach rechts (entsprechend den Wellenfunktionen mit Koeffizienten $A_{1,2}$) bzw. links (entsprechend den Wellenfunktionen mit Koeffizienten $B_{1,2}$) laufen.

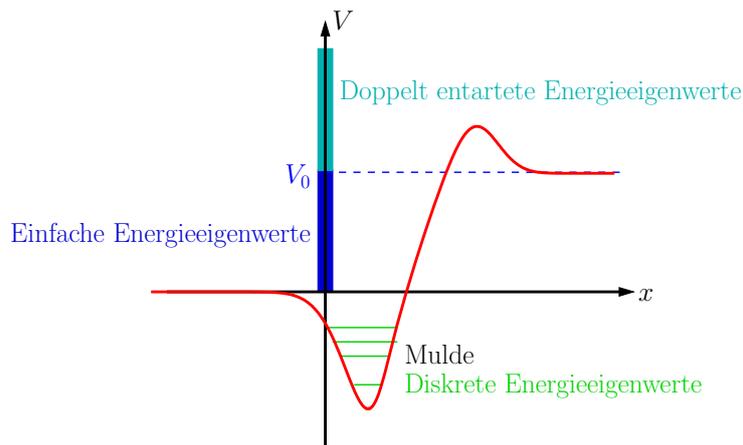


Abbildung 3.1: Potential und qualitatives Energieeigenwertspektrum zum zugehörigen Schrödingerschen Energieeigenwertproblem.

3.1.3 Kontinuitätsgleichung

Wir können weitere recht allgemeine Schlüsse aus dem asymptotischen Verhalten der Wellenfunktionen ziehen, wenn wir die Kontinuitätsgleichung für den hier diskutierten eindimensionalen Fall heranziehen. Aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung (3.1.1) folgt sofort, daß die Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(x, t) + \partial_x j(x, t) &= 0 \quad \text{mit} \\ \rho(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 \\ j(x, t) &= \frac{\hbar}{2im} \{ \Psi^*(x, t) \partial_x \Psi(x, t) - [\partial_x \Psi^*(x, t)] \Psi(x, t) \} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\Psi^*(x, t) \partial_x \Psi(x, t)] \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

gilt. Für eine quadratintegrale Funktion $\Psi(x, t)$ bedeutet dies, daß die Normierung der Wellenfunktion mit der Zeit konstant bleibt (s. Vorlesung), d.h. hat man Ψ zur Zeit $t = 0$ auf 1 normiert, so ist

3.1. Allgemeines zur eindimensionalen Schrödinger-Gleichung

dies automatisch auch für alle späteren Zeiten gewährleistet, vorausgesetzt Ψ erfüllt die Schrödinger-Gleichung. Mathematisch gesehen ist dies Folge der **Unitarität des Zeitentwicklungsoperators**, die aus der Hermitizität des Hamiltonoperators folgt.

Für die Energieeigenfunktionen

$$\Psi_E(x, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(x), \quad (3.1.18)$$

wobei hier E sowohl im diskreten als auch im kontinuierlichen Teil des Spektrums liegen darf, ist offenbar die Wahrscheinlichkeitsdichte ϱ zeitlich konstant. Dies zeichnet die Energieeigenfunktionen physikalisch als die **stationären Zustände** des Systems aus: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung als die in der Wellenfunktion enthaltene physikalisch relevante Information ist zeitlich konstant. Demgemäß muß aufgrund der Kontinuitätsgleichung auch der Strom zeitlich konstant sein. In der Tat folgt für die Wellenfunktion (3.1.18)

$$j_E(x, t) = j_E(x) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}[\psi_E^*(x) \psi_E'(x)]. \quad (3.1.19)$$

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt weiter

$$\partial_t \varrho_E(x, t) = 0 = -j_E'(x) \rightarrow j_E(x) = j_E = \text{const.} \quad (3.1.20)$$

Der Strom ist also eine Konstante.

Wir können nun den Strom für die Energieeigenzustände aus dem oben hergeleiteten asymptotischen Verhalten bestimmen.

Für gebundene Zustände ($E < 0$) und die Zustände zu den einfach entarteten Energieeigenwerten im kontinuierlichen Spektrum $0 < E < V_0$, ergibt sich für $x \rightarrow \infty$, daß $j_E = 0$ sein muß.

Für $0 < E < V_0$ gilt andererseits im Limes $x \rightarrow -\infty$

$$j_E = 0 = \frac{\hbar k_1}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2). \quad (3.1.21)$$

Es muß also $|A_1| = |B_1| := 1/2|\tilde{A}_1|$ sein. Durch geeignete Wahl der Phasenfaktoren der entsprechenden beiden nach rechts bzw. links laufenden Teilwellen, können wir demnach stets erreichen, daß mit $\tilde{A} = |\tilde{A}_1|$ gilt

$$A_1 = \frac{1}{2} \tilde{A} \exp(+i\delta_1) \quad B_1 = \frac{1}{2} \tilde{A} \exp(-i\delta_1), \quad (3.1.22)$$

und dies in (3.1.15) eingesetzt ergibt

$$\psi_E(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} \tilde{A} \cos(k_1 x + \delta). \quad (3.1.23)$$

Für $E > V_0$ ergibt die Stromerhaltung für die Koeffizienten der asymptotischen Wellenfunktion $x \rightarrow \pm\infty$

$$j_E = \frac{\hbar k_1}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) = \frac{\hbar k_2}{m} (|A_2|^2 - |B_2|^2). \quad (3.1.24)$$

Wir wenden uns nun nochmals den möglicherweise existierenden gebundenen Zuständen zu. Vernachlässigen wir zunächst die Bedingung der Quadratintegrabilität der Wellenfunktionen, gibt es i.a. zu jedem $E < 0$ zwei linear unabhängige Lösungen, die sich jeweils so wählen lassen, daß die eine im positiv

3. Eindimensionale Probleme

Unendlichen, die andere im negativ Unendlichen exponentiell fällt:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(+)} & \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} A_1^{(+)} \exp(-x_1 x) + B_1^{(+)} \exp(x_1 x) \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2^{(+)} \exp(-x_2 x), \end{cases} \\ \psi_E^{(-)} & \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} B_1^{(-)} \exp(x_1 x) \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2^{(-)} \exp(-x_2 x) + B_2^{(-)} \exp(x_2 x). \end{cases} \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

Wegen der Quadratintegrabilität muss aber $A_1^{(+)} = 0$ und $A_2^{(-)} = 0$ sein. Es kann also nur dann ein gebundener Zustand vorliegen, wenn $\psi_E^{(+)} = C \psi_E^{(-)}$ mit $C = \text{const.}$ Dies zeigt, wie schon oben erläutert, daß die zu gebundenen Zuständen gehörigen Energieeigenwerte $E < 0$ nicht entartet sind, d.h. wenn ein gebundener Zustand existiert, ist die dazugehörige Eigenfunktion bis auf eine Normierungskonstante eindeutig bestimmt.

Wir betrachten nun die **Wronskideterminante** zu zwei Lösungen von (3.1.10) zu Energieeigenwerten E und E'

$$W(\psi_E, \psi_{E'}; x) := \psi_E(x) \psi_{E'}'(x) - \psi_E'(x) \psi_{E'}(x). \quad (3.1.26)$$

Aus (3.1.10) folgt dann unmittelbar

$$\partial_x W(\psi_E, \psi_{E'}; x) = -(\epsilon - \epsilon') \psi_E \psi_{E'}. \quad (3.1.27)$$

Für irgendein festes $a \in \mathbb{R}$ ist also

$$W_a(\psi_E, \psi_{E'}; x) := W(\psi_E, \psi_{E'}; x) - W(\psi_E, \psi_{E'}; a) = -(\epsilon - \epsilon') \int_a^x dx' \psi_E(x') \psi_{E'}(x'). \quad (3.1.28)$$

Es seien weiter zu jedem Wert E die Funktionen $\psi_E^{(a)}$ die Lösungen der Schrödingergleichung mit fixierten Anfangsbedingungen bei $x = a$: $\psi_E^{(a)}(x = a) = C_1$, $\psi_E^{(a)'}(x = a) = C_2$. Für diese Funktionen gilt dann offenbar $W_a = W$.

Jetzt betrachten wir die Ableitung von W für diese Funktionen nach ϵ in der Umgebung eines Eigenwertes im kontinuierlichen Spektrum. Bezeichne dazu δ die Variation der jeweiligen Größe bei einer Änderung von E zu $E + \delta E$ bzw. ϵ zu $\delta \epsilon$. Dann folgt einerseits aus (3.1.28)

$$\delta W_a = W(\psi_E^{(a)}, \psi_E^{(a)} + \delta \psi_E^{(a)}; x) = W(\psi_E^{(a)}, \delta \psi_E^{(a)}; x) = -\delta \epsilon \int_a^x dx [\psi_E^{(a)}(x)]^2. \quad (3.1.29)$$

Andererseits folgt für

$$f_E^{(a)}(x) = \frac{\psi_E^{(a)'}(x)}{\psi_E^{(a)}(x)} \quad (3.1.30)$$

bei Variation nach E :

$$\delta f_E^{(a)}(x) = \frac{W(\psi_E^{(a)}, \delta \psi_E^{(a)}; x)}{[\psi_E^{(a)}]^2} \quad (3.1.31)$$

Kombiniert man dies mit (3.1.29), erhält man

$$\partial_\epsilon f_E^{(a)}(x) = -\frac{1}{[\psi_E^{(a)}(x)]^2} \int_a^x dx [\psi_E^{(a)}(x)]^2. \quad (3.1.32)$$

3.1. Allgemeines zur eindimensionalen Schrödingergleichung

Das bedeutet, daß die logarithmische Ableitung der Energieeigenfunktionen zu fixierten Anfangsbedingungen bei $x = a$ monoton fallend für $x > a$ und monoton wachsend für $x < a$ als Funktionen von E (bzw. ϵ) sind.

Nehmen wir nun an, es sei $E < 0$ ein Eigenwert im kontinuierlichen Teil des Eigenwertspektrums. Wir können dann für die Wellenfunktionen $\psi_E^{(\pm)}$ offenbar $a \rightarrow \pm\infty$ wählen. Die Funktion $f_E^{(+)}(x)$ ist also bei festgehaltenem x als Funktionen von E stets monoton wachsend und $f_E^{(-)}(x)$ monoton fallend. Wie wir oben gezeigt haben, müssen die Wellenfunktionen $\psi_E^{(\pm)}$ aber (bis auf eine multiplikative Konstante) gleich sein, und das bedeutet $f_E^{(+)} = f_E^{(-)}$. Dies ist ein Widerspruch, und daher muß jedes $E < 0$ notwendig zum diskreten Spektrum gehören.

3.1.4 Zur Normierung der Energieeigenfunktionen

Während die Normierung der Energieeigenfunktionen für diskrete Energieeigenwerte, also für gebundene Zustände, gemäß (3.1.5) kein prinzipielles Problem darstellt, müssen wir die Normierung auf die δ -Distribution für ungebundene Zustände genauer ansehen. Für die Eigenfunktionen zu einfachen Eigenwerten ist es klar, daß das Normierungsintegral in (3.1.5) $\propto \delta(E - E')$ ist, und wir müssen lediglich den Koeffizienten bestimmen. Für die doppelt entarteten Eigenzustände ist es nicht unmittelbar klar, daß irgendwelche zwei linear unabhängigen Lösungen orthogonal zueinander sind, aber wir können stets Linearkombinationen finden, die orthogonal sind.

Wir können also annehmen, daß die Eigenfunktionen einer vollständigen Basis allesamt zueinander orthogonal sind. Es bleibt uns also lediglich noch die Normierung für die ungebundenen Zustände zu bestimmen.

Beginnen wir mit dem Fall $0 < E, E' < V_0$. Wir haben dann, wie eben überlegt,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) = C(E) \delta(E - E'). \quad (3.1.33)$$

Wir können dies formal zeigen, indem wir (3.1.28) mit $x \rightarrow \infty$ verwenden. Dann ergibt sich mit der asymptotischen Form für die Wellenfunktion für $a \rightarrow -\infty$ gemäß (3.1.23)

$$\begin{aligned} \int_a^{\infty} dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) &\underset{a \rightarrow -\infty}{\cong} \frac{\tilde{A}\tilde{A}'}{k_1'^2 - k_1^2} [\sin(k_1'a + \delta') \cos(k_1a + \delta)] \\ &= -\frac{\tilde{A}\tilde{A}'k_1'}{2(k_1^2 - k_1'^2)} \left\{ (k_1 + k_1') \sin[(k_1 - k_1')a + \delta - \delta'] \right. \\ &\quad \left. + (k_1' - k_1) \sin[(k_1 + k_1')a + \delta - \delta'] \right\} \\ &\xrightarrow{a \rightarrow -\infty} \frac{\tilde{A}^2}{2} \pi \delta(k_1 - k_1') = 2\pi |A_1|^2 \delta(k_1 - k_1') = \frac{2\pi \hbar^2 k_1}{m} |A_1|^2 \delta(E - E'). \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

Dabei haben wir verwendet, dass

$$\text{w-lim}_{a \rightarrow \pm\infty} \frac{\sin(ka)}{k} = \pi \delta(k) \quad (3.1.35)$$

ist. Das beweist man durch Integration mit einer Testfunktion $\Phi(k)$ und Substitution $K = ka$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k) \frac{\sin(ka)}{k} = \int_{-\infty}^{\infty} dK \Phi(K/a) \frac{\sin K}{K} \xrightarrow{a \rightarrow \pm\infty} \Phi(0) \int_{-\infty}^{\infty} dK \frac{\sin K}{K} = \pi \Phi(0). \quad (3.1.36)$$

3. Eindimensionale Probleme

Wir müssen also die Wellenfunktion so normieren, daß die Koeffizienten A_1 und B_1 in (3.1.13) die Bedingung

$$\frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2 = \frac{1}{2\pi \hbar}. \quad (3.1.37)$$

erfüllen, wobei $|A_1|^2 = |B_1|^2$ aus der Stromerhaltung folgt (vgl. Abschn. 3.1.3, Gl. (3.1.21)). Anders ausgedrückt muß die Wellenfunktion so normiert sein, daß der Anteil des Stromes, der von $x \rightarrow -\infty$ auf den Ursprung $x = 0$ zufließt, d.h. gem. (3.1.21)

$$j_{-\infty}^{(R)} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{1}{2\pi \hbar} \quad (3.1.38)$$

normiert ist.

Betrachten wir nun den Fall $E > V_0$ bzw. $\epsilon > U_0$. Wie oben erörtert, ist jeder dieser verallgemeinerten Energieeigenwerte zweifach entartet, und wir wollen im folgenden zwei orthonormierte verallgemeinerte Eigenfunktionen finden. Betrachten wir also die allgemeinst möglichen Wellenfunktionen, die gemäß (3.1.13) und (3.1.15) das asymptotische Verhalten

$$\psi_E(x) \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x) \end{cases} \quad (3.1.39)$$

aufweisen. Für zwei solche Lösungen ψ_E und $\tilde{\psi}_{E'}$ ergibt sich daraus für die Wronski-Determinante

$$W[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, x] \underset{x \rightarrow -\infty}{\cong} -i(k_1 - k'_1) \{A_1 \tilde{A}'_1 \exp[i(k_1 + k'_1)x] - B_1 \tilde{B}'_1 \exp[-i(k_1 + k'_1)x]\} \\ -i(k_1 + k'_1) \{A_1 \tilde{B}'_1 \exp[i(k_1 - k'_1)x] - \tilde{A}'_1 B_1 \exp[-i(k_1 - k'_1)x]\} \quad (3.1.40)$$

und

$$W[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, x] \underset{x \rightarrow +\infty}{\cong} -i(k_2 - k'_2) \{A_2 \tilde{A}'_2 \exp[i(k_2 + k'_2)x] - B_2 \tilde{B}'_2 \exp[-i(k_2 + k'_2)x]\} \\ -i(k_2 + k'_2) \{A_2 \tilde{B}'_2 \exp[i(k_2 - k'_2)x] - \tilde{A}'_2 B_2 \exp[-i(k_2 - k'_2)x]\} \quad (3.1.41)$$

Dabei ist $k_1 = \sqrt{\epsilon}$, $k'_1 = \sqrt{\epsilon'}$ und $k_2 = \sqrt{\epsilon - U_0}$, $k'_2 = \sqrt{\epsilon' - U_0}$.

Aufgrund der Energieeigenwertgleichung in der Form (3.1.10) gilt

$$W'[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, x] = (\epsilon - \epsilon') W[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, x]. \quad (3.1.42)$$

Für $E' = E$ ergibt sich daraus, dass $W = \text{const}$ ist, was eine Verallgemeinerung der Stromerhaltungsgleichung ergibt:

$$(A_2 \tilde{B}'_2 - \tilde{A}'_2 B_2) k_2 = (A_1 \tilde{B}'_1 - \tilde{A}'_1 B_1) k_1. \quad (3.1.43)$$

Aus (3.1.42) ergibt sich das regularisierte verallgemeinerte Normierungsintegral

$$I_a(k_1, k'_1) = \int_{-a}^a dx \psi_E(x) \tilde{\psi}_{E'}(x) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon'} \{W[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, a] - W[\psi_E, \tilde{\psi}_{E'}, -a]\}. \quad (3.1.44)$$

Wir benötigen den Grenzfalle $a \rightarrow \infty$, d.h. wir können die asymptotischen Formen (3.1.40) und (3.1.41) sowie $\epsilon - \epsilon' = k_1^2 - k_1'^2 = k_2^2 - k_2'^2$ verwenden. Außerdem benötigen wir zur Bestimmung des

3.1. Allgemeines zur eindimensionalen Schrödingergleichung

schwachen Limes' nur das Verhalten für $E' \rightarrow E$ bzw. $k'_1 \rightarrow k_1$, denn für $k'_1, k_1 > 0$ können wir das Integral über eine beliebige Testfunktion $\Phi(k_1)$ wie folgt schreiben

$$\int_0^\infty dk'_1 I_a(k_1, k'_1) \Phi(k'_1) = \int_{-\infty}^{k_1-\delta} dk'_1 \Phi(k'_1) + \int_{k_1-\delta}^{k_1+\delta} dk'_1 \Phi(k'_1) + \int_{k_1+\delta}^\infty dk'_1 \Phi(k'_1). \quad (3.1.45)$$

Dabei muß natürlich sichergestellt sein, dass $I_a(k_1, k'_1)$ für $k'_1 \rightarrow k_1$ keine Singularität aufweist, was wir gleich zeigen werden. Ansonsten werten wir (3.1.45) für $\delta \rightarrow 0^+$ aus. Für das erste Integral folgt für die in I_a auftretenden Exponentialfunktionen durch Substitution von $K = a(k'_1 - k_1)$

$$\int_{-\infty}^{k_1-\delta} dk'_1 \Phi(k'_1) \frac{1}{k_1 - k'_1} \exp[ia(k_1 - k'_1)] = \int_{-\infty}^{-a\delta} dK \Phi(k_1 + K/a) \frac{\exp(-iK)}{K} \xrightarrow{a \rightarrow \infty} 0. \quad (3.1.46)$$

Analoge Rechnungen gelten für die anderen Exponentialausdrücke und auch das 3. Integral in (3.1.44). Damit können in (3.1.44) mit (3.1.40) und (3.1.41) alle Terme $\propto \exp[\pm i(k_1 - k'_1)]$ bzw. $\propto \exp[\pm i(k_2 + k'_2)]$ weglassen, weil diese Terme für $a \rightarrow \infty$ im Sinne des schwachen Limes' verschwinden. Für die verbleibenden Terme können wir außer in den Exponentialfunktionen und im Nenner überall $k_1 = k'_1$ annehmen. Damit ergibt sich

$$I_a \underset{a \rightarrow \infty}{\cong} = -\frac{2i}{k_1^2 - k_1'^2} \{k_1 [A_1 \tilde{B}_1 \exp[ia(k_1 - k'_1)] - \tilde{A}_1 B_1 \exp[-ia(k_1 - k'_1)]] + k_2 [\tilde{A}_2 B_2 \exp[ia(k_1 - k'_1)] - A_2 \tilde{B}_2 \exp[-ia(k_2 - k'_2)]]\}. \quad (3.1.47)$$

Entwicklung der Exponentialfunktionen um $\epsilon' = \epsilon$ bzw. $k'_1 = k_1$ ergibt

$$I_a \underset{a \rightarrow \infty}{\cong} = \frac{i}{k_1(k_1 - k'_1)} [k_1 (\tilde{A}_1 B_1 - A_1 \tilde{B}_1) - k_2 (\tilde{A}_2 B_2 - A_2 \tilde{B}_2)] + \mathcal{O}[(k_1 - k'_1)^0] = \mathcal{O}[(k_1 - k'_1)^0]. \quad (3.1.48)$$

Letzteres folgt aus der verallgemeinerten Stromerhaltungsgleichung (3.1.43), d.h. wir können $I_a(k_1, k'_1) \Phi(k'_1)$, mit einer beliebigen Testfunktion $\Phi(k_1)$, über ein sehr kleines Intervall $k'_1 \in (k_1 - \delta, k_1 + \delta)$ integrieren, d.h. das mittlere Integral in (3.1.45) ist wohldefiniert für $\delta \rightarrow 0^+$.

Um den schwachen Limes $a \rightarrow \infty$ zu bilden, schreiben wir die Exponentialfunktionen in (3.1.47) in trigonometrischer Form. Dann erhalten wir

$$I_a \underset{a \rightarrow \infty}{\cong} = \frac{2}{k_1^2 - k_1'^2} \{k_1 (A_1 \tilde{B}_1 + \tilde{A}_1 B_1) \sin[a(k_1 - k'_1)] + k_2 (A_2 \tilde{B}_2 + \tilde{A}_2 B_2) \sin[a(k_2 - k'_2)] - ik_1 (A_1 \tilde{B}_1 - \tilde{A}_1 B_1) \cos[a(k_1 - k'_1)] + i(A_2 \tilde{B}_2 - \tilde{A}_2 B_2) \cos[a(k_2 - k'_2)]\}. \quad (3.1.49)$$

Für die erste Zeile können wir den schwachen Limes (3.1.35) verwenden. Die zweite Zeile ergibt im schwachen Limes 0, wie man wieder durch Entwicklung um $k'_1 = k_1$ erkennt. Aufgrund der Stromerhaltungsgleichung ist dieser Term nämlich von der Ordnung $\mathcal{O}[(k_1 - k'_1)]$.

3. Eindimensionale Probleme

Für (3.1.44) folgt also schließlich

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} dx \psi_E(x) \tilde{\psi}_{E'}(x) &= \text{w-lim}_{a \rightarrow \infty} I_a = \pi(A_1 \tilde{B}_1 + \tilde{A}_1 B_1) \delta(k_1 - k'_1) + \pi(\tilde{A}_2 B_2 + A_2 \tilde{B}_2) \delta(k_2 - k'_2) \\
&= 2\pi k_1 (A_1 \tilde{B}_1 + \tilde{A}_1 B_1) \delta(k_1^2 - k_1'^2) + 2\pi k_2 (\tilde{A}_2 B_2 + A_2 \tilde{B}_2) \delta(k_2^2 - k_2'^2) \\
&= 2\pi k_1 (A_1 \tilde{B}_1 + \tilde{A}_1 B_1) \delta(k_1^2 - k_1'^2) + 2\pi k_2 (\tilde{A}_2 B_2 + A_2 \tilde{B}_2) \delta(k_1^2 - k_1'^2) \\
&\stackrel{(3.1.43)}{=} 4\pi (k_1 A_1 \tilde{B}_1 + k_2 \tilde{A}_2 B_2) \delta(k_1^2 - k_1'^2) \\
&= \frac{2\pi \hbar^2}{m} (k_1 A_1 \tilde{B}_1 + k_2 \tilde{A}_2 B_2) \delta(E - E') \\
&= \frac{2\pi \hbar^2}{m} (k_1 \tilde{A}_1 B_1 + k_2 A_2 \tilde{B}_2) \delta(E - E').
\end{aligned} \tag{3.1.50}$$

Dabei haben wir im letzten Schritt $E = \hbar^2 k_1^2 / (2m)$ verwendet.

Wir betrachten nun die beiden linear unabhängigen Energieeigenfunktionen $\psi_E^{(R)}$ und $\psi_E^{(L)}$ zum Energieeigenwert E , die durch das folgende asymptotische Verhalten definiert sind: Die Lösung mit dem asymptotischen Verhalten

$$\psi_E^{(R)}(x) \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2 \exp(ik_2 x) \end{cases} \tag{3.1.51}$$

beschreibt von links her nach rechts auf das Streupotential zulaufende Teilchen und

$$\psi_E^{(L)}(x) \begin{cases} \cong_{x \rightarrow -\infty} B_1 \exp(-ik_1 x), \\ \cong_{x \rightarrow +\infty} A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x) \end{cases} \tag{3.1.52}$$

von rechts her nach links auf das Streupotential zulaufende Teilchen.

Für das Normierungsintegral $\langle \psi_{E'}^{(R)} | \psi_E^{(R)} \rangle$ ist in (3.1.50) offenbar $\tilde{A}_1 \rightarrow B_1^*$, $\tilde{B}_1 \rightarrow A_1^*$, $\tilde{A}_2 \rightarrow 0$ und $\tilde{B}_2 \rightarrow A_2^*$ und $B_2 = 0$ zu setzen. Das führt zu

$$\langle \psi_{E'}^{(R)} | \psi_E^{(R)} \rangle = \frac{2\pi \hbar^2}{m} |A_1|^2 k_1 \delta(E - E'). \tag{3.1.53}$$

Genauso folgt

$$\langle \psi_{E'}^{(L)} | \psi_E^{(L)} \rangle = \frac{2\pi \hbar^2}{m} |B_2|^2 k_2 \delta(E - E'). \tag{3.1.54}$$

Die Normierung der Wellenfunktionen erfolgt also so, dass für die von links bzw. rechts her einlaufenden Ströme

$$j_{\text{in}}^{(R)} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{1}{2\pi \hbar}, \quad j_{\text{in}}^{(L)} = \frac{\hbar k_2}{m} |B_2|^2 = \frac{1}{2\pi \hbar} \tag{3.1.55}$$

gilt.

Für $\langle \psi_{E'}^{(L)} | \psi_E^{(R)} \rangle$ ist hingegen $\tilde{A}_1 \rightarrow B_1^*$, $\tilde{B}_1 \rightarrow 0$ und $B_2 \rightarrow 0$ zu setzen, woraus mit (3.1.50)

$$\langle \psi_{E'}^{(L)} | \psi_E^{(R)} \rangle = 0 \tag{3.1.56}$$

resultiert, d.h. wir haben mit (3.1.51), (3.1.52) und (3.1.55) zwei orthonormierte Energieeigenfunktionen zum Energieeigenwert $E > V_0$ gefunden.

3.2 Freie Teilchen

Wie wir schon in Abschnitt 1.2 gesehen haben, läßt sich der Fall des freien Teilchens, d.h. $V(x) = 0$, einfacher mit Hilfe von Impulseigenzuständen behandeln. Für unsere Simulationen wollen wir ein Gaußsches Wellenpaket der Art (1.2.11) für $x \ll 0$ als Anfangszustand konstruieren, müssen aber für den Fall mit Potential mit Energieeigenzuständen arbeiten. Wir wollen dabei im Unterraum mit nur nach $x \rightarrow \infty$ hin auslaufenden Wellen operieren. Die entsprechende auf $\delta(E - E')$ „normierte“ Energieeigenfunktion ist nach den obigen allgemeinen Betrachtungen also durch

$$\psi_E(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar k}} \exp(ikx) \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.2.1)$$

gegeben.

Wir verwenden nun folgende Näherung. Im Impulsraum (geschrieben mit Wellenzahlen $k = p/\hbar$) lautet das Anfangswellenpaket, das wir allerdings nicht um $x = 0$ herum plazieren wollen, sondern bei $x_0 \ll 0$ gemäß (1.2.9):

$$\tilde{\psi}_0(k) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{4\alpha} - ikx_0\right]. \quad (3.2.2)$$

Für unsere Rechnungen verwenden wir stattdessen den folgenden Anfangszustand in der Energiedarstellung

$$c_E = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} [\tilde{\psi}_0(k) + \tilde{\psi}_0(-k)] \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (3.2.3)$$

Zur Berechnung der zeitabhängigen Lösung integrieren wir diese Anfangswellenfunktion gemäß (3.1.6). Da hier keine gebundenen Zustände existieren, ist

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dE c_E \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (3.2.4)$$

Dies ist für nicht zu breite Impulsverteilungen (also nicht zu große α) eine sehr guter Näherung für das Gaußsche Wellenpaket, wie das unten gezeigte Movie auch zeigt.

Zur Herstellung der Movies wird dieses Integral mit einer einfachen adaptiven Trapez-Simpson-Quadratur numerisch ausgewertet. Dabei ist es wegen der Singularität des Anfangszustandes (3.2.3) bei $E = 0$ allerdings von Vorteil, nach k zu integrieren. Es ist

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dk \frac{\hbar^2 k}{m} c_E \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.2.5)$$

Link zum Movie

Das Wellenpaket bleibt gemäß (1.2.11) Gauß-förmig verbreitert sich aber gemäß 1.2.24 aufgrund der nichtlinearen Dispersionsrelation $\omega = \hbar k^2/(2m)$ der Schrödingerwellen mit der Zeit, d.h. der Ort eines anfänglich gut lokalisierten Teilchens wird mit der Zeit immer unbestimmter, und zwar desto schneller, je genauer das Teilchen anfangs lokalisiert war, denn desto breiter ist das Anfangswellenpaket im Impulsraum.

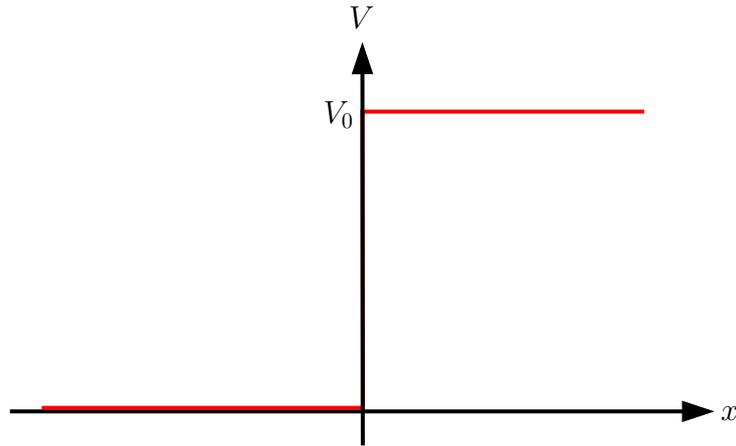


Abbildung 3.2: Die Potentialschwelle.

3.3 Potentialschwelle

Als einfachstes Beispiel betrachten wir nun eine Potentialschwelle der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0, \end{cases} \quad (3.3.1)$$

wobei $V_0 > 0$ ist (s. Abb. 3.2). Dann sind unsere asymptotischen Lösungen für die Bereiche $x < 0$ und $x > 0$ exakt. Da das Potential nirgends negativ wird, gibt es keine gebundenen sondern nur ungebundene Zustände der beiden Typen. Wir haben also als Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit nach rechts laufenden Wellen für $x \rightarrow \infty$ für $E > V_0$:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \theta(-x)[A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)] + \theta(x)A_2 \exp(-\kappa_2 x) & \text{falls } E < V_0 \\ \theta(-x)[A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)] + \theta(x)A_2 \exp(ik_2 x) & \text{falls } E > V_0 \end{cases} \quad (3.3.2)$$

mit $k_1 = \sqrt{\epsilon}$, $\kappa_2 = \sqrt{U_0 - \epsilon}$ und $k_2 = \sqrt{\epsilon - U_0}$, wobei wir wieder zur Abkürzung $\epsilon = 2mE/\hbar^2$ und $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$ geschrieben haben.

Die Konstanten unterliegen nun der Einschränkung, daß die Lösungen zweimal differenzierbar sein müssen. Es müssen daher ψ_E und ψ'_E bei $x = 0$ stetig sein. Zusammen mit der Normierungsvorschrift (3.1.38) ergeben sich aus diesen Stetigkeitsbedingungen die Koeffizienten

$$\begin{aligned} A_1 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1}}, & A_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2} A_1, & B_1 &= \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} A_1 & \text{für } 0 < E < V_0, \\ A_1 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1}}, & A_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1, & B_1 &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 & \text{für } E > V_0. \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

Das Wellenpaket ist dann wieder durch Gl. (3.2.4) gegeben.

Ein erstes physikalisches Verständnis für diese Wellenfunktionen ergibt eine Betrachtung, die analog zur Behandlung der realistischeren Streuprozesse im dreidimensionalen Raum ist. Dabei interessiert man sich nur für das asymptotische Verhalten der Teilchen, d.h. wenn sie sich weit weg von der Schwelle bei $x = 0$ aufhalten.

3.3. Potentialschwelle

Dabei müssen wir bedenken, daß die Wellenfunktionen ψ_E keine „echten“ Zustände repräsentieren, da sie nicht quadratintegrierbar und somit nicht normierbar sind. Sie können aber als Grenzfall von echten Zuständen gedeutet werden, nämlich gerade solche, für die

$$c_E = \delta(E - E_0) \quad (3.3.4)$$

ist. Wir können uns also z.B. sehr schmale um E_0 konzentrierte Gauß-Funktionen vorstellen, wobei wir den Grenzfall verschwindender Breite betrachten. Physikalisch können wir deren Bedeutung nur verstehen, wenn wir bedenken, daß es sich um Wahrscheinlichkeitsamplituden handelt. Demnach repräsentieren die ebenen Wellen, aus denen sich unsere Energieeigenlösungen zusammensetzen, einen sehr lange in der Vergangenheit eingeschalteten Strom von links her auf die Schwelle zulaufenden (statistisch unkorrelierten) Teilchen mit sehr genau festgelegter Energie. Die Betragsquadrate der Energieeigenfunktionen geben dann relative Häufigkeiten an, die mit einem Detektor, der sehr lange die Teilchen an einem bestimmten Ort x zählt, gemessen werden können.

Stellen wir den Detektor irgendwo links weit weg von der Schwelle auf, wird er sowohl die einlaufenden als auch die an der Schwelle reflektierten Teilchen messen. Ein sehr weit rechts positionierter Detektor wird die Teilchen erfassen, die die Schwelle überwinden. Wir können also im Prinzip die auf den Strom der einlaufenden Teilchen normierten Wahrscheinlichkeiten messen, daß ein Teilchen, das mit einer wohldefinierten Energie E sehr weit links von der Schwelle losläuft, irgendwann reflektiert wird bzw. die Schwelle überwindet und sehr weit weg nach rechts läuft. Diese relativen Ströme bezeichnen wir als **Reflexions-** bzw. **Transmissionskoeffizienten**¹. Gemäß (3.1.24) sind für unsere Schwelle die Koeffizienten durch

$$R = \frac{j_{-\infty}^L}{j_{-\infty}^R} = \begin{cases} 1 & \text{für } 0 < E < V_0 \\ \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} & \text{für } E > V_0, \end{cases} \quad (3.3.5)$$

$$T = \frac{j_{\infty}^R}{j_{-\infty}^R} = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < E < V_0, \\ \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_2 k_1}{(k_1 + k_2)^2} & \text{für } E > V_0 \end{cases}$$

gegeben. Wegen der Stromerhaltung gilt

$$R + T = 1, \quad (3.3.6)$$

wie es aufgrund der Interpretation von R und T als Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten eines Teilchens auch sein muß.

Für unsere Movies wollen wir die Wahrscheinlichkeitsdichten für ein anfangs bei $x_0 \ll 0$ konzentriertes nach rechts auf die Potentialschwelle zulaufendes Wellenpaket als Funktion der Zeit simulieren. Dies erreichen wir, indem wir C_E gemäß (3.2.3) wählen.

Dies entspricht physikalisch der Situation, daß wir einen Strom von jeweils einem einzelnen recht gut lokalisierten Teilchen beobachten und an jedem Ort x einen Detektor aufstellen, der jedesmal die Zeit erfaßt, die nach dem Losschicken des Teilchens vergangen ist, wann er das Teilchen registriert. Dann kann man wieder die relativen Häufigkeiten als Funktion der Zeit erfassen, und man erhält dann genau die Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die wir im folgenden in den Movies zeigen wollen.

Dabei ist es wichtig zu bemerken, daß aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation für Ort und Impuls

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.3.7)$$

¹Diese Koeffizienten sind als Analoga zum Streuquerschnitt in der Streutheorie zu verstehen, wobei freilich der Streuquerschnitt eine Funktion des Raumwinkels bezogen auf die Richtung der auf ein ruhendes Target zulaufenden Teilchen ist.

3. Eindimensionale Probleme

der Anfangsimpuls p_0 relativ unbestimmt sein muß, wenn man ein auf einen relativ engen Ortsbereich um x_0 fixiertes Teilchen präparieren möchte. Da das Teilchen für $x_0 \ll 0$ als frei betrachtet werden kann, besitzt es eine entsprechende Energieunschärfe

$$\Delta E \simeq \frac{p_0}{m} \Delta p. \quad (3.3.8)$$

Selbst wenn wir also ein Wellenpaket mit $0 < E_0 = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} < V_0$ in Gl. (3.2.3) konstruieren, wird dieses immer auch eine (wenngleich kleine) Beimischung von Wellen $E > V_0$ beinhalten, was erklärt, daß in der Tat mit einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit, Teilchen jenseits der Schwelle detektiert werden können, **ohne daß dies dem Energieerhaltungssatz widerspricht**. Dies löst das scheinbare Paradoxon zwischen quantenmechanischem Tunneleffekt und Energieerhaltungssatz für realistische Wellenpakete, die einer quasi-klassischen Situation entsprechen, auf. Genau diese Situation betrachten wir nun in dem folgenden Movie:

3.3.1 Totalreflexion ($E_0 = 0.3 V_0$)

[Link zum Movie](#)

Hier wurde $E_0 = 0.3 V_0$ gewählt. Die Energieunschärfe betrug $\Delta E \simeq 0.16 V_0$. Wie wir sehen, bewegt sich das Wellenpaket anfangs wie ein freies Teilchen auf die Potentialschwelle zu, wobei es sich freilich verbreitert, wie im vorigen Abschnitt erläutert. Sobald die Wellenfront auf die Schwelle trifft, dringt in der Tat ein (vornehmlich stark gedämpfter) Anteil der Welle in den Bereich $x > 0$ jenseits der Schwelle ein, während links eine stark oszillierende Wahrscheinlichkeitsverteilung auftritt, die sich aus der Interferenz zwischen der einlaufenden und der reflektierten Welle ergibt. Diese Interferenzeffekte sind charakteristisch für das quantenmechanische Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung. Sie würden nicht auftreten, wenn wir einen Strom klassischer Teilchen mit entsprechend der Anfangsenergieunschärfe verteilten Energien auf eine Schwelle schießen würden. Eine eher dem klassischen Verhalten entsprechende Situation entsteht erst wieder, wenn nach einer Weile nur noch das reflektierte Wellenpaket zurückläuft. Es ist allerdings gegenüber der Anfangsverteilung wesentlich verbreitert.

Eine weitere interessante Eigenschaft ergibt sich noch aus dem Vergleich des Wellenpakets zum Verhalten eines klassischen Teilchens, das mit der mittleren Energie E_0 auf die Schwelle zuläuft. In der klassischen Mechanik wird das Teilchen in der hier simulierten Situation einfach instantan reflektiert. Die Position dieses klassischen Teilchens wird im Movie durch die vertikal eingezeichnete grüne Linie dargestellt. Wir sehen, daß sich zu Zeiten nicht zu lange, nachdem die ersten Teile der Wellenfront auf die Schwelle getroffen sind, der Schwerpunkt des reflektierten Anteils des Wellenpaketes gegenüber dem reflektierten klassischen Teilchen verzögert bewegt. Auch dies ist ein spezifisch quantenmechanischer Effekt, der durch die Phasenverschiebung der Teilwellen bei der Reflexion entsteht. Diese Phasenverschiebung läßt sich übrigens analysieren, indem man die Koeffizienten der Energieeigenmoden (3.3.2) analysiert.

3.3.2 Kleiner durchlaufender Anteil ($E_0 = 0.5 V_0$)

Im nächsten Movie erhöhen wir die mittlere Energie auf $E_0 = 0.5 V_0$ und behalten α bei, so daß nun die Energieunschärfe etwa $\Delta E = 0.2 V_0$ beträgt.

[Link zum Movie](#)

Hier sehen wir, daß gegenüber dem vorigen Fall ein kleiner Anteil des Wellenpaketes auch nach $x > 0$ propagiert. Dieser Anteil rührt von den im Anfangszustand enthaltenen Moden mit $E > V_0$ her. Es ent-

3.3. Potentialschwelle

stehen vor dem Überschreiten des Hauptpeaks des durchlaufenden Anteils charakteristische kleinere Vorläufer.

Die Position des entsprechenden klassischen Teilchens mit der Energie E_0 ist wieder durch die vertikale grüne Linie dargestellt.

3.3.3 Mittlere Energie: $E_0 = 1.2V_0$ ($\Delta E = 0.3V_0$)

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie $E_0 = 1.2V_0$ gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei $x = 0$. Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei $x > 0$ mit um V_0 verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Im Vergleich dazu wird in der quantenmechanischen Rechnung ein Teil der Welle reflektiert, d.h. mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit wird das Teilchen auch bei $E > V_0$ an der Potentialschwelle reflektiert, und der durchlaufende Anteil bewegt sich mit gegenüber dem klassischen Teilchen größeren Geschwindigkeit.

3.3.4 Mittlere Energie: $E_0 = 1.5V_0$ ($\Delta E = 0.35V_0$)

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie $E_0 = 1.5V_0$ gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei $x = 0$. Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei $x > 0$ mit um V_0 verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Im Vergleich dazu wird in der quantenmechanischen Rechnung ein Teil der Welle reflektiert, d.h. mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit wird das Teilchen auch bei $E > V_0$ an der Potentialschwelle reflektiert, und der durchlaufende Anteil bewegt sich mit gegenüber dem klassischen Teilchen größeren Geschwindigkeit.

3.3.5 Mittlere Energie: $E_0 = 6.0V_0$ ($\Delta E = 0.69V_0$)

[Link zum Movie](#)

Hier haben wir die mittlere Energie $E_0 = 6V_0$ gesetzt, also etwas größer als den Potentialsprung bei $x = 0$. Das klassische Teilchen, dessen Position wieder durch die grüne Linie gekennzeichnet ist, würde hier in jedem Fall über die Stufe hinweglaufen, allerdings bei $x > 0$ mit um V_0 verringerter Energie (und entsprechend kleinerer Geschwindigkeit).

Erst bei diesen gegenüber dem Potentialsprung erheblich höheren mittleren Teilchenenergien bewegt sich das Wellenpaket wieder annähernd wie das klassische Teilchen, allerdings wie bei allen (quasi-)freien Bewegungen unter erheblicher Verbreiterung.

3.3.6 Streuzustände

In der Streutheorie betrachtet man i.a. die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in eine gegebene Richtung gestreut wird. Diese Information wird im sog. **Streuquerschnitt** angegeben.

In unserem eindimensionalen Fall entsprechen diesen Wahrscheinlichkeiten die Transmissions- und Emissionskoeffizienten, die das Verhältnis der Größe des reflektierten bzw. durch die Schwelle hindurchgehenden Stromes von Teilchen angeben. Die Zustände, die wir dabei betrachtet haben, sind die

3. Eindimensionale Probleme

stationären Energieeigenzustände. Praktisch meßbar ist so ein Strom, indem man sehr viele voneinander unabhängige Experimente mit jeweils einem Teilchen durchführt und dann die Wahrscheinlichkeitsströme als relative Häufigkeiten mißt. Dabei schickt man ein Teilchen mit recht genau bestimmter Energie, weit weg von der Potentialschwelle los und zählt nach sehr langer Zeit, wieviele Teilchen weit weg von der Schwelle reflektiert bzw. wieviele durch die Schwelle hindurchgelangt sind.

Wellenmechanisch wird diese Situation durch einen halbseitig unendlichen Wellenzug bestimmter Frequenz beschrieben, dessen Kopf sich zur Zeit $t = 0$ weit weg von der Potentialschwelle befindet und auf die Schwelle zuläuft. Dies bezeichnet man in der Streutheorie als einen **asymptotisch freien einlaufenden Zustand** bzw. kurz als „in-Zustand“. Danach betrachtet man die Situation wieder sehr lange nachdem der Wellenkopf auf die Potentialschwelle getroffen ist. Für asymptotisch große Zeiten hat man dann den stationären Endzustand (**out-Zustand**) erreicht.

Auch diese Situation läßt sich numerisch simulieren. Wir müssen uns nur den passenden in-Zustand (d.h. die Wellenfunktion zur Zeit $t = 0$) verschaffen. Im Impulsraum ist dieser Zustand durch

$$\phi_0(k) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-ikx_0)}{k - k_0 + i0^+} \quad (3.3.9)$$

gegeben. In der Ortsdarstellung erhalten wir

$$\phi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \phi_0(k) \exp(ikx). \quad (3.3.10)$$

Setzen wir für $\phi_0(k)$ (3.3.9) ein, sehen wir, daß wir das Integral über den Residuensatz berechnen können, indem wir den Integrationsweg in der oberen bzw. unteren Halbebene durch einen beliebig großen Halbkreis schließen. Damit dieser Halbkreis keinen divergenten Beitrag zum Integral liefert, müssen wir wegen der Exponentialfunktion für $x > x_0$ den oberen und für $x < x_0$ den unteren Halbkreis wählen. Da nur in der unteren Halbebene bei $k = k_0 - i0^+$ ein Pol liegt, haben wir nach dem Residuensatz

$$\phi_0(x) = \frac{\Theta(x_0 - x)}{\sqrt{2\pi}} \exp[ik_0(x - x_0)]. \quad (3.3.11)$$

Diese Wellenfunktion besitzt für $x_0 \rightarrow \infty$ die korrekte Normierung einer ebenen Welle auf die δ -Funktion bzgl. k . Es handelt sich jedenfalls um einen Wellenzug, der für $x < x_0$ einer ebenen Welle für ein nach rechts laufendes Teilchen mit Impuls k_0 .

Die Wellenfunktion für beliebige Zeiten erhalten wir wieder, indem wir wie oben erläutert, mittels Energieeigenfunktionen die Zeitentwicklung berechnen. Die numerische Auswertung wird in den folgenden beiden Movies gezeigt.

Im ersten Movie ist $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / (2m) = 0.6 V_0$ gesetzt. In diesem Fall haben wir Totalreflexion, und die Welle dringt nur mit einem exponentiell fallenden Anteil in den Bereich $x > 0$ vor. Für $x \rightarrow \infty$ ist also der nach rechts gerichtete Strom 0, wie aufgrund des Transmissionskoeffizienten in (3.3.5) zu erwarten. Für große Zeiten wird der Wellenzug (in grün eingezeichnet) in dem gezeigten x -Ausschnitt stationär und identisch mit der rot eingezeichneten Energieeigenfunktion zu der gegebenen Energie E_0 :

[Link zum Movie](#)

Im zweiten Beispiel ist $E = 1.2 V_0$ gesetzt, d.h. wir haben gemäß (3.3.5) sowohl einen reflektierten als auch einen durchlaufenden Anteil. Für große Zeiten nähert sich der als asymptotisch freier Anfangszustand gestartete Wellenzug (grün) wieder der stationären Lösung (rot) beliebig genau an:

[Link zum Movie](#)

3.4. Potentialtopf

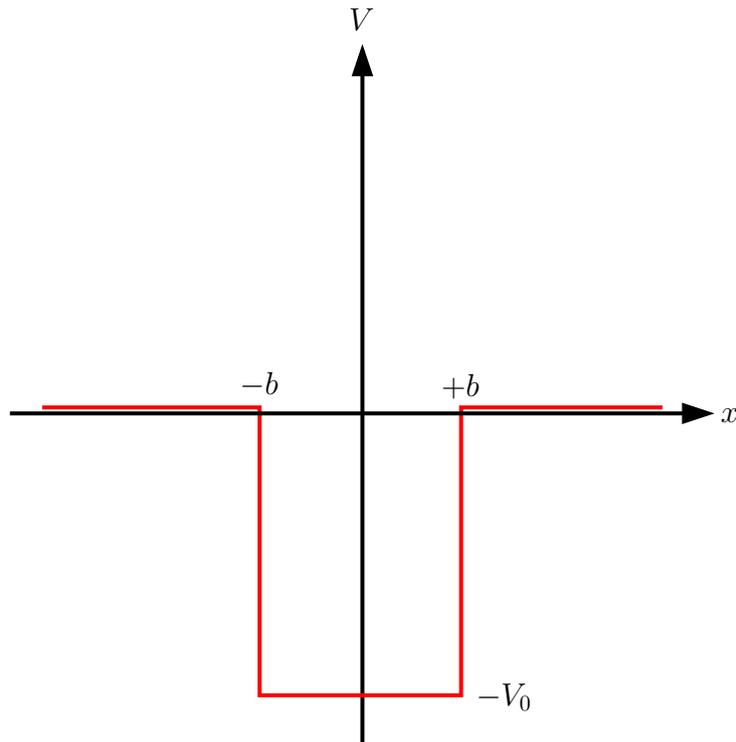


Abbildung 3.3: Der Potentialtopf.

3.4 Potentialtopf

Wir betrachten nun den endlich tiefen Potentialtopf, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < b, \\ 0 & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (3.4.1)$$

mit $V_0 > 0$ (vgl. Abb. 3.3).

Dies ist insofern ein interessantes Problem als wir erwarten dürfen, daß es neben den Streuzuständen mit Energieeigenwerten $E > 0$ auch gebundene Zustände mit $E < 0$ gibt.

Das Problem, die Energieeigenzustände und dazugehörigen Energieeigenwerte zu finden, erleichtert sich erheblich durch die Symmetrie des Problems unter Raumspiegelungen. Der Raumspiegelungs- oder Paritätsoperator wirkt auf Wellenfunktionen vermöge

$$\mathbf{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (3.4.2)$$

Da offenbar $\mathbf{P}^2 = \mathbb{1}$ gilt, sind mögliche Eigenwerte von $\mathbf{P} = \pm 1$. Da sich weiter der Hamiltonoperator unter Raumspiegelungen offenbar nicht ändert, also $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{P} = \mathbf{H}$ gilt, können wir \mathbf{P} simultan zu \mathbf{H} diagonalisieren. Wir können also die gesuchten Eigenzustände von \mathbf{H} gleich als gerade bzw. ungerade Funktionen ansetzen: $\psi_E^{(\pm)}(-x) = \pm\psi_E^{(\pm)}(x)$.

Der Vorteil bei der Lösung des vorliegenden Problems besteht darin, daß wir uns nur um die Stetigkeitsbedingungen an der Stelle $x = b$ zu kümmern brauchen. Wegen der Spiegelungssymmetrie erfüllen dann die Wellenfunktionen automatisch auch die Stetigkeitsbedingungen bei $x = -b$.

3.4.1 Bindungszustände mit gerader Parität

Wir beginnen mit der Suche nach Energieeigenwerten mit geraden Energieeigenfunktionen und betrachten zunächst die Möglichkeit, daß gebundene Zustände auftreten, also Energieeigenwerte $E < 0$ existieren. Setzen wir wieder $\epsilon = 2mE/\hbar^2$ und $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$, haben wir

$$\psi''(x) = \begin{cases} -(U_0 + \epsilon)\psi(x) & \text{für } |x| < b, \\ -\epsilon\psi(x) & \text{für } |x| \geq b. \end{cases} \quad (3.4.3)$$

Es ist weiter von vornherein klar, daß $\epsilon \geq -U_0$ sein muß. Da die Wellenfunktion gerade sein soll und im Unendlichen nicht exponentiell wachsen darf, ist die Lösung eindeutig durch

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} A_2 \cos(k_2 x) & \text{für } |x| \leq b \\ A_1 \exp(-x_1 |x|) & \text{für } |x| > b, \end{cases} \quad (3.4.4)$$

mit $x_1 = \sqrt{-\epsilon}$ und $k_2 = \sqrt{\epsilon + U_0}$ gegeben. Die Wellenfunktion muß bei $x = b$ mitsamt ihrer ersten Ableitung stetig sein. Das ergibt das homogene lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_1 \exp(-x_1 b) - A_2 \cos(k_2 b) &= 0, \\ -A_1 x_1 \exp(-x_1 b) + A_2 k_2 \sin(k_2 b) &= 0 \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

als Bedingung für die Konstanten A_1 und A_2 . Damit dieses Gleichungssystem von der trivialen Lösung $A_1 = A_2 = 0$ verschiedene Lösungen haben kann, muß die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwinden, und das führt nach ein paar einfachen Umformungen auf die Bedingung

$$\tan(k_2 b) = \frac{x_1}{k_2}, \text{ d.h. } \tan(b \sqrt{U_0 + \epsilon}) = \sqrt{\frac{-\epsilon}{U_0 + \epsilon}}. \quad (3.4.6)$$

Die letzte Form der Gleichung zeigt, daß es sich um eine Bedingung an die Energieeigenwerte $E = \hbar^2 \epsilon / (2m)$ handelt.

Diese Gleichung läßt sich nicht geschlossen lösen, aber wir können sie leicht graphisch analysieren. Dazu führen wir die neue Variable $y = b k_2 = b \sqrt{U_0 + \epsilon}$ ein. Dann schreibt sich die Gleichung

$$\tan y = \sqrt{\frac{U_0 b^2 - y^2}{y^2}}. \quad (3.4.7)$$

Offenbar muß also $0 < y < \sqrt{U_0 b^2}$ sein, und wir müssen untersuchen, wo Schnittpunkte zwischen den Graphen der Funktionen auf der linken und rechten Seite existieren. Deren y -Werte sind dann offenbar die gesuchten Lösungen. Betrachten wir dazu den linken Plot in Abb. 3.4.

Hier haben wir U_0 und b gerade so gewählt, daß $\sqrt{U_0 b^2} = 20$. Wir werden diese Wahl für alle unten gezeigten Simulationen von Wellenpaketen beibehalten. In schwarz sind die positiven Zweige des Tangens aufgetragen in rot der Graph der Funktion auf der rechten Seite von Gl. (3.4.7). Da diese Funktion monoton fällt und für $y \rightarrow 0$ divergiert, gibt es für jeden Wert von $\sqrt{U_0 b^2}$ wenigstens einen Schnittpunkt (und also einen Energieeigenwert) mit dem Zweig des Tangens im Bereich $y \in [0, \pi/2)$. Weitere Eigenwerte sind möglich, wenn $\sqrt{U_0 b^2}$ größer ist, und zwar gibt es genau einen Schnittpunkt mit jedem Zweig des Tangens, der im Definitionsbereich $0 < y \leq \sqrt{U_0 b^2}$ liegt. Wie aus der allgemeinen Diskussion zu erwarten, sind also die Energieeigenwerte zu gebundenen Zuständen diskret.

3.4. Potentialtopf

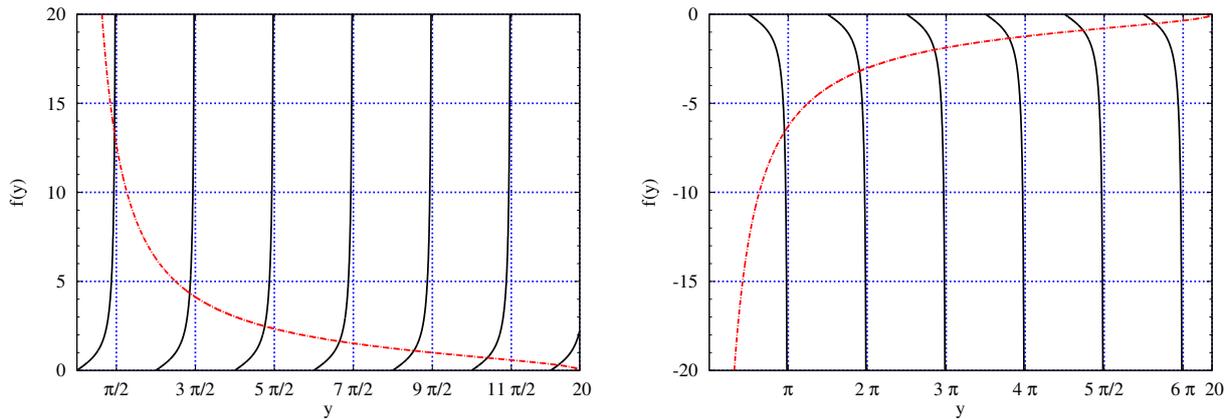


Abbildung 3.4: Zur graphischen Lösung der Eigenwertbestimmungsgleichungen für gerade (links) und ungerade Eigenfunktionen rechts, cf. Gln. (3.4.6) und (3.4.14).

Man überlegt sich leicht, daß die Anzahl der Energieeigenwerte mit geraden Eigenfunktionen

$$n_+ = \left[\frac{\sqrt{U_0 b^2}}{\pi} \right] + 1 \quad (3.4.8)$$

ist, wobei $[x]$ für die größte natürliche Zahl, die $\leq x$ ist, steht. Dabei fällt die n -te Lösung ins Intervall

$$y_n \in [(n-1)\pi, (n-1/2)\pi), \quad n \in \{1, 2, \dots, n_+\}. \quad (3.4.9)$$

Damit lassen sich sämtliche Lösungen der Gleichung (3.4.6) numerisch mittels des Bisektionsverfahrens zuverlässig berechnen. Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind dann durch Lösung einer der beiden Gleichungen von (3.4.5) als die Funktion (3.4.4) gegeben:

$$A_1 = \exp(x_1 b) \cos(k_2 b) A_2. \quad (3.4.10)$$

Da die Determinante für jeden Eigenwert verschwindet, ist dann die andere Gleichung von (3.4.5) automatisch ebenfalls erfüllt. Die Konstante A_2 ist schließlich durch die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n^{(+)}(x)|^2 = 1 \quad (3.4.11)$$

bestimmt. Das Integral existiert mit Sicherheit, da die Wellenfunktionen im Unendlichen exponentiell abfallen. Nach Auswertung desselben gelangt man schließlich auf

$$A_2 = \left[b + \frac{\cos^2(k_2 b)}{x_1} + \frac{\sin(2k_2 b)}{2k_2} \right]^{-1/2}. \quad (3.4.12)$$

3.4.2 Bindungszustände mit ungerader Parität

Die Bindungszustände mit ungerader Wellenfunktion finden sich in ganz analoger Weise wie eben für die geraden Wellenfunktionen besprochen. Es gilt

$$\psi_n^{(-)}(x) = \begin{cases} B_2 \sin(k_2 x) & \text{für } |x| < b, \\ B_1 \operatorname{sign} x \exp(-x_1 |x|) & \text{für } |x| \geq b. \end{cases} \quad (3.4.13)$$

3. Eindimensionale Probleme

Die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung bei $x = b$ führt wieder auf ein homogenes lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten B_1 und B_2 . Damit nichttriviale Lösungen existieren, müssen wir wieder das Verschwinden der Koeffizientenmatrix verlangen. Dies führt nach Einführung der obigen Variablen y schließlich auf die Bestimmungsgleichung

$$\cot y = -\sqrt{\frac{U_0 b^2 - y^2}{y^2}}. \quad (3.4.14)$$

Analog zur Diskussion für die geraden Wellenfunktionen führt die Betrachtung des rechten Plots in Abb. 3.4 auf die Anzahl der Energieeigenwerte mit ungerader Energieeigenfunktion, nämlich

$$n_u = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sqrt{U_0 b^2} < \pi/2, \\ \left[\frac{\sqrt{U_0 b^2}}{\pi} - \frac{1}{2} \right] + 1 & \text{falls } \sqrt{U_0 b^2} \geq \pi/2. \end{cases} \quad (3.4.15)$$

Falls $n_u \geq 1$ liegen die Lösungen für y stets in den Intervallen

$$y_n \in \left[\frac{2n-1}{2} \pi, n\pi \right] \quad \text{für } 1 \leq n \leq n_u. \quad (3.4.16)$$

Auch hier ist wieder das numerische Auffinden aller Lösungen mit Hilfe der Bisektionsmethode problemlos möglich.

Für den y_n entsprechenden Energieeigenwert ergibt sich dann aus der Stetigkeits- und Normierungsbedingung für die Koeffizienten

$$\begin{aligned} B_1 &= \exp(x_1 b) \sin(k_2 b) B_2, \\ B_2 &= \left[b + \frac{\sin^2(k_2 b)}{x_1} - \frac{\sin(2k_2 b)}{2k_2} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (3.4.17)$$

3.4.3 Ungebundene Energieeigenzustände

Wir betrachten nun Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zu positiven Energieeigenwerten. Auch hier empfiehlt es sich, zur einfacheren Erfüllung der Stetigkeitsbedingungen, zunächst gerade und ungerade Lösungen aufzusuchen. Wie wir sehen werden, existieren jeweils beide Lösungen für alle Energieeigenwerte $E > 0$, was aufgrund unserer Diskussion des allgemeinen Falles zu erwarten war: Die Energieeigenwerte $E > 0$ bilden das kontinuierliche Spektrum des Hamiltonoperators, und diese Eigenwerte sind zweifach entartet. Nur halbseitig ins Unendliche laufende Wellen gibt es im gegebenen Falle nicht, da die asymptotischen Werte des Potentials gleich sind.

Zugleich haben wir mit den beiden Lösungen zu gerader und ungerader Parität auch das vollständige (verallgemeinerte) Orthonormalsystem gefunden, wenn wir gemäß den oben entwickelten Vorschriften für die Normierung der ungebundenen Energieeigenzustände vorgehen. Es ist nämlich klar, daß Wellenfunktionen unterschiedlicher Parität stets orthogonal zueinander sind. Wir werden allerdings wie schon bei der Potentialstufe für unsere Simulationen lediglich die nach rechts laufenden Lösungen benötigen, die wir für jedes $E > 0$ durch Linearkombination aus den Eigenzuständen mit definierter Parität erhalten werden.

Für **gerade Parität** besitzen die Lösungen offenbar die Form

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} A_2 \cos(k_2 x) & \text{für } |x| < b \\ A_1 \exp(ik_1 |x|) + B_1 \exp(-ik_1 |x|) & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (3.4.18)$$

3.4. Potentialtopf

mit $k_1 = \sqrt{\epsilon}$, $k_2 = \sqrt{U_0 + \epsilon}$. Die Forderung, daß die Wellenfunktion und ihre Ableitung bei $x = b$ stetig zu sein haben, ergibt für die Koeffizienten

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \exp(\mp ik_1 b) \frac{k_1 \cos(k_2 b) \pm ik_2 \sin(k_2 b)}{2k_1} A_2. \quad (3.4.19)$$

Für **ungerade Parität** haben wir

$$\psi_E^{(-)}(x) = \begin{cases} A_2' \sin(k_2 x) & \text{für } |x| < b \\ \text{sign } x [A_1' \exp(ik_1 |x|) + B_1' \exp(-ik_1 |x|)] & \text{für } |x| \geq b \end{cases} \quad (3.4.20)$$

mit

$$\begin{pmatrix} A_1' \\ B_1' \end{pmatrix} = \exp(\mp ik_1 b) \frac{k_1 \sin(k_2 b) \mp ik_2 \cos(k_2 b)}{2k_1} A_2'. \quad (3.4.21)$$

Die Lösung, die nach rechts laufenden Wellen entspricht, d.h. diejenigen Eigenfunktionen, die $\propto \exp(+ik_1 x)$ für $x > b$ sind, ergibt sich daraus sofort durch die Linearkombination

$$\psi^{(R)}(x) = \left[\frac{1}{B_1} \psi_E^{(+)}(x) - \frac{1}{B_1} \psi_E^{(-)}(x) \right] A_R. \quad (3.4.22)$$

Setzen wir die Lösungen gemäß Gln. (3.4.18-3.4.21) ein, ergibt sich aus der Normierungsvorschrift (3.1.38) für den im Bereich $x < -b$ nach rechts laufenden Anteil der Welle:

$$A_R = \sqrt{\frac{m}{8\pi k_1 \hbar^2}}. \quad (3.4.23)$$

Betrachten wir zunächst das asymptotische Verhalten der ungebundenen Lösungen, indem wir die wie bei der Schwelle definierten Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bestimmen. Dazu müssen wir nur die Koeffizienten für die entsprechenden Wellenanteile aus den eben hergeleiteten Gleichungen einsetzen. Nach ein wenig Algebra findet man

$$R = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(2bk_2)}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(2bk_2) + (k_1^2 + k_2^2) \sin^2(2bk_2)}, \quad (3.4.24)$$

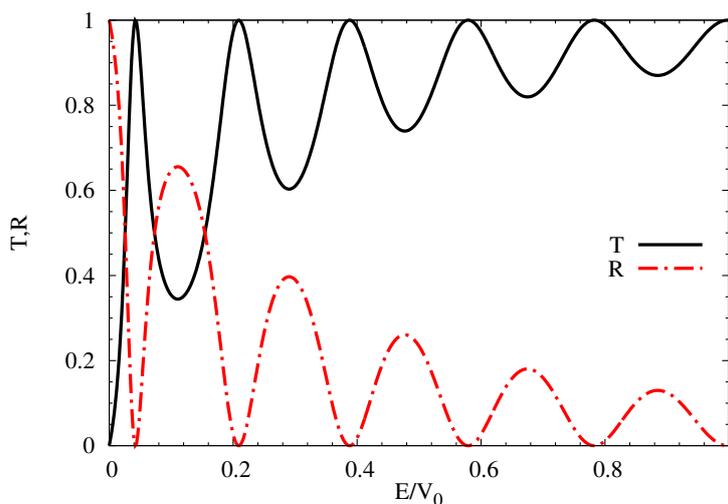
$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(2bk_2) + (k_1^2 + k_2^2) \sin^2(2bk_2)}.$$

Es gilt natürlich wieder $T + R = 1$, wie es sein muß.

Hier tritt ein gegenüber der Schwelle neues interessantes Phänomen auf: Der Reflexionskoeffizient verschwindet offenbar für diejenigen Energieeigenwerte, für die $2bk_2 = n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$ ist. Entsprechend gilt für diese Energieeigenwerte $T = 1$, d.h. die Welle für diese speziellen Energieeigenwerte wird vollständig transmittiert. Dies ist ein typisches **Resonanzphänomen** (vgl. Abb. 3.5).

3.4.4 Demonstration des Resonanzphänomens

Wir demonstrieren dies mit der Simulation eines Wellenpakets, das sich aus Wellen in einem recht engen Energiebereich um eine solche Resonanzschwelle herum zusammensetzt. Entsprechend ist dieses Wellenpaket im Ortsraum zwar relativ breit, aber man erkennt deutlich, daß für Zeiten relativ lang

Abbildung 3.5: *Transmissions- und Reflexionskoeffizienten beim Potentialtopf.*

nach dem ersten Inkontakttreten des Wellenkopfes mit dem linken Rand des Potentialtopfes, fast die gesamte Intensität der Welle nach rechts läuft und kaum Anteile reflektiert werden, d.h. schickt man ein Teilchen mit einer Energie, die sehr genau auf eine „Resonanzenergie“ eingestellt ist, auf den Potentialtopf zu wird es mit einer Wahrscheinlichkeit sehr nahe von 1 durch den Topf hindurchlaufen und so gut wie nie reflektiert werden.

[Link zum Movie](#)

3.4.5 Mittlere Energie: $E_0 = 0.24V_0$

Das typische Verhalten des Wellenpakets für eine mittlere Energie, die nicht in der Nähe einer Resonanz liegt, demonstrieren wir im folgenden Movie. Das von links einlaufende freie Gaußwellenpaket trifft auf den linken Rand des Potentialtopfes und wird dort teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Der transmittierte Anteil trifft auf den rechten Rand des Potentialtopfes und wird dort wieder teilweise reflektiert und teilweise transmittiert usw. Dadurch entstehen Minima und Maxima sowohl für den nach $x < -b$ reflektierten und den nach $x > b$ transmittierten Anteil des Wellenpakets.

[Link zum Movie](#)

3.4.6 Überlagerung gebundener Zustände

Um eine Vorstellung über die Natur von Wellenpaketen zu erhalten, die sich aus der Überlagerung gebundener Zustände ergeben, simulieren wir schließlich noch einen anfang (ebenfalls näherungsweise Gaußförmig gewähltes) auf das Innere des Topfes konzentriertes Wellenpaket, das sich ausschließlich aus den gebundenen Zuständen zusammensetzt. Wie man aus Abb. 3.4 sieht, gibt es im gegebenen Falle $n_g = 7$ gebundene Zustände mit positiver und $n_u = 6$ mit negativer Parität. Das Wellenpaket besitzt also die folgende Gestalt

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{n_g} c_n^{(+)} \psi_n^{(+)}(x) \exp\left(-\frac{iE_n^{(+)} t}{\hbar}\right) + \sum_{n=1}^{n_u} c_n^{(-)} \psi_n^{(-)}(x) \exp\left(-\frac{iE_n^{(-)} t}{\hbar}\right). \quad (3.4.25)$$

3.5. Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Die Koeffizienten c_n^\pm wurden als die entsprechenden „verallgemeinerten Fourierkoeffizienten“ eines Gaußschen Wellenpakets $\psi_0(x)$ bestimmt:

$$c_n^\pm = \int_{-\infty}^{\infty} dx [\psi_n^\pm(x)]^* \psi_0(x). \quad (3.4.26)$$

Freilich ist dann (3.4.25) für $t = 0$ nicht genau das Gaußpaket ψ_0 , da zu dessen exakter Entwicklung nach Energieeigenzuständen auch die ungebundenen Zustände beitragen würden. Wir wollen hier aber gerade den Fall eines ausschließlich aus gebundenen Zuständen zusammengesetzten Wellenpaketes studieren. Freilich haben wir das Wellenpaket (3.4.25) wieder auf 1 normiert.

[Link zum Movie](#)

Wie wir sehen, verhält sich ein solches Wellenpaket wie eine stehende Welle, die auch im Bereich $|x| > b$ nicht strikt verschwindet, wohin ein klassisches Teilchen mit einer Energie $E < 0$ aufgrund des Energieerhaltungssatzes nicht gelangen könnte. Dies ist wieder der bereits oben bei der Diskussion der Potentialstufe erwähnte quantenmechanische Tunneleffekt.

3.5 Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Als vermeintlich einfachen Modellgrenzfall untersucht man oft den „Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden“, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a, \\ \infty & \text{für } x < 0 \text{ oder } x > a. \end{cases} \quad (3.5.1)$$

Betrachtet man dies als Grenzfall eines endlich hohen Potentialtopfes ist klar, dass man eigentlich das Problem eines freien Teilchens in dem endlichen Intervall $[0, a]$ betrachtet, wobei die Wellenfunktionen die Randbedingungen

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (3.5.2)$$

erfüllen müssen, d.h. der Hilbert-Raum ist $L_0^2([0, a])$, also der Raum der auf dem Intervall $[0, a]$ quadratintegrablen Funktionen mit den Randbedingungen (3.5.2). Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x). \quad (3.5.3)$$

Das Energieeigenwertproblem ist leicht zu lösen. Offenbar ist notwendig $E \geq 0$, und die Energieeigenfunktion muß

$$u_E''(x) = -k^2 u_E(x) \quad \text{mit } k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \quad (3.5.4)$$

erfüllen. Die Allgemeine Lösung ist

$$u_E(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx). \quad (3.5.5)$$

Wegen der Randbedingung $u_E(0) = 0$ ist $C_2 = 0$, und wegen $u_E(a) = C_1 \sin(ka) = 0$ folgen die Eigenwerte

$$k_n = n\pi/a, \quad n \in \mathbb{N} = \{1, 2, \dots\} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2 n^2}. \quad (3.5.6)$$

Die dazugehörigen Eigenfunktionen liegen auch alle im Definitionsbereich von \hat{H} als selbstadjungierter Operator. Da diese Eigenfunktionen vollständig sind, ist also \hat{H} auf $L_0^2([0, a])$ dicht definiert. Die

3. Eindimensionale Probleme

Normierungsintegrale sind

$$\begin{aligned}\langle u_{n_1} | u_{n_2} \rangle &= \int_0^a dx C_{n_1}^* C_{n_2} \sin(k_{n_1} x) \sin(k_{n_2} x) \\ &= C_{n_1}^* C_{n_2} \int_0^a dx \frac{1}{2} \{ \cos[(k_{n_1} - k_{n_2})x] - \cos[(k_{n_1} + k_{n_2})x] \} \\ &= \frac{a}{2} |C_{n_1}|^2 \delta_{n_1 n_2},\end{aligned}\quad (3.5.7)$$

d.h. das VONS von Eigenfunktionen ist

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x). \quad (3.5.8)$$

Betrachten wir nun die auf 1 normierte Wellenfunktion

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) \in L_0^2([0, a]). \quad (3.5.9)$$

Sie liegt allerdings offenbar nicht im Definitionsbereich von \hat{H} als selbstadjungierter Operator, denn es ist

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{20}{a^5}} \psi''(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \frac{\hbar^2}{m} \notin L_0^2([0, a]). \quad (3.5.10)$$

Berechnet man trotzdem auf „naive Weise“ den Energierwartungswert, erhält man

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \stackrel{?}{=} \frac{5\hbar^2}{ma^2}. \quad (3.5.11)$$

Mit dem Fragezeichen über dem Gleichheitszeichen haben wir angedeutet, daß der Erwartungswert außerhalb des Definitionsbereichs von \hat{H} durch naive Bildung des Skalarprodukts gebildet wurde.

Weiter ist

$$\hat{H}^2 \psi(x) = 0 \Rightarrow \langle E^2 \rangle \stackrel{?}{=} 0 \Rightarrow \Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 < 0, \quad (3.5.12)$$

ein offenkundig absurdes Resultat. Hier wird offensichtlich, daß man die Erwartungswerte bzgl. des durch die Wellenfunktion (3.5.9) gegebenen Zustandes *nicht* auf diese Art bilden darf, da bereits $\hat{H}\psi$ nicht mehr im hier betrachteten Hilbert-Raum liegt und damit also ψ nicht im Definitionsbereich als selbstadjungiertem Operator.

Um die korrekten Erwartungswerte zu bestimmen, müssen wir ausnützen, dass \hat{H} nur dicht definiert ist, und wir haben die Erwartungswerte durch entsprechende Grenzprozesse zu berechnen. Da wir mit (3.5.8) ein VONS von \hat{H} -Eigenfunktionen besitzen, können wir die Partialsummen der entsprechenden Fourier-Entwicklung verwenden. Die Fourier-Koeffizienten sind

$$\psi_n = \langle u_n | \psi \rangle = \begin{cases} \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} & \text{für } n \text{ ungerade,} \\ 0 & \text{für } n \text{ gerade.} \end{cases} \quad (3.5.13)$$

Für die korrekten Energierwartungswerte erhalten wir also

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 E_n = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 a^2 m} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^4}, \quad \langle E^2 \rangle = \frac{240\hbar^4}{\pi^2 a^4 m^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} \quad (3.5.14)$$

3.5. Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

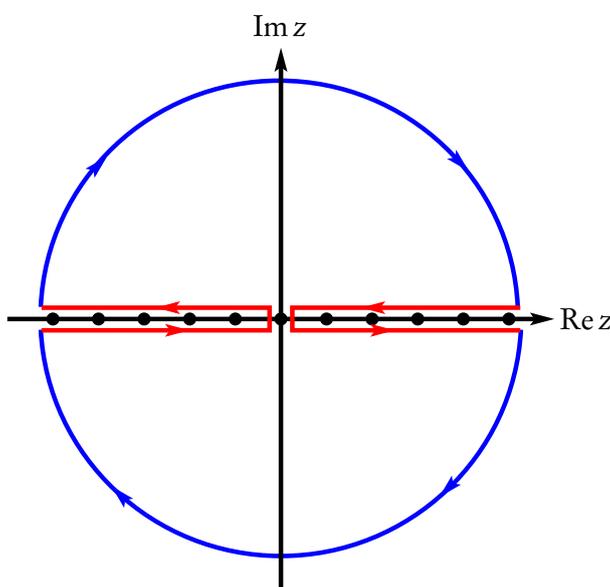
Die unendlichen Reihen lassen sich mit Hilfe einer geeigneten Konturintegration einer komplexen Funktion unter Anwendung des Residuensatzes berechnen. Dazu bemerken wir, dass

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(2n)^2} \right) = \frac{3}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{3}{8} \sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{n^2}. \quad (3.5.15)$$

Diese Summe können wir aber berechnen, indem wir den Residuensatz auf

$$\sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \frac{\pi}{z^3} z \cot(\pi z) \quad (3.5.16)$$

mit der Kontur



denn die Funktion

$$f(z) = \pi \cot(\pi z) \quad (3.5.17)$$

besitzt einfache Pole bei $z \in \mathbb{Z}$ mit Residuum 1 (schwarze Punkte). Die ursprüngliche Kontur ist durch die beiden roten Rechtecke ober- und unterhalb der reellen Achse, wobei die 0 ausgespart wird, gegeben. Die großen Halbkreise (blau) tragen im Limes des Radius $\rightarrow \infty$ nichts zum Integral bei. Die entstehende geschlossene Kontur C , die im Uhrzeigersinn durchlaufen wird, beinhaltet in ihrem Inneren nur den einfachen Pol des Integranden bei $z = 0$. Das entsprechende Residuum ist unter Berücksichtigung des Vorzeichens aufgrund des Umlaufsinnns der Kontur

$$-\operatorname{Res}_{z \rightarrow 0} \frac{\pi}{z^3} z \cot(\pi z) = -\frac{\pi}{2!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^2}{dz^2} [z \cot(\pi z)] = \frac{\pi^2}{3}. \quad (3.5.18)$$

Der Residuensatz ergibt also für (3.5.16)

$$\sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{3}. \quad (3.5.19)$$

3. Eindimensionale Probleme

Ebenso verfahren wir mit der anderen Reihe in (3.5.14):

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^4} &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{n^4} - \frac{1}{(2n)^4} \right] \\ &= \frac{15}{16} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{15}{32} \sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{n^4} \\ &= -\frac{15}{32} \frac{\pi}{4!} \frac{d^4}{dz^4} [z \cot(\pi z)]_{z \rightarrow 0} = \frac{\pi^4}{96}. \end{aligned} \quad (3.5.20)$$

Mit (3.5.15), (3.5.19) und (3.5.20) erhalten wir für (3.5.14)

$$\langle E \rangle = \frac{5\hbar^2}{a^2 m}, \quad \langle E^2 \rangle = \frac{30\hbar^4}{a^4 m^2} \Rightarrow \Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{5\hbar^4}{a^4 m^2}. \quad (3.5.21)$$

Die naive Berechnung der Erwartungswertes (3.5.11) erweist sich also noch als korrekt. Dies ergibt sich daraus, dass die Operationen in der Rechnung

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n |\psi_n|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} E_{2k+1} |\psi_{2k+1}|^2 = \sum_{0=1}^{\infty} E_{2k+1} \langle \psi | u_{2k+1} \rangle \langle u_{2k+1} | \psi \rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \langle \psi | u_{2k+1} \rangle \langle \mathbf{H} u_{2k+1} | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \langle \psi | u_{2k+1} \rangle \langle u_{2k+1} | \mathbf{H} \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{H} \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.5.22)$$

gerechtfertigt sind, da eine direkte Rechnung zeigt, dass für die hier allein maßgeblichen Eigenfunktionen mit $n = 2k + 1$

$$\langle \mathbf{H} u_n | \psi \rangle = \langle u_n | \mathbf{H} \psi \rangle \quad (3.5.23)$$

ist, obwohl ψ nicht im Definitionsbereich von \mathbf{H} als selbstadjungiertem Operator liegt.

Für \mathbf{H}^2 ist dieser Schritt aber nicht mehr gerechtfertigt. Es gilt zwar

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} E_{2k+1}^2 |\psi_{2k+1}|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \mathbf{H} u_{2k+1} | \psi \rangle \langle \psi | \mathbf{H} u_{2k+1} \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle u_{2k+1} | \mathbf{H} \psi \rangle \langle \mathbf{H} \psi | u_{2k+1} \rangle = \int_0^a dx |\hat{H} \psi(x)|^2, \end{aligned} \quad (3.5.24)$$

aber man kann nicht mehr naiv die Selbstadjungiertheit von \hat{H} in Anwendung auf $\hat{H} \psi$ ausführen, da $\hat{H} \psi(x)$ nicht in $L_0^2([0, a])$ liegt:

$$\langle E^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dr [\hat{H} \psi^*(x)] [\hat{H} \psi(x)] \neq \int_{\mathbb{R}} dr \psi^*(x) [\hat{H}^2 \psi(x)] = 0. \quad (3.5.25)$$

3.6 Der harmonische Oszillator

3.6.1 Energieeigenzustände

Wir betrachten ein Teilchen, das sich in einem äußeren harmonischen Potential entlang der x -Achse bewegen möge. Der Hamiltonoperator besitzt die Gestalt

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{x}^2. \quad (3.6.1)$$

3.6. Der harmonische Oszillator

Wir stellen uns die Aufgabe, ein vollständiges Orthonormalsystem von Energieeigenvektoren zu finden. Dazu lassen wir uns zunächst von den Bewegungsgleichungen im *Heisenbergbild* leiten. Aus den Kommutatorrelationen (4.1.1) ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{x}, \mathbf{H}] = \frac{\mathbf{p}}{m}, \\ \frac{d\mathbf{p}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}, \mathbf{H}] = -m\omega^2 \mathbf{x}.\end{aligned}\quad (3.6.2)$$

Die Lösung dieser Bewegungsgleichungen finden wir am einfachsten, indem wir den nicht-selbstadjungierten Operator

$$\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \mathbf{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \mathbf{p} \quad (3.6.3)$$

einführen. Dann lassen sich die Bewegungsgleichungen zu

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = -i\omega \mathbf{a} \quad (3.6.4)$$

zusammenfassen. Die Lösungen dieser Gleichungen lassen sich sofort hinschreiben,

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}_0 \exp(-i\omega t). \quad (3.6.5)$$

Wir sind nun aber nicht weiter an der Zeitentwicklung der Operatoren interessiert, sondern wollen das Eigenwertproblem für \mathbf{H} lösen. Die Struktur des Hamiltonoperators legt die Berechnung des selbstadjungierten Operators

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \mathbf{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{2} \quad (3.6.6)$$

nahe, wobei wir das Operatorprodukt einfach ausmultipliziert und die Vertauschungsrelationen (4.1.1) verwendet haben. Der Vergleich mit (3.6.1) ergibt

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (2\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + 1). \quad (3.6.7)$$

Wir können also das Eigenwertproblem für \mathbf{H} lösen, indem wir das für den hermiteschen Operator

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \quad (3.6.8)$$

betrachten.

Die Kommutatorrelationen des Operators \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger untereinander berechnet man sofort mit Hilfe der Kommutatorrelationen (4.1.1):

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}] = [\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}^\dagger] = 0, \quad [\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbb{1}. \quad (3.6.9)$$

Schließlich sind im folgenden noch die Kommutatoren

$$[\mathbf{a}, \mathbf{N}] = \mathbf{a}, \quad [\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{N}] = -\mathbf{a}^\dagger \quad (3.6.10)$$

nützlich.

Sei nun $|n\rangle$ irgendein Eigenvektor von \mathbf{N} zum Eigenwert n . Dann gilt

$$\mathbf{N}\mathbf{a}|n\rangle = \{[\mathbf{N}, \mathbf{a}] + \mathbf{a}\mathbf{N}\} = (n-1)\mathbf{a}|n\rangle, \quad (3.6.11)$$

3. Eindimensionale Probleme

d.h. $\mathbf{a}|n\rangle$ ist also entweder ein Eigenvektor von \mathbf{N} zum Eigenwert $n - 1$ oder der Nullvektor.

Weiter ist \mathbf{N} ein „positiv semidefiniter Operator“, d.h. für jeden Vektor $|\psi\rangle$ gilt

$$\langle \psi | \mathbf{N} | \psi \rangle = \langle \mathbf{a}\psi | \mathbf{a}\psi \rangle \geq 0. \quad (3.6.12)$$

Setzen wir hierin insbesondere $|\psi\rangle = |n\rangle$, folgt, daß $n \geq 0$ sein muß. Wenden wir also \mathbf{a}^k auf $|n\rangle$ an, muß für ein $k \in \mathbb{N}$ gelten $n - k = 0$, weil es andernfalls Eigenvektoren mit beliebig kleinen Eigenwerten von \mathbf{N} gäbe, was aber eben wegen (3.6.12) nicht möglich ist. Existiert also überhaupt ein simultaner Eigenvektor von \mathbf{N} , dann muß es (wenigstens) einen mit $n = 0$ geben, und für diesen muß gelten

$$\mathbf{a}|0\rangle = 0. \quad (3.6.13)$$

Weiter gilt aber auch

$$\mathbf{N}\mathbf{a}^\dagger |n\rangle = \{[\mathbf{N}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{N}\} |n\rangle = (n + 1)\mathbf{a}^\dagger |n\rangle, \quad (3.6.14)$$

und das beweist, daß $\mathbf{a}^\dagger |n\rangle$ ein simultaner Eigenvektor von \mathbf{N}_i zum Eigenwert $n + 1$ sein muß, und also das Spektrum von \mathbf{N} gerade \mathbb{N} ist, vorausgesetzt, es existiert zumindest ein Eigenvektor mit der Eigenschaft (3.6.13)².

Nehmen wir an, $|0\rangle$ sei auf 1 normiert, ergeben sich gemäß (3.6.14) weiter die auf 1 normierten simultanen Eigenvektoren von \mathbf{N} durch fortgesetzte Anwendung von \mathbf{a}^\dagger aus $|0\rangle$ und nachfolgende Normierung. Zur Bestimmung des Normierungsfaktors, nehmen wir nun also an, die $|n\rangle$ seien auf 1 normiert. Dann folgt

$$\langle \mathbf{a}^\dagger n | \mathbf{a}^\dagger n \rangle = \langle n | \mathbf{N} + [\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] | n \rangle = (n + 1) |n + 1\rangle. \quad (3.6.15)$$

durch Rekursion erhalten wir also schließlich

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\mathbf{a}^\dagger)^n |0\rangle, \quad (3.6.16)$$

wobei wir die Normierungskonstanten willkürlich reell gewählt haben, da Phasenfaktoren ohnehin irrelevant sind. Mit Hilfe der Kommutatorrelation (3.6.9) finden wir

$$\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} \{[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{N}\} (\mathbf{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\mathbb{1} + \mathbf{N}) \sqrt{(n-1)!} |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (3.6.17)$$

Wir stellen weiter fest, daß damit auch das Eigenwertproblem für \mathbf{H} gelöst ist, denn gemäß (3.6.7) ist $|n\rangle$ ein Eigenvektor von \mathbf{H}

$$\mathbf{H}|n\rangle = E_n |n\rangle \quad (3.6.18)$$

zum Eigenwert

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.6.19)$$

Es ist klar, daß der Zustand $|0\rangle$ der Grundzustand, d.h. der Zustand der niedrigstmöglichen Energie des Teilchens ist.

Nun müssen wir noch die Existenz und Eindeutigkeit des Grundzustands nachweisen sowie zeigen, daß durch (3.6.16) wieder normierbare Hilbertraumvektoren entstehen. Dies läßt sich am einfachsten in der Ortsdarstellung bewerkstelligen. Betrachten wir also die Wellenfunktionen

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle. \quad (3.6.20)$$

²Hier und im folgenden bezeichnen wir mit \mathbb{N} die Menge aller natürlichen Zahlen einschließlich der 0.

3.6. Der harmonische Oszillator

Erinnern wir uns, daß die Orts- und Impulsoperatoren in der Ortsdarstellung durch (2.4.4) gegeben sind, folgt für die Grundzustandswellenfunktion

$$\mathbf{a}\psi_0(x) = \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right) \psi_0(x) = 0. \quad (3.6.21)$$

Setzen wir zur Abkürzung

$$a^2 = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad (3.6.22)$$

schreibt sich diese Gleichung als

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_0 = -\frac{x}{a^2} \psi_0. \quad (3.6.23)$$

Die Lösung ergibt sich sofort *eindeutig* zu

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right). \quad (3.6.24)$$

Die Normierung ist (bis auf einen unerheblichen Phasenfaktor) durch

$$\langle 0|0\rangle = \int dx |\psi_0(x)|^2 = |\mathcal{N}|^2 (\pi a^2)^{1/2} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \mathcal{N} = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \quad (3.6.25)$$

gegeben.

Wir erhalten also schließlich

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right). \quad (3.6.26)$$

Es existiert also genau eine quadratintegrale Wellenfunktion zum simultanen Eigenwertproblem von \mathbf{N} mit den Eigenwerten $n = 0$. Mittels (3.6.16) sehen wir, daß dann auch alle übrigen Eigenfunktionen quadratintegrel sind, denn sie ergeben sich als Produkt aus der Gaußfunktion (3.6.26) mit einem Polynom, das sich durch fortgesetzte Anwendung des Differentialoperators \mathbf{a}^\dagger bestimmen läßt:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\mathbf{a}^\dagger)^n \psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{x}{a} - a \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x). \quad (3.6.27)$$

Um diese Funktionen einfacher berechnen zu können, führen die dimensionslose Variable

$$\xi = \frac{x}{a} \quad (3.6.28)$$

ein und schreiben die Wellenfunktion im folgenden als Funktion von ξ . Dann ist

$$\mathbf{a}^\dagger \psi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \psi(\xi) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{d}{d\xi} \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \psi(\xi) \right]. \quad (3.6.29)$$

Durch Iteration folgt daraus

$$\mathbf{a}^{\dagger n} = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \psi(\xi) \right]. \quad (3.6.30)$$

3. Eindimensionale Probleme

Aus (3.6.27) folgt daraus mit (3.6.26)

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} (-1)^n \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n \exp(-\xi^2). \quad (3.6.31)$$

Folglich ist

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \quad (3.6.32)$$

Dabei sind

$$H_n(\xi) := (-1)^n \exp(\xi^2) \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n \exp(-\xi^2) \quad (3.6.33)$$

die sog. *Hermiteschen Polynome*.

Eine nützliche Darstellung als Integral entsteht, indem man die Gaußfunktion als Fourier-Integral

$$\exp(-\xi^2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int du \exp(-u^2 + 2iu\xi) \quad (3.6.34)$$

schreibt und in die **Rodrigues-Formel** (3.6.33) einsetzt:

$$H_n(\xi) = \frac{\exp(\xi^2)}{\sqrt{\pi}} \int du (-2iu)^n \exp(-u^2 + 2iu\xi). \quad (3.6.35)$$

Aus dem Vorstehenden ergibt sich dann weiter unmittelbar, daß die ψ_n ein orthonormiertes Funktionensystem bilden, daß also

$$\int dx \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) = \delta_{n'n} \quad (3.6.36)$$

gilt. Substituieren wir hierin $x = a\xi$, folgt für die Hermite-Polynome die Orthogonalitätsbeziehung

$$\int d\xi \exp(-\xi^2) H_{n'}(\xi) H_n(\xi) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{n'n}. \quad (3.6.37)$$

Andere nützliche Beziehungen ergeben sich aus der **erzeugenden Funktion** der Hermitepolynome. Sie ist definiert als

$$F(\xi, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) z^n. \quad (3.6.38)$$

Verwenden wir (3.6.33), folgt aus dem Taylor-Satz

$$F(\xi, z) = \exp(\xi^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{n!} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n \exp(-\xi^2) = \exp[\xi^2 - (\xi - z)^2] = \exp(2\xi z - z^2). \quad (3.6.39)$$

Differenzieren wir diese Gleichung nach z , finden wir

$$2(\xi - z) \exp(2\xi z - z^2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H_n(\xi) z^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_{n+1}(\xi) z^n. \quad (3.6.40)$$

Multiplizieren wir andererseits (3.6.39) mit $2(\xi - z)$ und vergleichen die Koeffizienten von z^n , finden wir die Rekursionsformel

$$H_1(\xi) = 2\xi H_0(\xi), \quad H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi), \quad (3.6.41)$$

3.6. Der harmonische Oszillator

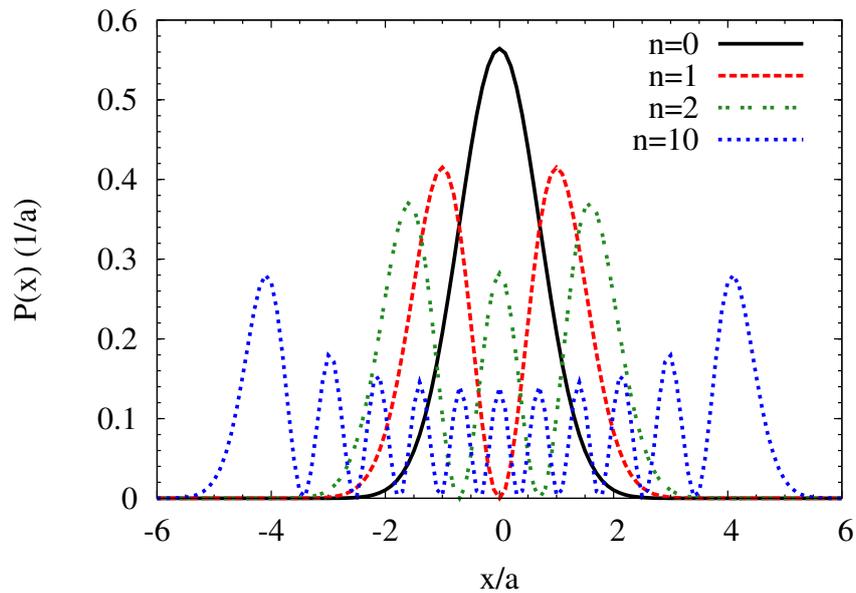


Abbildung 3.6: Die Energieeigenfunktionen des eindimensionalen Harmonischen Oszillators zu den Eigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ für $n = 0, 1, 2, 10$. Besonders bemerkenswert ist die Tatsache, daß in dieser Situation, die einem Teilchen mit scharf bestimmter Energie entsprechen, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für beliebig große Ortskomponenten x nicht verschwindet. In der klassischen Situation verbietet der Energiesatz, daß sich das Teilchen außerhalb der durch die Energie vorgegebenen Umkehrpunkte $\pm x_0$ bewegt, die durch $E = m\omega^2 x_0^2/2$ bestimmt sind. Diese Eigenschaft, daß Teilchen mit scharf bestimmter Energie sich in Regionen aufhalten können, in die sie sich gemäß der klassischen Mechanik aufgrund des Energiesatzes nicht gelangen können, bezeichnet man als **Tunneleffekt**.

die sich (zusammen mit der Startbedingung $H_0(\xi) \equiv 1$) gut zur numerischen Berechnung der Hermitepolynome eignet. Auf dieselbe Weise erhalten wir durch Ableiten von (3.6.39) nach ξ die Ableitung der Hermitepolynome

$$H'_n(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{für } n = 0, \\ 2nH_{n-1}(\xi) & \text{für } n \geq 1. \end{cases} \quad (3.6.42)$$

3.6.2 Der Propagator des harmonischen Oszillators

Zur Illustration der soeben entwickelten Methoden wollen wir nun den *Propagator* des *eindimensionalen* harmonischen Oszillators gewinnen. Dazu gehen wir von (2.11.7) aus, wonach der Propagator in der Ortsdarstellung durch

$$U(t; x, x') = \left\langle x \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t \mathbf{H}\right) \right| x' \right\rangle \quad (3.6.43)$$

gegeben ist, wobei wir den Anfangszeitpunkt der Einfachheit halber $t_0 = 0$ gesetzt haben. Wegen der Vollständigkeit der Energieeigenzustände folgt

$$\begin{aligned} U(t; x, x') &= \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle x \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t \mathbf{H}\right) \right| n \right\rangle \langle n | x' \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x) \psi_n^*(x') \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n(\xi) H_n(\xi') \exp\left(-\frac{\xi^2 + \xi'^2}{2} - in\omega\right) \\ &\quad \text{mit } \xi = \frac{x}{a}, \quad \xi' = \frac{x'}{a}. \end{aligned} \quad (3.6.44)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt (3.6.19) und (3.6.32) angewandt. Um die Summe explizit auszuführen, substituieren wir die Integraldarstellung der Hermite-Polynome (3.6.35)

$$\begin{aligned} U(t; x, x') &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^3 a}} \exp\left(\frac{\xi^2 + \xi'^2}{2}\right) \\ &\quad \times \int du \int dv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2\alpha uv)^n}{n!} \exp(-u^2 - v^2 + 2i\xi u + 2i\xi' v) \end{aligned} \quad (3.6.45)$$

mit $\alpha = \exp(-i\omega t)$. Die Summe stellt gerade die Exponentialreihe dar, so daß wir für sie sofort

$$U(t; x, x') = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^3 a}} \exp\left(\frac{\xi^2 + \xi'^2}{2}\right) \int du \int dv \exp(-u^2 - v^2 + 2i\xi u + 2i\xi' v - 2\alpha uv) \quad (3.6.46)$$

erhalten. Die beiden Gaußintegrale lassen sich nacheinander ausführen, und das Ergebnis lautet

$$U(t; x, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \sqrt{\frac{\alpha}{1-\alpha^2}} \exp\left(-\frac{\xi^2 + \xi'^2}{2} \frac{1+\alpha^2}{1-\alpha^2} + \frac{2\alpha}{1-\alpha^2} \xi \xi'\right). \quad (3.6.47)$$

Wegen

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{1-\alpha^2} &= \frac{1}{1/\alpha - \alpha} = \frac{1}{\exp(i\omega t) - \exp(-i\omega t)} = \frac{1}{2i \sin(\omega t)}, \\ \frac{1+\alpha^2}{1-\alpha^2} &= \frac{1/\alpha + \alpha}{1/\alpha - \alpha} = -i \frac{\cos(\omega t)}{\sin(\omega t)} \end{aligned} \quad (3.6.48)$$

ergibt sich daraus

$$U(t; x, x') = \sqrt{\frac{1}{2\pi i \sin(\omega t)}} \frac{1}{a} \exp \left\{ \frac{i}{2a^2 \sin(\omega t)} [(x^2 + x'^2) \cos(\omega t) - 2xx'] \right\}. \quad (3.6.49)$$

3.6.3 Energieeigenfunktionen in der Impulsdarstellung

Jetzt berechnen wir noch die Impulsdarstellung der Energieeigenfunktionen. Gemäß (2.4.12) haben wir

$$\tilde{\psi}_n(p) = \int \frac{dx}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) \quad (3.6.50)$$

zu bestimmen³. Setzen wir hierin (3.6.32) ein und substituieren im Fourierintegral $x = a\xi$, ergibt sich

$$\tilde{\psi}_n(p) = \left(\frac{a^2}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar 2^n n!}} \int d\xi H_n(\xi) \exp[-\xi^2/2 - ia\xi p/\hbar]. \quad (3.6.51)$$

Das Integral bestimmen wir nun mit Hilfe der erzeugenden Funktion (3.6.38), indem wir (3.6.39) verwenden. Demnach ist das Integral durch den n -ten Koeffizienten der Potenzreihenentwicklung von

$$\begin{aligned} \tilde{F}(p, z) &= \int d\xi \exp[-\xi^2/2 + \xi(2z - ia p/\hbar) - z^2] \\ &= \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{a^2 p^2}{2\hbar^2}\right) \exp\left[2\frac{ap}{\hbar}(-iz) - (-iz)^2\right]. \end{aligned} \quad (3.6.52)$$

nach z eindeutig bestimmt. Der zweite Exponentialfaktor ist aber gerade wieder durch die erzeugende Funktion der Hermitepolynome gegeben:

$$\tilde{F}(p, z) = \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{a^2 p^2}{2\hbar^2}\right) F\left(\frac{ap}{\hbar}, -iz\right). \quad (3.6.53)$$

Wenden wir hier wieder (3.6.38) an, ergibt sich schließlich

$$\tilde{\psi}_n(p) = \left(\frac{a^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} (-i)^n \left[H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \right]_{\xi=ap/\hbar}. \quad (3.6.54)$$

Bis auf Skalierungsfaktoren und Phasen stimmen also die Eigenfunktionen in der Impulsdarstellung mit denen in der Ortsdarstellung überein. Der Grund dafür ist die Tatsache, daß der Hamiltonoperator, abgesehen von Skalierungsfaktoren, symmetrisch unter Vertauschungen von Ort und Impuls ist.

3.6.4 Kohärente und gequetschte Zustände

Die **Kohärenten Zustände** des harmonischen Oszillators wurden von Schrödinger gefunden als er nach solchen Zuständen suchte, für die das quantenmechanische Verhalten des Oszillators möglichst genau der klassischen Bewegung eines Teilchens in einem x^2 -Potential entspricht.

³Wir unterscheiden die Wellenfunktion in der Impulsdarstellung durch eine Tilde von der in der Ortsdarstellung, schreiben also im folgenden stets $\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle$ in der Impuls- bzw. $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ in der Ortsdarstellung.

3. Eindimensionale Probleme

Vergegenwärtigen wir uns die Herleitung der Heisenbergschen Unschärferelation in Abschnitt 2.6 für Ort und Impuls, so liegt ein Zustand $|\psi_0\rangle$ mit minimalem Orts-Impulsunschärfeprodukt, also ein Zustand, für den

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (3.6.55)$$

gilt, genau dann vor, wenn es ein $\lambda \in \mathbb{R}$ gibt, so daß

$$[(\mathbf{x} - x_0) + i\lambda(\mathbf{p} - p_0)]|\psi_0\rangle = 0. \quad (3.6.56)$$

Dabei sind x_0 und p_0 die beliebig vorgebbaren Erwartungswerte der Observablen x und p . Man kann diese Forderung auch als Eigenwertgleichung in der Form

$$(\mathbf{x} + i\lambda\mathbf{p})|\psi_0\rangle = (x_0 + i\lambda p_0)|\psi_0\rangle \quad (3.6.57)$$

schreiben. In der Ortsdarstellung lautet diese Gleichung

$$\left(x + i\hbar\lambda \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = (x_0 + i\lambda p_0)\psi_0(x). \quad (3.6.58)$$

Die normierte Lösung ist bis auf einen irrelevanten Phasenfaktor ein Gaußsches Wellenpaket der Form

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(\pi\hbar\lambda)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\hbar\lambda} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right]. \quad (3.6.59)$$

Das bedeutet, daß wir $\lambda \in \mathbb{R}_{>0}$, d.h. die Ortsunschärfe $\Delta x = \sqrt{\hbar\lambda/2}$, beliebig vorgeben können. Einen solchen Zustand bezeichnet man im Zusammenhang mit dem harmonischen Oszillator als „gequetschten Zustand“ (im Englischen **squeezed state**). Die Impulsunschärfe ergibt sich tatsächlich zu $\Delta p = \hbar/(2\Delta x) = \sqrt{\hbar/(2\lambda)}$.

Wählen wir nun einen solchen gequetschten Zustand als Anfangszustand einer Lösung der **zeitabhängigen Schrödingergleichung für den harmonischen Oszillator**, erhalten wir die Wellenfunktion für spätere Zeiten mit Hilfe des Propagators (3.6.49):

$$\Psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' U(t; x, x') \psi_0(x'), \quad (3.6.60)$$

und das ist wieder ein Gaußsches Wellenpaket. Wir können die Erwartungswerte für Ort und Impuls sowie deren Standardabweichungen einfacher berechnen, wenn wir uns des Heisenbergbildes bedienen. Im Heisenbergbild ist gemäß (3.6.3) und (3.6.5) nämlich

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \langle \psi_0 | \mathbf{x}_H(t) | \psi_0 \rangle = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t), \\ \langle p(t) \rangle &= m \frac{d}{dt} \langle x(t) \rangle = -m x_0 \omega \sin(\omega t) + p_0 \cos(\omega t) \end{aligned} \quad (3.6.61)$$

und nach einiger Rechnung

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \frac{\hbar\lambda}{2} \cos^2(\omega t) + \frac{\hbar}{2\lambda m^2 \omega^2} \sin^2(\omega t), \\ \Delta p^2 &= \frac{\hbar m^2 \omega^2 \lambda}{2} \sin^2(\omega t) + \frac{\hbar}{2\lambda} \cos^2(\omega t). \end{aligned} \quad (3.6.62)$$

3.6. Der harmonische Oszillator

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls bewegen sich also genau wie die entsprechenden Größen eines klassischen Teilchens, und die Orts- und Impulsunschärfen bleiben im Gegensatz zum Fall des freien Teilchens beschränkt.

Weiter finden wir

$$\Delta x(t)\Delta p(t) = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{1 + 6(\lambda m \omega)^2 + (\lambda m \omega)^4 - [(\lambda m \omega)^2 - 1]^2 \cos(4\omega t)}{8(\lambda m \omega)^2}} \quad (3.6.63)$$

Das Unschärfeprodukt oszilliert also periodisch im Intervall

$$\frac{\hbar}{2} \leq \Delta x(t)\Delta p(t) \leq \frac{1 + (\lambda m \omega)^2}{2\lambda m \omega} \frac{\hbar}{2}. \quad (3.6.64)$$

Das Unschärfeprodukt bleibt demnach für die spezielle Wahl

$$\lambda = \frac{1}{m\omega} \quad (3.6.65)$$

zeitlich konstant und minimal. Solche Zustände bezeichnet man als **kohärente Zustände**. Sie entsprechen in dem Sinne am besten einem klassischen Teilchen in einem harmonischen Oszillatorpotential als sie zeitlich konstante Orts- und Impulsunschärfen besitzten, wobei das Orts-Impulsunschärfeprodukt minimal ist. Genauer läßt sich ein solches Teilchen offenbar nicht für alle Zeiten zugleich *im Phasenraum* lokalisieren.

Ein Blick auf (3.6.57) zeigt im Vergleich mit (3.6.3), daß die kohärenten Zustände **Eigenzustände des Vernichtungsoperators** sind. Wir können offenbar Lösungen mit beliebigen Eigenwerten $\alpha \in \mathbb{C}$ finden, da wir ja immer noch beliebige Erwartungswerte für Ort und Impuls (also x_0 und p_0) vorgeben können. Ein kohärenter Zustand ist also durch

$$\mathbf{a}|\Phi(\alpha)\rangle = \alpha|\Phi(\alpha)\rangle \quad (3.6.66)$$

bestimmt.

Nun wollen wir die kohärenten Zustände nach Energieeigenzuständen entwickeln. Statt die explizite Form des kohärenten Zustandes in der Ortsdarstellung (3.6.59) mit λ aus (3.6.65) zu verwenden, ist es bequemer, von dem Ansatz

$$|\Phi(\alpha)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (3.6.67)$$

auszugehen. Aus (3.6.17) ergibt sich für die Eigenwertgleichung (3.6.66)

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha c_n |n\rangle. \quad (3.6.68)$$

Numerieren wir die Summe auf der linken Seite um, finden wir die Rekursionsformel

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} = \alpha c_n. \quad (3.6.69)$$

Offensichtlich ist also

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0, \quad (3.6.70)$$

3. Eindimensionale Probleme

wobei c_0 frei wählbar ist. Wir werden diese Konstante sogleich verwenden, um den kohärenten Zustand zu normieren. Jedenfalls gilt nun

$$|\Phi(\alpha)\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.6.71)$$

Die Norm ist offenbar

$$\langle\Phi(\alpha)|\Phi(\alpha)\rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \exp(|\alpha|^2). \quad (3.6.72)$$

Für auf 1 normierte kohärente Zustände gilt also (bis auf einen irrelevanten Phasenfaktor)

$$c_0 = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right). \quad (3.6.73)$$

Wir zeigen noch, daß $|\Phi(\alpha)\rangle$ durch eine unitäre Transformation aus dem Grundzustand $|0\rangle$ hervorgeht. Mit (3.6.16) können wir (3.6.71) nämlich in der Form

$$|\Phi(\alpha)\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \mathbf{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = c_0 \exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger) |0\rangle \quad (3.6.74)$$

schreiben. Da $\mathbf{a}|0\rangle = 0$ ist, ist demnach

$$|\Phi(\alpha)\rangle = c_0 \exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger) \exp(-\alpha^* \mathbf{a}) |0\rangle. \quad (3.6.75)$$

Wegen $[\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{A}] = \mathbb{1}$ können wir offenbar die im Anhang hergeleitete Formel (B.0.8) anwenden:

$$\exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger - \alpha^* \mathbf{a}) = \exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger) \exp(-\alpha^* \mathbf{a}) \underbrace{\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)}_{c_0}. \quad (3.6.76)$$

Damit folgt

$$|\Phi(\alpha)\rangle = \exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger - \alpha^* \mathbf{a}) |0\rangle. \quad (3.6.77)$$

Offensichtlich ist der Operator

$$\mathbf{U}(\alpha) = \exp(\alpha \mathbf{a}^\dagger - \alpha^* \mathbf{a}) \quad (3.6.78)$$

unitär, und das wollten wir zeigen.

Wir können nun auch recht einfach die Zeitentwicklung der Wellenfunktion angeben, wenn wir zur Zeit $t = 0$ den kohärenten Zustand $|\Psi(0)\rangle = |\Phi(\alpha)\rangle$ vorgeben. Im Schrödingerbild ist nämlich

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t\right) \mathbf{U}(\alpha) |0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t\right) \mathbf{U}(\alpha) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t\right) \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.6.79)$$

Nun beschreiben die Exponentialoperatoren aber genau die inverse Zeitentwicklung⁴ der Observablenoperatoren im Heisenbergbild, und wir können daher sofort mit Hilfe von (3.6.5) schreiben

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \mathbf{U}[\alpha \exp(-i\omega t)] |0\rangle = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) |\Phi[\alpha \exp(-i\omega t)]\rangle. \quad (3.6.80)$$

⁴d.h. wir haben t durch $-t$ zu ersetzen

3.6. Der harmonische Oszillator

Ein Vergleich von (3.6.57) mit (3.6.66) für den speziellen Fall eines kohärenten Zustands, d.h. für $\lambda = 1/(m\omega)$ cf. (3.6.65) zeigt den Zusammenhang zwischen den zeitabhängigen Erwartungswerten von Ort und Impuls und α :

$$\langle x(t) \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}[\alpha \exp(-i\omega t)], \quad \langle p(t) \rangle = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}[\alpha \exp(-i\omega t)]. \quad (3.6.81)$$

Aufspalten in Real- und Imaginärteil führt in der Tat wieder auf (3.6.61). Die Ortsdarstellung ist dann unter Verwendung von (3.6.65) unmittelbar mit Hilfe von (3.6.59) zu

$$\Psi(t, x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}[x - \langle x(t) \rangle]^2 + \frac{i}{\hbar}x \langle p(t) \rangle - \frac{i\omega t}{2}\right\} \quad (3.6.82)$$

bestimmt.

Wir berechnen weiter die Wahrscheinlichkeit, bei einer Energiemessung gerade den Wert $E_n = \hbar\omega/2(2n+1)$ zu finden. Diese lesen wir sofort aus (3.6.71) ab:

$$P(n) = \exp(-|\alpha|^2) \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!}. \quad (3.6.83)$$

Dies ist eine Poissonverteilung mit dem Erwartungswert

$$\langle N \rangle = |\alpha|^2 \Rightarrow \langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(2|\alpha|^2 + 1). \quad (3.6.84)$$

Wir leiten noch einige nützliche Eigenschaften der kohärenten Zustände her. Als erstes zeigen wir, daß

$$\int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbb{1} \quad (3.6.85)$$

ist. Dabei verstehen wir unter $d^2\alpha = d\alpha_1 d\alpha_2$ mit $\alpha_1 = \operatorname{Re} \alpha$ und $\alpha_2 = \operatorname{Im} \alpha$. Um (3.6.85) zu beweisen berechnen wir mit Hilfe von (3.6.71) und (3.6.73)

$$\int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} \langle n | \Phi(\alpha) \rangle \langle \Phi(\alpha) | m \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} \exp(-|\alpha|^2) \frac{\alpha^{*n} \alpha^m}{\sqrt{n!m!}}. \quad (3.6.86)$$

Führen wir Polarkoordinaten via $\alpha = r \exp(i\varphi)$ ein, ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} \langle n | \Phi(\alpha) \rangle \langle \Phi(\alpha) | m \rangle &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dr r \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(-r^2) \frac{r^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} \exp[i\varphi(m-n)] \\ &= 2\delta_{nm} \int_0^\infty dr \frac{r^{2n+1}}{n!} \exp(-r^2) = \delta_{nm}. \end{aligned} \quad (3.6.87)$$

Damit ist aber

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} |\Phi(\alpha)\rangle \langle \Phi(\alpha)| &= \sum_{n,m=0}^\infty \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \frac{1}{\pi} |n\rangle \langle n | \Phi(\alpha) \rangle \langle \Phi(\alpha) | m \rangle \langle m| \\ &= \sum_{n,m=0}^\infty \delta_{mn} |n\rangle \langle m| = \sum_{n=0}^\infty |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}, \end{aligned} \quad (3.6.88)$$

und damit ist in der Tat (3.6.85) bewiesen.

3. Eindimensionale Probleme

Allerdings sind die kohärenten Zustände *nicht* orthogonal zueinander, denn es ist mit (3.6.71)

$$\begin{aligned}\langle \Phi(\alpha) | \Phi(\beta) \rangle &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}\right) \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*k} \beta^l}{\sqrt{k!l!}} \langle k | l \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \beta)^k}{k!} \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2} + \alpha^* \beta\right).\end{aligned}\tag{3.6.89}$$

Kapitel 4

Zentralpotentiale

In diesem Kapitel wenden wir uns den einfachsten realistischen Anwendungen der Quantentheorie zu, insoweit man geschlossene Lösungen für das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators finden kann. Das schränkt allerdings die Anwendungen gehörig ein. Wir werden nur drei konkrete Probleme lösen, nämlich den symmetrischen harmonischen Oszillator, das Wasserstoffatom in seiner einfachsten Form und das sog. Morsepotential aus der Molekülphysik.

4.1 Der Drehimpuls

Wir betrachten zunächst ausschließlich quantisierte „klassische“ Systeme in dem Sinne, daß wir die Heisenbergalgebra für kartesische Orts- und Impulskomponenten postulieren:

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbb{1}, \quad [\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j] = [\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j] = 0. \quad (4.1.1)$$

Weiter nehmen wir an, daß sich alle Observablen als Funktionen von $\vec{\mathbf{x}}$ und $\vec{\mathbf{p}}$ definieren lassen. Wir werden im nächsten Kapitel sehen, daß dies nicht die allgemeinst mögliche Beschreibung von Teilcheneigenschaften in der nichtrelativistischen Quantentheorie dar. Wir können eine andere Basis für die Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators bzw. allgemein für jeden Hamiltonoperator, für den das Potential nur vom Abstand $r = |\vec{\mathbf{x}}|$ abhängt, einführen, indem wir außer der Energie noch den *Drehimpuls* als Observable betrachten. Hier betrachten wir nur den sog. *Bahndrehimpuls*, der in Analogie zur klassischen Physik durch

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{p}} \quad (4.1.2)$$

definiert ist. Dabei treten übrigens keine Operatorordnungsprobleme auf, da im Kreuzprodukt nur Produkte von Orts- und Impulskomponenten in zueinander senkrechten Richtungen auftreten. In Komponentenschreibweise gilt

$$\mathbf{L}_a = \epsilon_{abc} \mathbf{x}_b \mathbf{p}_c, \quad (4.1.3)$$

wobei ϵ_{abc} das *Levi-Civita-Symbol* bezeichnet, welches vollständig antisymmetrisch unter Vertauschungen der Indizes ist und damit durch $\epsilon_{123} = 1$ vollständig definiert ist. Als erstes zeigen wir, daß die Drehimpulskomponenten selbstadjungiert sind:

$$\mathbf{L}_a^\dagger = \epsilon_{abc} \mathbf{p}_c \mathbf{x}_b = \epsilon_{abc} \mathbf{x}_b \mathbf{p}_c = \mathbf{L}_a, \quad (4.1.4)$$

wobei wir verwendet haben, daß aufgrund der Antisymmetrie von ϵ_{abc} nur Produkte aus Orts und Impulskomponenten mit unterschiedlichen Indizes auftreten, und diese kommutieren aufgrund von

4. Zentralpotentiale

(4.1.1). Die Drehimpulskomponenten sind also auch in der Quantentheorie mögliche Observable eines Teilchens. Da die Drehimpulskomponenten allerdings nicht verstauchen, wie wir gleich sehen werden, sind sie nicht *kompatibel*, d.h. die Präparation eines Teilchens, so daß eine Komponente des Drehimpulses (gewöhnlich wählt man L_z) bestimmt ist zieht gewöhnlich die Unbestimmtheit der beiden anderen Drehimpulskomponenten nach sich.

Wir erinnern uns von der klassischen Mechanik her, daß im Hamiltonformalismus die Drehimpulskomponente L_a gerade die Erzeugende einer infinitesimalen Drehung um die jeweilige Richtung \hat{e}_a im Sinne einer kanonischen Transformation sind. Die Poissonklammerbeziehungen entsprechen dabei den Kommutatorbeziehungen für die entsprechende Basis der zur Drehgruppe $SO(3)$ gehörigen Liealgebra $so(3)$. In der Tat ergibt sich aus der Heisenbergalgebra (4.1.1) sofort, daß auch im quantenmechanischen Falle

$$[L_a, L_b] = i\hbar\epsilon_{abc}L_c \quad (4.1.5)$$

gilt. Als nächstes weisen wir nach, daß alle drei Komponenten \vec{L} mit formalen Skalarprodukten von vektorartigen Operatoren wie \vec{x}, \vec{p} und auch \vec{L} selbst vertauschen. Zunächst zeigen wir allgemeiner, daß \vec{L} infinitesimale Erzeugende von Drehungen sind, wenn sie auf die oben genannten "Vektoroperatoren" angewendet werden. In der Tat ist z.B.

$$[L_a, x_j] = \epsilon_{abc} [x_b p_c, x_j] = \epsilon_{abc} x_b [p_c, x_j] = \epsilon_{abc} x_b (-i\hbar\delta_{cj}\mathbb{1}) = -i\hbar\epsilon_{abj}x_b. \quad (4.1.6)$$

Es ist also

$$-\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\alpha}[\vec{L}, x_j] = -\epsilon_{jab}\delta\alpha_a x_b = -(\delta\vec{\alpha} \times \vec{x})_j. \quad (4.1.7)$$

Wir können also davon ausgehen, daß eine Drehung um einen Drehwinkel $\alpha = |\vec{\alpha}|$ um die Achse $\vec{n} = \vec{\alpha}/\alpha$ durch die unitäre *Drehmatrix*

$$D(\vec{\alpha}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\vec{L}\right) \quad (4.1.8)$$

gegeben ist. In der Tat ergibt sich (4.1.7) durch Entwicklung von $D(\delta\vec{\alpha})x_j D^\dagger(\delta\vec{\alpha})$ bis zur linearen Ordnung in $\delta\alpha$ als Änderung des Vektors \vec{x} unter dieser unitären Transformation.

Analog zum Vorgehen in (4.1.6) zeigt man, daß

$$[L_a, p_j] = -i\hbar\epsilon_{jab}p_b, \quad [L_a, L_b] = -i\hbar\epsilon_{bac}L_c = i\hbar\epsilon_{abc}L_c \quad (4.1.9)$$

gelten. Die letztere Formel zeigt insbesondere, daß die Drehimpulskomponenten in der Tat eine Basis der *Liealgebra der Drehgruppe* $so(3)$ bilden.

Nun zeigen wir, daß für irgendeinen Vektoroperator \vec{V} , für den definitionsgemäß die Kommutatorrelationen

$$[L_a, V_j] = -i\hbar\epsilon_{jab}V_b \quad (4.1.10)$$

gelten, der Operator \vec{V}^2 mit allen drei Drehimpulskomponenten kommutiert:

$$\delta_{jk}[L_a, V_j V_k] = \delta_{jk}V_j(-i\hbar\epsilon_{kab})V_b + \delta_{jk}(-i\hbar\epsilon_{jab})V_b V_k = -i\hbar\epsilon_{jab}(V_j V_b + V_b V_j) \quad (4.1.11)$$

Da der Operator in der Klammer (unabhängig davon, ob V_j und V_b vertauschen oder nicht!) symmetrisch unter Vertauschung der Indizes j und b ist, während das Levi-Civita-Symbol dabei das Vorzeichen wechselt, ist in der Tat

$$[L_a, \vec{V}^2] = 0. \quad (4.1.12)$$

4.1. Der Drehimpuls

Insbesondere folgt für $\vec{\mathbf{V}} = \vec{\mathbf{L}}$

$$[\mathbf{L}_a, \vec{\mathbf{L}}^2] = 0. \quad (4.1.13)$$

Haben wir also einen Hamiltonoperator der Form

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (4.1.14)$$

vorliegen, wobei $\mathbf{r} = \sqrt{\vec{\mathbf{x}}^2}$ ist, so vertauscht \mathbf{H} mit $\vec{\mathbf{L}}$. Wir können also simultane Eigenvektoren von \mathbf{H} , $\vec{\mathbf{L}}^2$ und \mathbf{L}_3 als Basis verwenden. Alternativ können wir statt \mathbf{H} auch \mathbf{r} oder $\mathbf{p} = \sqrt{\vec{\mathbf{p}}^2}$ wählen. Eine natürliche Wahl für die Ortsdarstellung sind in diesem Zusammenhang freilich Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) . Darauf kommen wir unten noch im Detail zurück.

Zur Lösung des Eigenwertproblems fragen wir zunächst nach den simultanen Eigenvektoren für $\mathbf{L}^2 := \vec{\mathbf{L}}^2$ und \mathbf{L}_3 . Wir gehen zunächst wieder algebraisch vor. Nehmen wir an, diese Operatoren hätten Eigenwerte α und μ . Nun ist \mathbf{L}^2 ein positiv semidefiniter Operator, so daß $\alpha \geq 0$ sein muß, denn es ist wegen der Selbstadjungiertheit der Drehimpulskomponenten \mathbf{L}_j für jeden Vektor $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | \mathbf{L}^2 | \psi \rangle = \sum_{j=1}^3 \langle \psi | \mathbf{L}_j^2 | \psi \rangle = \sum_{j=1}^3 \langle \mathbf{L}_j \psi | \mathbf{L}_j \psi \rangle \geq 0. \quad (4.1.15)$$

Aus der letzteren Form folgt auch sofort, daß

$$\langle \psi | \mathbf{L}_3^2 | \psi \rangle \leq \langle \psi | \mathbf{L}^2 | \psi \rangle \quad (4.1.16)$$

ist. Setzt man hierin den simultanen Eigenvektor für \mathbf{L}^2 und \mathbf{L} ein, folgt

$$\alpha \geq \mu^2 \geq 0 \quad (4.1.17)$$

Es ist also zu gegebenem α der Eigenwert von \mathbf{J}_3 sowohl nach oben als auch nach unten beschränkt:

$$-\sqrt{\alpha} \leq \mu \leq \sqrt{\alpha} \quad (4.1.18)$$

In Analogie zu den „Leiteroperatoren“ beim Harmonischen Oszillator führen wir die zueinander adjungierten Operatoren

$$\mathbf{L}_{\pm} = \mathbf{L}_1 \pm i\mathbf{L}_2 \quad (4.1.19)$$

ein. Aus den Kommutatorrelation (4.1.9) folgt

$$[\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_{\pm}] = i\hbar(\mathbf{L}_2 \mp i\mathbf{L}_1) = \pm\hbar\mathbf{L}_{\pm}. \quad (4.1.20)$$

Daraus ergibt sich

$$\mathbf{L}_3 \mathbf{L}_{\pm} |\alpha, \mu\rangle = ([\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_{\pm}] + \mathbf{L}_{\pm} \mathbf{L}_3) |\alpha, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar) \mathbf{L}_{\pm} |\alpha, \mu\rangle. \quad (4.1.21)$$

Dies bedeutet, daß $\mathbf{L}_{\pm} |\alpha, \mu\rangle$ entweder Eigenvektor von \mathbf{L}_3 zum Eigenwert $\mu \pm \hbar$ oder der Nullvektor ist. Sei nun $\mu_{\max} = l\hbar$ der maximale Eigenwert von \mathbf{J}_3 zu vorgegebenem α . Dann muß gelten

$$\mathbf{L}_+ |\alpha, l\hbar\rangle = 0, \quad (4.1.22)$$

4. Zentralpotentiale

denn andernfalls wäre $(l+1)\hbar$ Eigenwert von \mathbf{L}_3 , und das kann nach Voraussetzung nicht der Fall sein. Andererseits muß es auch eine natürliche Zahl k geben, so daß

$$\mathbf{L}_-^k |\alpha, l \hbar\rangle \neq 0, \quad \mathbf{L}_-^{k+1} |\alpha, l \hbar\rangle = 0. \quad (4.1.23)$$

Damit ist der minimale Eigenwert von \mathbf{L}_3 also $\mu_{\min} = (l-k)\hbar$.

Stellen wir nun einen Zusammenhang zwischen den Leiteroperatoren (4.1.19) und \mathbf{L}^2 her:

$$\mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ = (\mathbf{L}_1 - i\mathbf{L}_2)(\mathbf{L}_1 + i\mathbf{L}_2) = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + i[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] = \mathbf{L}^2 - \mathbf{L}_3^2 - \hbar \mathbf{L}_3. \quad (4.1.24)$$

Wegen (4.1.22) ist also

$$0 = \mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ |\alpha, l \hbar\rangle = [\alpha - (l^2 + l)\hbar^2] |\alpha, l \hbar\rangle. \quad (4.1.25)$$

Da $|\alpha, l \hbar\rangle \neq 0$, muß also

$$\alpha = l(l+1)\hbar^2 \quad (4.1.26)$$

sein.

Weiter gilt aber auch

$$\mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 - i[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] = \mathbf{L}^2 - \mathbf{L}_3^2 + \hbar \mathbf{L}_3. \quad (4.1.27)$$

Wegen (4.1.23) ist

$$0 = \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- |\alpha, (l-k)\hbar\rangle = [l(l+1) - (l-k)(l-k-1)]\hbar^2 |\alpha, (l-k)\hbar\rangle. \quad (4.1.28)$$

Also ist

$$(2l-k)(k+1) = 0 \Rightarrow l = \frac{k}{2}, \quad (4.1.29)$$

d.h. es muß $l \in \{0, 1/2, 1, 3/2, \dots\}$ mit $k \in \mathbb{N}$ sein, und es ist für vorgegebenes l der kleinste Eigenwert von \mathbf{L}_z

$$\mu_{\min} = (l-k)\hbar = -l\hbar. \quad (4.1.30)$$

Wir stellen also fest, daß sich allein aufgrund der Vertauschungsrelationen der $\vec{\mathbf{L}}$ untereinander (also der Drehliealgebra $so(3)$) die Eigenwerte von \mathbf{L}^2 die Werte $l(l+1)\hbar^2$ mit $l \in \{0, 1/2, 1, 3/2, \dots\}$ ergeben. Für jeden Eigenraum von \mathbf{L}^2 sind dann die simultanen Eigenwerte von \mathbf{L}_3 durch $m\hbar$ mit $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ gegeben. Wie allgemein üblich bezeichnen wir die simultanen Eigenvektoren für \mathbf{r} , \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_3 im folgenden $|r, l, m\rangle$. Es ist allerdings stets zu beachten, daß die dazugehörigen Eigenwerte beziehentlich r , $l(l+1)\hbar^2$ und $m\hbar$ sind.

Wir können also die simultanen Eigenvektoren von \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_3 mit Hilfe des „Absteigeoperators“ \mathbf{L}_- aus dem durch

$$\mathbf{L}_3 |l, m = l\rangle = \hbar l |l, m = l\rangle, \quad \mathbf{L}_+ |l, m = l\rangle = 0 \quad (4.1.31)$$

charakterisierten Eigenvektor zum größten Eigenwert von \mathbf{L}_3 für die durch l bestimmte *Darstellung der Drehgruppe* erzeugen. Es fehlt nur noch die (bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor festgelegte) Normierung. Nehmen wir also an, die simultanen Eigenvektoren $|l, m\rangle$ seien normiert,

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l'} \delta_{mm'}. \quad (4.1.32)$$

Dann gilt

$$\langle \mathbf{L}_- l, m | \mathbf{L}_- l, m \rangle = \langle l, m | \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- | l, m \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] = \hbar^2 (l+m)(l-m+1), \quad (4.1.33)$$

4.1. Der Drehimpuls

wobei wir im letzten Schritt (4.1.27) verwendet haben. Bis auf einen Phasenfaktor ist also

$$\mathbf{L}_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle, \quad (4.1.34)$$

was im übrigen auf das korrekte Resultat

$$\mathbf{L}_- |l, m = -l\rangle = 0 \quad (4.1.35)$$

führt. Wir wählen die relative Phase zwischen $|lm\rangle$ und $|l, m-1\rangle$, so daß (4.1.34) ohne weitere Phasenfaktoren gilt. Auf ähnliche Weise folgt dann

$$\mathbf{L}_+ |l, m\rangle = \hbar \exp(i\alpha_{lm}) \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle. \quad (4.1.36)$$

Den Phasenfaktor können wir nun aufgrund von (4.1.24) und der Festlegung (4.1.34) eindeutig bestimmen. Dazu wenden wir auf (4.1.36) \mathbf{L}_- an. Dann folgt

$$\mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ |l, m\rangle \stackrel{(4.1.24)}{=} \hbar^2 (l-m)(l+m+1) |l, m\rangle = \hbar^2 \exp(i\alpha_{lm}) (l-m)(l+m+1) |l, m\rangle, \quad (4.1.37)$$

d.h. $\exp(i\alpha_{lm}) = 1$ und folglich

$$\mathbf{L}_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle. \quad (4.1.38)$$

Nun wollen wir noch zeigen, daß für den Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Werte für l (und damit auch m) auftreten können. Dies rührt von der durch Orts- und Impulsoperatoren zusammengesetzten Form (4.1.2) dieses speziellen Drehimpulsoperators her. Daß in der Natur auch halbzahlige Drehimpulseigenzustände vorkommen, ist ein spezifisch quantentheoretisches Phänomen, das mit der Möglichkeit eines intrinsischen Drehimpulses (**Spin**) der Teilchen zu tun hat. Wir folgen dem Beweis für die Ganzzahligkeit der Bahndrehimpulsdarstellungen [KW71].

Dazu führen wir wie bei der Behandlung des harmonischen Oszillators „Leiteroperatoren“

$$\mathbf{a}_j = \sqrt{\frac{C}{2\hbar}} \mathbf{x}_j + \frac{i}{\sqrt{2C\hbar}} \mathbf{p}_j, \quad j \in \{1, 2\} \quad (4.1.39)$$

ein. Dabei ist $C > 0$ eine beliebige Konstante von der Dimension Masse \times Frequenz. Aus den Kommutatorrelationen für die Orts- und Impulsoperatoren (4.1.1) folgt dann durch einfaches Nachrechnen

$$[\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_j^\dagger] = \mathbb{1}, \quad [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2] = [\mathbf{a}_1^\dagger, \mathbf{a}_2] = [\mathbf{a}_2^\dagger, \mathbf{a}_1] = 0. \quad (4.1.40)$$

Wie beim eindimensionalen harmonischen Oszillator in Abschnitt 3.6 gezeigt, besitzen die selbstadjungierten Operatoren

$$\mathbf{N}_j = \mathbf{a}_j^\dagger \mathbf{a}_j, \quad j \in \{1, 2\} \quad (4.1.41)$$

die ganzzahligen Eigenwerte $0, 1, 2, \dots$. Weiter ist wegen (4.1.40)

$$[\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_2] = 0. \quad (4.1.42)$$

Nun führen wir noch einen dritten Leiteroperator ein, nämlich

$$\mathbf{B} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2), \quad \mathbf{N}_3 = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B}. \quad (4.1.43)$$

4. Zentralpotentiale

Dieser Operator erfüllt die Kommutatorregeln eines Leiteroperators,

$$[\mathbf{B}, \mathbf{B}^\dagger] = \mathbb{1}. \quad (4.1.44)$$

Unter Verwendung der Definitionen (4.1.39) zeigt man durch unmittelbares Nachrechnen, daß

$$\mathbf{L}_z = \mathbf{x}_1 \mathbf{p}_2 - \mathbf{x}_2 \mathbf{p}_1 = \hbar(\mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2 - 2\mathbf{N}_3) \quad \text{und} \quad [\mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2, \mathbf{N}_3] = 0. \quad (4.1.45)$$

Wegen (4.1.42) besitzt $\mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2$ wie die \mathbf{N}_1 und \mathbf{N}_2 die Eigenwerte $0, 1, 2, \dots$, denn es gibt eine vollständige gemeinsame Basis von Eigenvektoren zu \mathbf{N}_1 und \mathbf{N}_2 . Nun kommutiert zwar \mathbf{N}_3 nicht einzeln mit \mathbf{N}_1 und \mathbf{N}_2 , aber gemäß (4.1.44) mit $\mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2$, so daß es also auch eine gemeinsame vollständige Basis von Eigenvektoren zu $\mathbf{N}_1 + \mathbf{N}_2$ und \mathbf{N}_3 gibt. Dies ist dann aber gemäß auch eine Eigenbasis zu \mathbf{L}_z/\hbar , und auch dieser Operator besitzt demnach nur Eigenwerte $\in \{0, 1, \dots\}$. Dies bedeutet, daß \mathbf{L}_z nur Eigenwerte $\hbar m$ mit $m \in \{0, 1, 2, \dots\}$ und nicht mit halbzahligen m besitzen kann. Da nun für die irreduzible Darstellung eines beliebigen Satzes von Drehimpulsoperatoren zur Bahndrehimpulsbezugsquantenzahl l die Werte $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ liegen, kann also für den speziellen Fall des Bahndrehimpulses l nicht halbzahlig sein, da ggf. m nur halbzahlige Werte annehmen könnte. Folglich kann es keine irreduzible Darstellung des Bahndrehimpulses mit halbzahligem l geben und folglich muß also l ganzzahlig sein.

Als nächstes bestimmen wir die Bahndrehimpulseigenzustände $|l, m\rangle$ in der Ortsdarstellung. Dazu bietet sich eine Formulierung in Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) an. Verwenden wir wieder den Impulsoperator in Ortsdarstellung (2.4.4), ergibt sich für den Bahndrehimpulsoperator, angewandt auf eine beliebige Wellenfunktion $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$ und benutzen die bekannte Darstellung des Gradienten in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{L}} &= \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(r, \vartheta, \varphi) \\ &= \frac{\hbar}{i} r \vec{e}_r \times \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(-\vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \psi(r, \vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (4.1.46)$$

Damit folgt für die kartesischen Komponenten ¹

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_1 \psi &= \vec{e}_1 \vec{\mathbf{L}} \psi = \frac{\hbar}{i} \left(-\cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \psi, \\ \mathbf{L}_2 \psi &= \vec{e}_2 \vec{\mathbf{L}} \psi = \frac{\hbar}{i} \left(-\cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \psi, \\ \mathbf{L}_3 \psi &= \vec{e}_3 \vec{\mathbf{L}} \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi. \end{aligned} \quad (4.1.47)$$

Die Leiteroperatoren (4.1.19) sind also durch

$$\mathbf{L}_\pm \psi = \hbar \exp(\pm i\varphi) \left(i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \psi \quad (4.1.48)$$

gegeben.

¹Wir lassen im folgenden die Argumente von ψ der Kürze halber weg.

4.1. Der Drehimpuls

Zur Berechnung von \mathbf{L}^2 empfiehlt sich zunächst die Rückkehr zu kartesischen Koordinaten:

$$\mathbf{L}^2\psi = -\hbar^2 \left(\vec{x} \times \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \left(\vec{x} \times \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \psi. \quad (4.1.49)$$

Schreibt man dies mit Hilfe der Levi-Civita-Symbole um, erhält man schließlich

$$\mathbf{L}^2\psi = -\hbar^2 \left[r^2 \Delta \psi - \vec{x} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} - \vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\vec{x} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} \right) \right]. \quad (4.1.50)$$

Anwendung des Laplace- und Gradientenoperators in Kugelkoordinaten liefert dann schließlich

$$\mathbf{L}^2\psi = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (4.1.51)$$

Wir können uns nun der Bestimmung der Eigenfunktionen von \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_3 zuwenden. Wir müssen dazu, Dank unserer algebraischen Betrachtungen, allerdings nicht das simultane Eigenwertproblem für \mathbf{L}_3 und \mathbf{L}^2 mit Hilfe der Differentialoperatoren (4.1.47) und (4.1.51) lösen, wie es in den meisten Lehrbüchern der Quantentheorie durchgeführt wird.

Nun können wir die simultanen Eigenvektoren $|l, m\rangle$ in der Ortsdarstellung gewinnen, indem wir gemäß (4.1.31) zunächst den Zustand $|l, l\rangle$ und dann durch sukzessive Anwendung von (4.1.34) die übrigen berechnen. Es ist klar, daß die entsprechenden Wellenfunktionen die Gestalt

$$\psi_{lm}(r) := \langle \vec{x} | r, l, m \rangle = R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (4.1.52)$$

besitzen werden. Durch die Bestimmung der simultanen Eigenvektoren von \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_3 werden die *Kugelflächenfunktionen* Y_{lm} bestimmt, die sich wieder in eine reine Funktion von ϑ und eine von φ faktorisieren. Die Drehimpulsoperatoren wirken nur auf ϑ und φ , nicht auf r , so daß wir im folgenden den Faktor R_{lm} außer acht lassen können. Dieser bestimmt sich dann durch Festlegung einer weiteren zu \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_3 Observablen, z.B. der Energie in einem Zentralkraftproblem.

Beginnen wir also mit der Bestimmung der Kugelflächenfunktionen zu vorgegebenem $l \in \mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. Betrachten wir zunächst das Eigenwertproblem von \mathbf{L}_3 zum Eigenwert $m\hbar$:

$$\mathbf{L}_3 Y_{lm} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} \stackrel{!}{=} \hbar m Y_{lm}. \quad (4.1.53)$$

Die eindeutige Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{lm}(\vartheta) \exp(im\varphi). \quad (4.1.54)$$

Wir können uns nun von der Ganzzahligkeit des Operators \mathbf{L}_3 auch in der Ortsdarstellung überzeugen. Wenn nämlich \mathbf{L}_3 selbstadjungiert sein sollen, müssen dessen Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal aufeinander sein. Für $m = 0$ ist die Eigenfunktion gemäß (4.1.54) $\Phi_{m=0}(\varphi) = \text{const}$, und das ist eine $L^2([0, 2\pi])$ -Funktion, so daß tatsächlich 0 ein Eigenwert von \mathbf{L}_3 ist. Sei weiter $m \neq 0$. Aus der Orthogonalitätsbedingung für Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten folgt

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) = -\frac{i}{m} [\exp(2\pi mi) - 1] \stackrel{!}{=} 0, \quad (4.1.55)$$

und daraus folgt $m \in \mathbb{N}$.

4. Zentralpotentiale

Zur Bestimmung der Θ_{lm} verwenden wir zunächst die zweite Gleichung in (4.1.31) und die Darstellung des Leiteroperators L_+ in der Ortsdarstellung gemäß (4.1.48), um die Y_{ll} zu bestimmen:

$$L_+ Y_{ll} = \hbar \exp(i\varphi) \left(i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \Theta_{ll}(\vartheta) \exp(il\varphi) \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.1.56)$$

Ausführung der Ableitungen führt auf die Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\vartheta} \Theta_{ll} = l \cot \vartheta \Theta_{ll}. \quad (4.1.57)$$

Durch „Trennung“ der Variablen findet sich sofort die eindeutige Lösung

$$\Theta_{ll}(\vartheta) = c_{ll} \sin^l \vartheta. \quad (4.1.58)$$

Zur Bestimmung der Normierungskonstanten bemerken wir, daß das Skalarprodukt in der Ortsdarstellung, ausgedrückt in Kugelkoordinaten

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int d^3 \vec{x} \psi_1^*(\vec{x}) \psi_2(\vec{x}) = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \vartheta \psi_1^*(r, \vartheta, \varphi) \psi_2(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.1.59)$$

lautet. Es ist daher bequem, die Kugelflächenfunktionen gemäß

$$\int_0^\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \vartheta |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 = 1 \quad (4.1.60)$$

zu normieren. Für Y_{ll} bedeutet das

$$2\pi |c_{ll}|^2 \int_0^\vartheta d\vartheta \sin^{2l+1} \vartheta \stackrel{!}{=} 1. \quad (4.1.61)$$

Zur Berechnung des Integrals substituieren wir $u = \cos \vartheta$, $du = -\sin \vartheta d\vartheta$:

$$J_l = \int_0^\vartheta d\vartheta \sin^{2l+1} \vartheta = \int_{-1}^1 du (1-u^2)^l. \quad (4.1.62)$$

Dafür können wir für $l \geq 1$ eine Rekursionsformel herleiten:

$$J_l = \int_{-1}^1 du [(1-u^2)^{l-1} + \frac{u}{2l} \frac{d}{du} (1-u^2)^l] = J_{l-1} - \frac{1}{2l} J_l. \quad (4.1.63)$$

Dies ergibt schließlich zusammen mit $J_0 = 2$

$$J_l = \frac{2l}{2l+1} J_{l-1} = 2 \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!}, \quad (4.1.64)$$

wobei die Doppelfakultäten durch

$$(2l)!! = 2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2l), \quad (2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1) \quad (4.1.65)$$

4.1. Der Drehimpuls

definiert sind. Sie lassen sich wie folgt durch gewöhnliche Fakultäten ausdrücken:

$$(2l)!! = 2^l l!, \quad (2l+1)!! = \frac{(2l+1)!}{(2l)!!} = \frac{(2l+1)!}{2^l l!}. \quad (4.1.66)$$

Schließlich erhalten wir also (bis auf einen unerheblichen Phasenfaktor)²

$$c_{ll} = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi} \frac{(-1)^l}{2^l l!}} \quad (4.1.67)$$

$$Y_{ll}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi} \frac{(-1)^l}{2^l l!}} \sin^l \vartheta \exp(i l \varphi).$$

Für das folgende ist es bequem, die Variablensubstitution $u = \cos \vartheta$ zu verwenden. Der für uns relevante Operator L_- läßt sich dann in der Gestalt

$$L_- \psi = \hbar \exp(-i\varphi) \left(i \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sqrt{1-u^2} \frac{\partial}{\partial u} \right) \psi \quad (4.1.68)$$

schreiben. Insbesondere gilt für Y_{lm} gemäß (4.1.53)

$$\begin{aligned} L_- Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= L_- U_{lm}(u) \exp(im\varphi) \\ &= \hbar \exp[i(m-1)\varphi] \left[-\frac{mu}{\sqrt{1-u^2}} U_{lm}(u) + \sqrt{1-u^2} U'_{lm}(u) \right], \end{aligned} \quad (4.1.69)$$

wobei wir $\Theta_{lm}(\vartheta) = U_{lm}(\cos \vartheta)$ gesetzt haben. Dies läßt sich nun zu

$$L_- Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar \exp[i(m-1)\varphi] \frac{1}{\sqrt{1-u^2}^{m-1}} \frac{d}{du} \left[\sqrt{1-u^2}^m U_{lm}(u) \right]. \quad (4.1.70)$$

Gemäß (4.1.34) folgt daraus

$$\sqrt{(l+m)(l-m+1)} U_{l,(m-1)}(u) = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}^{m-1}} \frac{d}{du} \left[\sqrt{1-u^2}^m U_{lm}(u) \right]. \quad (4.1.71)$$

Wegen (4.1.58) ist

$$U_{ll}(u) = c_{ll} \sqrt{1-u^2}^l \quad (4.1.72)$$

Daraus ergibt sich durch Iteration sofort die Formel

$$U_{lm}(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{\sqrt{1-u^2}^m} \frac{d^{l-m}}{du^{l-m}} (1-u^2)^l, \quad (4.1.73)$$

die man formal auch sofort mit der Rekursionsformel (4.1.71) durch vollständige Induktion beweist: In der Tat ist die Formel für $m = l$ korrekt. Nehmen wir nun an, sie gelte für irgendein $-l \leq m \leq l$. Dann ist wegen (4.1.71)

$$\begin{aligned} U_{l,m-1}(u) &= \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \\ &\quad \times \frac{1}{\sqrt{1-u^2}^{m-1}} \frac{d^{l-m+1}}{du^{l-m+1}} (1-u^2)^l, \end{aligned} \quad (4.1.74)$$

²Wir folgen der Phasenkvention von [Fic79].

4. Zentralpotentiale

und das entspricht gerade (4.1.73) für $m \rightarrow m - 1$. Für $m > l$ ist (4.1.73) definitionsgemäß 0, da man das Inverse von Fakultäten negativer ganzzahliger Argumente zu 0 definiert. Für $m < -l$ verschwindet die $l - m > 2l$ -te Ableitung des Polynoms vom Grade $2l$.

Die Kugelflächenfunktionen sind nunmehr also vollständig bestimmt:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = U_{lm}(\cos \vartheta) \exp(im\varphi). \quad (4.1.75)$$

Die entsprechenden Orthonormalitätseigenschaften sind

$$\langle l_1 m_1 | l_2 m_2 \rangle = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \vartheta Y_{l_1 m_1}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\vartheta, \varphi) = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}. \quad (4.1.76)$$

Daraus folgt für $m_1 = m_2 = m^3$:

$$\int_{-1}^1 du U_{l_1 m}(u) U_{l_2 m}(u) = \frac{1}{2\pi} \delta_{l_1 l_2}. \quad (4.1.77)$$

Für $m = -l$ können wir (4.1.73) sofort auswerten, da dann gilt

$$\frac{d^{2l}}{du^{2l}} (1 - u^2)^l = \frac{d^{2l}}{du^{2l}} (-u^2)^l = (-1)^l (2l)! \quad (4.1.78)$$

Mit (4.1.73) folgt daraus

$$U_{l, -l}(u) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sqrt{1-u^2}^l = (-1)^l U_{ll}(u). \quad (4.1.79)$$

Nun können wir gemäß (4.1.38) die Funktionen Y_{lm} auch durch fortgesetzte Anwendung von L_+ aus $Y_{l, -l}$ erhalten. Aus (4.1.48) folgt

$$L_+ Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = -\hbar \exp[i(m+1)\varphi] \sqrt{1-u^2}^{m+1} \frac{d}{du} \left[\frac{U_{lm}(u)}{\sqrt{1-u^2}^m} \right]. \quad (4.1.80)$$

Das heißt mit (4.1.38) folgt

$$U_{l, m+1}(u) = -\sqrt{\frac{1}{(l-m)(l+m+1)}} \sqrt{1-u^2}^{m+1} \frac{d}{du} \left[\frac{U_{lm}(u)}{\sqrt{1-u^2}^m} \right]. \quad (4.1.81)$$

Durch Iteration dieser Gleichung beginnend mit $m = -l$ erhält man unter Verwendung von (4.1.79) den allgemeinen Zusammenhang

$$U_{l, -m}(u) = (-1)^m U_{lm}(u) \quad (4.1.82)$$

oder wegen (4.1.75)

$$Y_{l, -m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi). \quad (4.1.83)$$

Verwenden wir (4.1.73), folgt aus (4.1.82) sofort die alternative Darstellung der U_{lm} , die man freilich auch direkt aus (4.1.80) durch Iteration, beginnend mit $l = -m$ findet,

$$U_{lm}(u) = (-1)^m U_{l, -m}(u) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sqrt{1-u^2}^m \frac{d^{l+m}}{du^{l+m}} (1-u^2)^l. \quad (4.1.84)$$

³Man beachte, daß in unserer Konvention die U_{lm} rein reelle Funktionen sind

4.2. Das Wasserstoffatom

Weiter ergibt sich der folgende Zusammenhang unserer Kugelflächenfunktionen mit den *Legendre-Polynomen*. Für $m = 0$ ist

$$U_{l,m=0}(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l}{du^l} (1-u^2)^l := \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(u). \quad (4.1.85)$$

Dabei sind die Legendreschen Polynome durch

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (4.1.86)$$

definiert. Aus der Orthonormiertheit der Kugelflächenfunktionen folgt sofort, daß die P_l ein Orthonormalsystem des Hilbertraums $L^2([-1, 1])$ bilden. Da die Kugelflächenfunktionen orthonormiert sind, gilt entsprechend für die Legendrepolynome

$$\int_{-1}^1 du P_{l_1}(u) P_{l_2}(u) = \frac{2}{2l_1+1} \delta_{l_1 l_2}. \quad (4.1.87)$$

Die *zugeordneten Legendre-Funktionen* ergeben sich dann für $0 \leq m \leq l$ durch Differentiation der Legendrepolynome gemäß (4.1.84) zu

$$P_{lm}(x) = (-1)^m \sqrt{1-x^2}^m \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad (4.1.88)$$

und für negative m aus der Beziehung

$$P_{l,-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{lm}(x). \quad (4.1.89)$$

Für die U_{lm} gilt dann allgemein

$$U_{lm}(u) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(u). \quad (4.1.90)$$

Aus (4.1.77) ergibt sich dann die (4.1.87) Orthogonalitätsbeziehung

$$\int_{-1}^1 dx P_{l_1 m}(x) P_{l_2 m}(x) = \frac{2}{2l_1+1} \frac{(l_1+m)!}{(l_1-m)!} \delta_{l_1 l_2}. \quad (4.1.91)$$

4.2 Das Wasserstoffatom

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der einfachsten (nichtrelativistischen) Behandlung des **Wasserstoffatoms** als einem der wenigen physikalisch interessanten analytisch lösbaren Energieeigenwertproblem.

4.2.1 Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

Wir betrachten die gemeinsame Bewegung eines Elektrons und eines Atomkerns mit der Kernladungszahl Z , die wir hier beide zu spinlosen geladenen Punktteilchen vereinfachen. Für die Wechselwirkung nehmen wir ein einfaches Coulombpotential an, vernachlässigen also auch die Retardierung der Wechselwirkung, welche allerdings auch ein relativistischer Effekt ist. Wir kommen auf die Rechtfertigung dieser Annahme weiter unten noch kurz zurück. Bezeichnen wir die Observablen des Elektrons mit dem Index 1, die des Kerns mit Index 2, so ergibt sich der Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}_{12} = \frac{\vec{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2|). \quad (4.2.1)$$

Für unser Coulombproblem ist

$$V(|\vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2|) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2|}, \quad (4.2.2)$$

wobei wir uns der **SI-Einheiten** für die elektromagnetischen Größen bedient haben. Es ist klar, daß die Orts- und Impulsoperatoren für die verschiedenen Teilchen miteinander vertauschen. Insgesamt haben wir also die folgende Operatorenalgebra vorliegen

$$[\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{x}_{i'j'}] = [\mathbf{p}_{ij}, \mathbf{p}_{i'j'}] = 0, \quad [\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{p}_{i'j'}] = i\hbar\delta_{ii'}\delta_{jj'}. \quad (4.2.3)$$

Dabei bezieht sich der erste Index $i, i' \in \{1, 2\}$ auf das Teilchen, während der zweite $j, j' \in \{1, 2, 3\}$ die Orts- bzw. Impulskomponenten durchnumeriert.

In Analogie zum klassischen Fall erwarten wir, daß der **Gesamt- bzw. Schwerpunktsimpuls**

$$\vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{p}}_1 + \vec{\mathbf{p}}_2 \quad (4.2.4)$$

mit \mathbf{H} kommutiert, also eine **Erhaltungsgröße** ist. Um dies zu zeigen, führen wir als übrige unabhängige Variablen noch Schwerpunkts- und Relativkoordinaten sowie den Relativimpuls ein:

$$\vec{\mathbf{X}} = \frac{m_1\vec{\mathbf{x}}_1 + m_2\vec{\mathbf{x}}_2}{M}, \quad \vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2, \quad \vec{\mathbf{p}} = \frac{m_2\vec{\mathbf{p}}_1 - m_1\vec{\mathbf{p}}_2}{M}. \quad (4.2.5)$$

Dabei ist $M = m_1 + m_2$. Die Einteilchenimpulsoperatoren ergeben sich umgekehrt nach einigen einfachen algebraischen Umformungen zu

$$\vec{\mathbf{p}}_1 = \frac{m_1}{M}\vec{\mathbf{P}} + \vec{\mathbf{p}}, \quad \vec{\mathbf{p}}_2 = \frac{m_2}{M}\vec{\mathbf{P}} - \vec{\mathbf{p}}. \quad (4.2.6)$$

Dies in den Hamiltonoperator (4.2.1) eingesetzt führt schließlich auf

$$\mathbf{H}_{12} = \frac{1}{2M}\vec{\mathbf{P}}^2 + \frac{1}{2\mu}\vec{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{m_1m_2}{M}, \quad \mathbf{r} = |\vec{\mathbf{x}}|. \quad (4.2.7)$$

Weiter läßt sich aus den Kommutatorrelationen (4.2.3) sofort nachrechnen, daß

$$[\mathbf{P}_j, \mathbf{p}_k] = [\mathbf{P}_j, \mathbf{x}_j] = 0, \quad (4.2.8)$$

4.2. Das Wasserstoffatom

Als vollständigen Satz kommutierender Observabler können wir also die drei Schwerpunktsimpulskomponenten $\vec{\mathbf{P}}$, den Hamiltonoperator der Relativbewegung

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2\mu} \vec{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (4.2.9)$$

das Relativbahndrehimpulsbetragsquadrat $\vec{\mathbf{L}}^2 = (\vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{p}})^2$ und dessen z-Komponente \mathbf{L}_z verwenden. Da weiter diese drei auf die Relativbewegung bezogenen Observablen auch mit dem Hamiltonoperator der freien Schwerpunktsbewegung, also

$$\mathbf{T}_{\text{cm}} = \frac{1}{2M} \vec{\mathbf{P}}^2, \quad (4.2.10)$$

kann man die Energieeigenfunktionen separieren gemäß

$$|\vec{\mathbf{P}}, E, l, m\rangle = |\vec{\mathbf{P}}\rangle \otimes |E, l, m\rangle. \quad (4.2.11)$$

Das Eigenwertproblem für $\vec{\mathbf{P}}$ entspricht einfach der Impulseigenbasis, welche gleichzeitig die Energieeigenbasis des freien Teilchens bildet, also der Schwerpunktsbewegung des Zweiteilchensystems als ganzem.

Die Relativbewegung entspricht der Bewegung eines Teilchen mit der **reduzierten Masse** μ im Zentralpotential $V(\mathbf{r})$. Wir betrachten nun den Fall „wasserstoffartiger“ Systeme, wo dieses Potential durch ein **attraktives Coulombpotential** gegeben ist:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (4.2.12)$$

wobei wir uns einen Kern der Ladungszahl Z vorstellen, um den sich ein Elektron bewegt. Bequemer als die hier verwendeten SI-Einheiten ist die Einführung der dimensionslosen **Sommerfeldschen Feinstrukturkonstante**, die durch

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137.036} \quad (4.2.13)$$

gegeben ist⁴. Auf die physikalische Bedeutung dieser dimensionslosen Konstanten kommen wir später noch zu sprechen.

Es bleibt uns also, das simultane Eigenwertproblem für drei Observablen der Relativbewegung zu lösen, dessen Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2\mu} \vec{\mathbf{p}}^2 - \frac{Z\alpha \hbar c}{r} \quad (4.2.14)$$

lautet. Es ist nun am bequemsten, in der Ortsdarstellung weiterzuarbeiten. Die natürliche Wahl sind weiter aufgrund der Rotationssymmetrie Kugelkoordinaten. Wir suchen also die simultanen Eigenfunktionen der Operatoren \mathbf{H}_{rel} , $\vec{\mathbf{L}}^2$ und \mathbf{L}_z . Dazu schreiben wir zunächst die zeitunabhängige Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten an

$$\mathbf{H}\psi(\vec{\mathbf{x}}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta\psi(\vec{\mathbf{x}}) - \frac{Z\alpha \hbar c}{r} \psi(\vec{\mathbf{x}}) = E\psi(\vec{\mathbf{x}}). \quad (4.2.15)$$

⁴In SI-Einheiten gilt: $e \simeq 1.602 \cdot 10^{-19}$ C, $\hbar c \simeq 3.162 \cdot 10^{-26}$ J m, $\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) \simeq 8.854 \cdot 10^{-12}$ C²/(J m). Alle Größen sind nach [A⁺08] auf die angegebene Stelle gerundet angegeben.

4. Zentralpotentiale

Drücken wir den Laplaceoperator nun in Kugelkoordinaten aus und vergleichen mit (4.1.51), können wir diese Gleichung in die Form

$$\mathbf{H}\psi(r, \vartheta, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r, \vartheta, \varphi)}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} \psi(r, \vartheta, \varphi) - \frac{Ze^2}{4\pi r} \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.2.16)$$

$$\stackrel{!}{=} E\psi(r, \vartheta, \varphi)$$

bringen. Das simultane Eigenwertproblem für $\vec{\mathbf{L}}^2 := \mathbf{L}^2$ und \mathbf{L}_z haben wir in Abschnitt 4.1 gelöst. Demnach muß sich die simultane Eigenfunktion für \mathbf{H} , \mathbf{L}^2 und \mathbf{L}_z in der Form

$$\psi_{Elm}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{El}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (4.2.17)$$

schreiben lassen. Dabei sind die Y_{lm} die in Abschnitt 4.1 ausführlich besprochenen Kugelflächenfunktionen (s. auch [CH10]). Wegen

$$\mathbf{L}^2 \psi_{El}(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{El}(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.2.18)$$

ergibt sich für die Radialwellenfunktion die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} R''_{El}(r) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Z\alpha\hbar c}{r} \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r). \quad (4.2.19)$$

Diese Gleichung ist offenbar die Schrödingergleichung für die eindimensionale Bewegung im effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}. \quad (4.2.20)$$

Allerdings ist hierbei zu beachten, daß r auf $r \geq 0$ eingeschränkt ist, und wir müssen daher zunächst Randbedingungen für die Radialwellenfunktion bei $r = 0$ finden. Dabei gilt es sicherzustellen, daß der Differentialoperator auf der linken Seite von (4.2.19) selbstadjungiert ist bzgl. des entsprechenden Skalarproduktes. Letzteres ergibt sich daraus, daß die Gesamtwellenfunktion (4.2.17) im $L^2(\mathbb{R}^3)$ liegt. Das Skalarprodukt für die Radialwellenfunktionen ist also

$$\langle R_1 | R_2 \rangle = \int_0^\infty dr R_1^*(r) R_2(r). \quad (4.2.21)$$

damit der Differentialoperator $(d/dr)^2$ selbstadjungiert ist, muß offenbar für alle Radialwellenfunktionen die Randbedingung

$$R(0) = 0 \quad (4.2.22)$$

gefordert werden.

Wir wollen nun die verbliebene Radialgleichung (4.2.19) lösen und beschränken uns in diesem Kapitel auf die **gebundenen Zustände**. Da das effektive Potential (4.2.20) für $r \rightarrow 0^+$ nach $+\infty$ divergiert und für $r \rightarrow \infty$ gegen 0 strebt, erwarten wir gebundene Zustände für $E \leq 0$ (vgl. Abb. 4.1). Wir suchen also Lösungen für $E < 0$. Dazu führen wir zunächst die Wellenzahl

$$k = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} \quad (4.2.23)$$

4.2. Das Wasserstoffatom

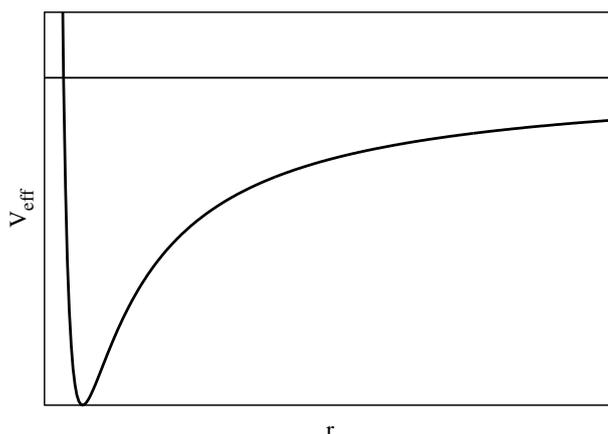


Abbildung 4.1: Das effektive Radialpotential (4.2.20) für das Coulombproblem.

und die dimensionslose Radialkoordinate

$$\xi = 2kr \quad (4.2.24)$$

ein. Setzen wir dann $R_{El}(r) = \chi_l(\xi)$ ergibt sich nach einigen einfachen Umformungen die Radialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{1}{4} + \frac{n}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right) \chi_l(\xi) = 0 \quad \text{mit} \quad n = Z\alpha \sqrt{-\frac{\mu c^2}{2E}}. \quad (4.2.25)$$

Um diese Gleichung zu lösen, befassen wir uns zunächst mit den **Laguerre-Polynomen**, die eng mit den Wellenfunktionen χ_l zusammenhängen, wie wir gleich sehen werden.

4.2.2 Laguerre-Polynome

Die **Laguerre-Polynome** sind ein System orthogonaler Polynome im Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}_{\geq 0}, \exp(-x))$, auf dem das Skalarprodukt für zwei Funktionen $f, g : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{C}$ durch

$$\langle f | g \rangle_L = \int_0^\infty dx \exp(-x) f^*(x) g(x) \quad (4.2.26)$$

definiert ist.

Wir führen die Laguerre-Polynome als Lösungen der **Laguerreschen Differentialgleichung**

$$-xy'' - (1-x)y' = ky \quad (4.2.27)$$

ein. Dies können wir als **Eigenwertproblem** des Differentialoperators

$$Lf(x) = -x \frac{d^2}{dx^2} f(x) - (1-x) \frac{d}{dx} f(x) = -\exp x \frac{d}{dx} \left[x \exp(-x) \frac{d}{dx} f(x) \right]. \quad (4.2.28)$$

lesen. Wir weisen nach, daß dieser Operator bzgl. des Skalarprodukts (4.2.26) **selbstadjungiert** ist.

4. Zentralpotentiale

Durch zweimalige partielle Integration folgt nämlich für $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R}_{\geq 0})$

$$\begin{aligned} \langle f | \mathbf{L}g \rangle_L &= \int_0^\infty dx \exp(-x) f^*(x) \left\{ -\exp x \frac{d}{dx} \left[x \exp(-x) \frac{d}{dx} g(x) \right] \right\} \\ &= \int_0^\infty dx \left[\frac{d}{dx} f^*(x) \right] x \exp(-x) \frac{d}{dx} g(x) \\ &= \int_0^\infty dx \exp(-x) \left\{ -\exp x \frac{d}{dx} \left[x \exp(-x) \frac{d}{dx} f(x) \right] \right\}^* g(x) = \langle \mathbf{L}f | g \rangle_L. \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

Da der Raum $C_0^\infty(\mathbb{R}_{\geq 0})$ der beliebig oft differenzierbaren Funktionen, die schneller fallen als jede Potenz, dicht in $L^2(\mathbb{R}_{\geq 0}, \exp(-x))$ liegt, ist der Operator (4.2.28) tatsächlich selbstadjungiert.

Folglich sind die Eigenwerte dieses Operators reell und die dazugehörigen Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten zueinander orthogonal. Seien nämlich u_k diese Eigenfunktionen, so gilt wegen der Selbstadjungiertheit von \mathbf{L}

$$\langle u_k | \mathbf{L}u_k \rangle = \langle u_k | k u_k \rangle = k \|u_k\|^2 = \langle \mathbf{L}u_k | u_k \rangle = \langle k u_k | u_k \rangle = k^* \|u_k\|^2, \quad (4.2.30)$$

so daß wegen $\|u_k\| \neq 0$ auf $k = k^*$ (d.h. $k \in \mathbb{R}$) geschlossen werden darf. Weiter gilt

$$\langle u_k | \mathbf{L}u_l \rangle = \langle u_k | l u_l \rangle = l \langle u_k | u_l \rangle = \langle \mathbf{L}u_k | u_l \rangle = \langle k u_k | u_l \rangle = k \langle u_k | u_l \rangle \quad (4.2.31)$$

bzw.

$$(k - l) \langle u_k | u_l \rangle = 0. \quad (4.2.32)$$

Falls $k \neq l$ ist, muß also $\langle u_k | u_l \rangle = 0$ sein, d.h. u_k und u_l sind für $k \neq l$ zueinander orthogonal.

Wir zeigen nun, daß die Eigenwerte von \mathbf{L} durch die ganzen nichtnegativen Zahlen gegeben und die Eigenfunktionen Polynome sind. Setzen wir einen verallgemeinerten Potenzreihenansatz

$$y(x) = x^\lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (4.2.33)$$

in die Eigenwertgleichung (4.2.27) ein, folgt nach Sortieren der Potenzen von x durch Koeffizientenvergleich die Rekursionsformel

$$a_{n+1} = \frac{n-k}{(n+1)^2} a_n. \quad (4.2.34)$$

Bricht diese Reihe nicht ab, ergibt sich für $n \gg k$:

$$a_{n+1} \underset{n \gg k}{\cong} \frac{1}{n+1} a_n, \quad (4.2.35)$$

so daß für $x \rightarrow \infty$ das asymptotische Verhalten durch

$$y(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\cong} \exp x \quad (4.2.36)$$

gegeben ist. Damit wäre aber $y \notin L^2(\mathbb{R}_{\geq 0}, \exp(-x))$, scheidet also als Eigenfunktion aus. Wir müssen demnach durch geeignete Wahl von k dafür sorgen, daß die Reihe abbricht, d.h. für

$$k \in \mathbb{N}_0. \quad (4.2.37)$$

4.2. Das Wasserstoffatom

Die dazugehörige Eigenfunktion u_k des Differentialoperators L ist dann ein Polynom vom Grade k . Wir können es mit (4.2.34) explizit ausrechnen, wobei wir noch die Normierung durch Wahl von a_0 festlegen müssen. In der Physik ist die Wahl $a_0 = k!$ üblich. Damit sind die **Laguerre-Polynome** durch

$$L_k(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \binom{k}{n} \frac{k!}{n!} x^n \quad (4.2.38)$$

gegeben.

Mit Hilfe der **Leibnizschen Produktformel**

$$\frac{d^n}{dx^n} [f(x)g(x)] = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left[\frac{d^k f(x)}{dx^k} \right] \left[\frac{d^{n-k} g(x)}{dx^{n-k}} \right], \quad (4.2.39)$$

findet man weiter

$$\frac{d^k}{dx^k} [x^k \exp(-x)] = \exp(-x) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \binom{k}{n} \frac{k!}{n!} x^n, \quad (4.2.40)$$

so daß die **Rodrigues-Formel** für die Laguerre-Polynome

$$L_k(x) = (\exp x) \frac{d^k}{dx^k} [x^k \exp(-x)] \quad (4.2.41)$$

lautet.

Mit ihrer Hilfe folgt für die Normierung der Laguerrepolynome

$$\langle L_k | L_k \rangle_L = \int_0^{\infty} dx \exp x \left\{ \frac{d^k}{dx^k} [x^k \exp(-x)] \right\}^2. \quad (4.2.42)$$

Wir können dieses Integral k -mal partiell integrieren. Denken wir uns jeweils die dabei auftretenden Ableitungen nach der Leibnizschen Produktregel ausgeführt, sehen wir, daß insgesamt jeweils ein Ausdruck der Form $P(x) \exp(-x)$ übrigbleibt, wobei $P(x)$ ein Polynom mit $P(0) = 0$ ist. Die vom Integral freien Terme verschwinden also jedesmal, so daß insgesamt

$$\begin{aligned} \langle L_k | L_k \rangle &= \int_0^{\infty} dx x^k \exp(-x) (-1)^k \frac{d}{dx} \left\{ \exp x \frac{d^k}{dx^k} [x^k \exp(-x)] \right\} \\ &= \int_0^{\infty} dx x^k \exp(-x) (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_k(x) \end{aligned} \quad (4.2.43)$$

entsteht. Die Ableitung des Laguerrepolynoms ergibt sich leicht aus der expliziten Darstellung (4.2.38), wobei wir nur den Term für $n = k$ berücksichtigen müssen:

$$\frac{d^k}{dx^k} L_k(x) = (-1)^k k! \quad (4.2.44)$$

Dies liefert insgesamt

$$\langle L_k | L_k \rangle = k! \int_0^{\infty} dx x^k \exp(-x) = (k!)^2. \quad (4.2.45)$$

Dabei haben wir das Integral mit Hilfe der partiellen Integration ausgewertet. Es gilt nämlich

$$I_k := \int_0^{\infty} x^k \exp(-x) = \int_0^{\infty} k x^{k-1} \exp(-x) = k I_{k-1}. \quad (4.2.46)$$

4. Zentralpotentiale

Zusammen mit

$$I_0 = \int_0^{\infty} \exp(-x) = -\exp(-x) \Big|_0^{\infty} = 1 \quad (4.2.47)$$

liefert dies vermittels vollständiger Induktion in der Tat

$$I_k = k! \quad (4.2.48)$$

Damit bilden wegen (4.2.45) die Funktionen

$$\tilde{L}(x) = \frac{1}{k!} L_k(x) \quad (4.2.49)$$

ein VONS auf $L^2(\mathbb{R}_{\geq 0}, \exp(-x))$. Oft werden auch diese Polynome als die Laguerre-Polynome definiert⁵.

Eine Rekursionsformel für die Laguerrepolynome erhalten wir mit Hilfe der Rodriguesformel (4.2.41), indem wir eine Ableitung mittels Produktregel ausführen:

$$\begin{aligned} L_{k+1}(x) &= \exp x \frac{d^{k+1}}{dx^{k+1}} [x^{k+1} \exp(-x)] \\ &= \exp x \frac{d^k}{dx^k} [(k+1)x^k \exp(-x) - x^{k+1} \exp(-x)] \\ &= (k+1)L_k(x) - \exp x \frac{d^k}{dx^k} [x^{k+1} \exp(-x)]. \end{aligned} \quad (4.2.50)$$

Im letzten Term auf der rechten Seite verwenden wir die Leibnizsche Produktformel

$$\frac{d^k}{dx^k} [x^{k+1} \exp(-x)] = \frac{d^k}{dx^k} [x \cdot x^k \exp(-x)] = x \frac{d^k}{dx^k} [x^k \exp(-x)] + k \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} [x^k \exp(-x)]. \quad (4.2.51)$$

Dies in (4.2.50) eingesetzt ergibt

$$L_{k+1} = (k+1-x)L_k(x) - k \exp x \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} [x^k \exp(-x)]. \quad (4.2.52)$$

Für den zweiten Term auf der rechten Seite verwenden wir (4.2.50) für L_k :

$$\begin{aligned} L_k(x) &= kL_{k-1}(x) - \exp x \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} [x^k \exp(-x)] \Rightarrow \\ & - \exp x \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} [x^k \exp(-x)] = L_k(x) - kL_{k-1}(x). \end{aligned} \quad (4.2.53)$$

Dies wiederum in (4.2.52) substituiert liefert schließlich die gesuchte Rekursionsformel

$$L_{k+1}(x) = (2k+1-x)L_k(x) - k^2 L_{k-1}(x), \quad (4.2.54)$$

die sich mit den „Startpolynomen“

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x \quad (4.2.55)$$

zur numerischen Berechnung der Laguerrepolynome eignet.

⁵Z.B. bezeichnet unter `Mathematica` die Funktion `Laguerre[k, x]` das Polynom (4.2.49).

4.2.3 Die assoziierten Laguerre-Polynome

Wenden wir uns nun wieder den Wasserstoffwellenfunktionen χ_l zu, für die die **assoziierten Laguerre-Polynome** wichtig sind.

Um letztere einzuführen, betrachten wir die Laguerresche Differentialgleichung (4.2.27) in der Form

$$\xi L_k''(\xi) + (1 - \xi)L_k'(\xi) + kL_k(\xi) = 0 \quad (4.2.56)$$

und leiten diese j -mal ($j \leq k$) nach ξ ab. Mit Hilfe der Leibnizschen Produktformel entsteht dann die **verallgemeinerte Laguerresche Differentialgleichung**

$$\xi L_k^{(j+2)}(\xi) + jL_k^{(j+1)}(\xi) + (1 - \xi)L_k^{(j+1)}(\xi) - jL_k^{(j)} + kL_k^{(j)} = 0. \quad (4.2.57)$$

Dabei bedeutet

$$L_k^{(j)}(\xi) = \frac{d^j}{d\xi^j} L_k(\xi) \quad \text{für } j \in \{0, 1, \dots, k\} \quad (4.2.58)$$

die j -te Ableitung des Laguerre-Polynoms L_k . Es ist offensichtlich ein Polynom $(k - j)$ -ten Grades. Sortieren wir (4.2.56) noch ein wenig um und schreiben die Gleichung als Eigenwertgleichung, erhalten wir

$$\left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (j + 1 - \xi) \frac{d}{d\xi} \right] L_k^{(j)}(\xi) = (j - k)L_k^{(j)}(\xi) \quad (4.2.59)$$

Setzen wir hier nun $k = i + j$, folgt

$$\left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (j + 1 - \xi) \frac{d}{d\xi} \right] L_{i+j}^{(j)} = -iL_{i+j}^{(j)}(\xi). \quad (4.2.60)$$

Für vorgegebenes j ist $L_{i+j}^{(j)}$ ein Polynom i -ten Grades.

Für das folgende ist eine andere Form dieser Funktionen bequemer zu handhaben. Dazu definieren wir die **assoziierten Laguerre-Polynome** mittels ihrer **Rodrigues-Formel**

$$L_i^j(\xi) = \xi^{-j} (\exp \xi) \frac{d^k}{d\xi^k} [\exp(-\xi) \xi^{i+j}]. \quad (4.2.61)$$

Wir beweisen nun die Gleichung

$$L_{i+j}^{(j)}(\xi) = (-1)^j \frac{(i+j)!}{i!} L_i^j(\xi). \quad (4.2.62)$$

Dazu wenden wir die Leibnizsche Produktformel auf (4.2.61) an:

$$\begin{aligned} L_i^j(\xi) &= \xi^{-j} \exp \xi \sum_{n=0}^i (-1)^n \exp(-\xi) \binom{i}{n} (i+j)(i+j-1) \cdots (n+j+1) \xi^{n+j} \\ &= \sum_{n=0}^i (-1)^n \binom{i}{n} \frac{(i+j)!}{(n+j)!} \xi^n. \end{aligned} \quad (4.2.63)$$

4. Zentralpotentiale

Andererseits haben wir wegen (4.2.38)

$$\begin{aligned}
 L_{i+j}^{(j)}(\xi) &= \frac{d^j}{d\xi^j} \sum_{n=j}^{i+j} (-1)^n \binom{i+j}{n} \frac{(i+j)!}{n!} \xi^n \\
 &= \sum_{n=j}^{i+j} (-1)^n \binom{i+j}{n} \frac{(i+j)!}{(n-j)!} x^{n-j} \\
 &= \sum_{n=0}^i (-1)^{n+j} \binom{i+j}{n+j} \frac{(i+j)!}{n!} x^n \\
 &= (-1)^j \frac{(i+j)!}{i!} \sum_{n=0}^i (-1)^n \binom{i}{n} \frac{(i+j)!}{(n+j)!} x^n.
 \end{aligned} \tag{4.2.64}$$

Der Vergleich dieser Gleichung mit (4.2.63) beweist also (4.2.62). Dabei haben wir wiederholt die Beziehungen

$$\binom{a}{b} = \frac{a!}{b!(a-b)!} = \binom{a}{a-b} \quad \text{für } a \in \mathbb{N}_0, \quad b \in \{0, 1, 2, \dots, a\} \tag{4.2.65}$$

angewandt.

Nun zeigen wir mit Hilfe von (4.2.61), daß die assoziierten Laguerre-Polynome L_i^j zu festem j ein **Orthogonalsystem** auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}, \xi^j \exp(-\xi))$ bilden. Das Skalarprodukt auf diesem Raum ist durch

$$\langle f | g \rangle_{L,j} := \int_0^\infty d\xi \xi^j \exp(-\xi) f^*(\xi) g(\xi) \tag{4.2.66}$$

definiert. Zum Nachweis der Orthogonalität zeigen wir, daß der Differentialoperator auf der linken Seite von (4.2.60) auf diesem Hilbertraum selbstadjungiert ist. Dazu schreiben wir ihn in der Form

$$\mathcal{L}_j f(\xi) := \left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (j+1-\xi) \frac{d}{d\xi} \right] f(\xi) = \xi^{-j} \exp \xi \frac{d}{d\xi} \left[\xi^{j+1} \exp(-\xi) \frac{d}{d\xi} f(\xi) \right]. \tag{4.2.67}$$

Die Selbstadjungiertheit ergibt sich mittels zweimaliger partieller Integration vermöge

$$\begin{aligned}
 \langle f | \mathcal{L}_j g \rangle_{L,j} &= \int_0^\infty d\xi f^*(\xi) \frac{d}{d\xi} \left[\xi^{j+1} \exp(-\xi) \frac{d}{d\xi} g(\xi) \right] \\
 &= \int_0^\infty d\xi \left\{ \frac{d}{d\xi} \left[\xi^j \exp(-\xi) \frac{d}{d\xi} f(\xi) \right] \right\}^* g(\xi) \\
 &= \int_0^\infty d\xi \xi^j \exp(-\xi) [\mathcal{L}_j f(\xi)]^* g(\xi) = \langle \mathcal{L}_j f | g \rangle.
 \end{aligned} \tag{4.2.68}$$

Damit gilt

$$\langle L_i^j | L_{i'}^j \rangle_{L,j} = N_{ij} \delta_{ii'}, \tag{4.2.69}$$

denn L_i^j ist Eigenfunktion des selbstadjungierten Differentialoperators \mathcal{L}_j .

Zur Berechnung des Normierungsintegrals N_{ij} verwenden wir die Rodriguesformel (4.2.61) und integrieren i -mal partiell

$$\begin{aligned}
 N_{ij} &= \langle L_i^j | L_i^j \rangle_{L,j} = \int_0^\infty (-1)^i d\xi L_i^j(\xi) \frac{d^i}{d\xi^i} [\xi^{i+j} \exp(-\xi)] \\
 &= \int_0^\infty d\xi L_i^j(\xi) \frac{d^i}{d\xi^i} [\xi^{i+j} \exp(-\xi)] = \int_0^\infty d\xi (-1)^i \exp(-\xi) \xi^{i+j} \frac{d^i}{d\xi^i} L_i^j(\xi).
 \end{aligned} \tag{4.2.70}$$

4.2. Das Wasserstoffatom

Mit (4.2.63) erhalten wir unter Verwendung von (4.2.46-4.2.48)

$$N_{ij} = \int_0^\infty d\xi \exp(-\xi) \xi^{i+j} i! = i!(i+j)! \quad (4.2.71)$$

Ein **Orthonormalsystem von Polynomen** auf $L^2(\mathbb{R}_{>0}, \xi^j \exp(-\xi))$ ist demnach durch

$$\tilde{L}_i^j(\xi) = \sqrt{\frac{1}{i!(i+j)!}} L_i^j(\xi) \quad (4.2.72)$$

gegeben.

Eine für die numerische Rechnung geeignete Rekursionsformel läßt sich auf exakt die gleiche Weise herleiten wie die entsprechende Formel für die Laguerre-Polynome (4.2.54). Das Resultat lautet

$$\begin{aligned} L_{i+1}^j(\xi) &= (2i+j+1-x)L_i^j(x) - i(i+j)L_{i-1}^j(x), \\ L_0^j(\xi) &= 1, \quad L_1^j(\xi) = j+1-\xi. \end{aligned} \quad (4.2.73)$$

Dabei haben wir die „Startpolynome“ L_0^j und L_1^j durch Anwendung der Rodriguesformel (4.2.61) berechnet.

Es ist klar, daß $L_i^0(\xi) = L_i(\xi)$ ist und alle Formeln für $j = 0$ in die entsprechenden Formeln für die Laguerre-Polynome übergehen.

4.2.4 Die Wasserstoffradialwellenfunktionen

Nun sind wir bestens gewappnet, um die Radialgleichung des Wasserstoffproblems (4.2.25) zu lösen. Dazu betrachten wir zunächst das **asymptotische Verhalten** für $\xi \rightarrow 0^+$. Dann kann man alle Terme außer dem Zentrifugalterm in (4.2.25) vernachlässigen:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right) \chi_l(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0^+}{\cong} 0. \quad (4.2.74)$$

Diese Gleichung hat offenbar zwei linear unabhängige Lösungen der Gestalt $\chi_l(\xi) = A\xi^\lambda$ mit $\lambda = -l$ oder $\lambda = l+1$. Die erstere scheidet wegen der Randbedingung (4.2.22) für die Radialwellenfunktion aus, d.h. wir haben

$$\chi_l(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0^+}{\cong} A\xi^{l+1}. \quad (4.2.75)$$

Für $\xi \rightarrow \infty$ können wir in (4.2.25) sowohl das Coulomb- als auch das Zentrifugalpotential vernachlässigen, d.h. es gilt

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \chi_l(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\cong} \frac{1}{4} \chi_l(\xi). \quad (4.2.76)$$

Die beiden linear unabhängigen Lösungen dieser Gleichung lauten $\chi_l(\xi) = A \exp(\pm \xi/2)$, von denen nur die mit dem negativen Vorzeichen im Exponenten akzeptabel ist, da die Radialwellenfunktion für gebundene Zustände normierbar sein soll, d.h.

$$\chi_l(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\cong} A \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right). \quad (4.2.77)$$

4. Zentralpotentiale

Aus dem asymptotischen Verhalten (4.2.75) und (4.2.77) an den Randbereichen des Definitionsbereiches bzw. den singulären Punkten der Differentialgleichung (4.2.25) für ξ ergibt sich der folgende Ansatz für die Radialwellenfunktion:

$$\chi_l(\xi) = A\xi^{l+1} \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right)L(\xi), \quad (4.2.78)$$

wobei L eine analytische Funktion mit $L(0) \neq 0$ sein muß. Setzt man diesen Ansatz in (4.2.25) ein, erhält man nach einigen Umformungen

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2}L(\xi) + (2l + 2 - \xi) \frac{d}{d\xi}L(\xi) = (l + 1 - n)L(\xi) = 0. \quad (4.2.79)$$

Dies ist eine modifizierte Laguerresche Differentialgleichung der Form (4.2.60) mit $j = 2l + 1 \in \mathbb{N}$ und $i = n - l - 1$. Die in Abschnitt 4.2.3 behandelten assoziierten Laguerre-Polynome (4.2.61) sind Lösungen, falls $n - l - 1 \in \mathbb{N}_0$ liegt.

Wegen (4.2.25) bedeutet das, daß die Energieeigenwerte durch

$$E_n = -\frac{Z^2\alpha^2\mu c^2}{2} \frac{1}{n^2} \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \quad (4.2.80)$$

und die dazugehörigen Eigenfunktionen durch

$$L(\xi) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) \quad (4.2.81)$$

gegeben sind. Analog wie wir es bei den Laguerre-Polynomen in (4.2.33)-(4.2.36) gezeigt haben, ergibt auch eine Untersuchung des asymptotischen Verhaltens von (4.2.79) für Werte $n - l - 1 \notin \mathbb{N}_0$, daß $L(\xi) \cong_{\xi \rightarrow \infty} \exp \xi$ ist. Diese Lösungen scheiden aus, weil dann (4.2.78) keine auf \mathbb{R}^+ quadratintegrale Funktion ist. Damit ergibt also (4.2.80) sämtliche negativen Energieeigenwerte.

Sammeln wir unsere Ansätze (4.2.17), (4.2.78) und das Ergebnis (4.2.81) für die Radialfunktion zusammen, erhalten wir schließlich die dazugehörigen Eigenfunktionen zu vorgegebener **Drehimpulsquantenzahl** $l \in \mathbb{N}_0$, **Magnetquantenzahl** $m \in \{-l, -l + 1, \dots, l - 1, l\}$ und **Hauptquantenzahl** $n \in \{l + 1, l + 2, \dots\}$

$$u_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{N_{nlm}}{r} (2kr)^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \exp(-kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (4.2.82)$$

Dabei ist k in (4.2.23) angegeben.

Nun hängt der Energieeigenwert E_n nur von der **Hauptquantenzahl** n und nicht von der Drehimpulsquantenzahl l ab. Dies deutet auf eine dynamische Symmetrie des Coulombproblems hin, die über die reine Rotationssymmetrie eines Zentralkraftproblems hinausgeht, worauf wir hier aber nicht genauer eingehen wollen (s. z.B. [Pau26]).

Zu jedem Energieeigenwert E_n , also vorgegebenem $n \in \mathbb{N}$, kann also $l \in \{0, 1, \dots, n - 1\}$ sein, und zu jedem dieser l gibt es die $2l + 1$ Zustände zu $m \in \{\pm l, \pm(l - 1), \dots, 0\}$. Wir haben also zu jedem Energieeigenwert E_n insgesamt

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (4.2.83)$$

zueinander orthogonale Eigenlösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (4.2.15). Man sagt, der Eigenwert E_n sei **n^2 -fach entartet**.

4.2. Das Wasserstoffatom

Da der Hamiltonoperator (4.2.15) selbstadjungiert auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ ist, sind die Wellenfunktionen zu verschiedenen Quantenzahlen n , l und m zueinander orthogonal, d.h. es gilt nach Normierung

$$\langle u_{nlm} | u_{n'l'm'} \rangle = \int_0^\infty dr \int_{S_2} d\Omega r^2 u_{nlm}^*(\vec{r}) u_{n'l'm'}(\vec{r}) = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (4.2.84)$$

Dabei bezeichnen S_2 die Einheitssphäre im \mathbb{R}^3 und $d\Omega = d\vartheta d\varphi \sin \vartheta$ deren Flächenelement in Kugelkoordinaten.

Da die Kugelflächenfunktionen auf $L^2(S_2)$ per constructionem ein Orthonormalsystem bilden (vgl. Abschnitt 4.1), ergibt sich das Normierungsintegral von (4.2.84) zu

$$\langle u_{nlm} | u_{nlm} \rangle = |N_{nlm}|^2 \int_0^\infty dr (2kr)^{2(l+1)} \exp(-2kr) \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \right]^2 \stackrel{!}{=} 1. \quad (4.2.85)$$

Substituieren wir wieder $\xi = 2kr$, entsteht

$$\langle u_{nlm} | u_{nlm} \rangle = |N_{nlm}|^2 \frac{1}{2k} \int_0^\infty d\xi \xi^{2(l+1)} \exp(-\xi) \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) \right]^2. \quad (4.2.86)$$

Zur Auswertung des Integrals schreiben wir

$$|N_{nlm}|^2 \frac{1}{2k} \int_0^\infty d\xi \xi^{2(l+1)} \exp(-\xi) \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) \right]^2 = |N_{nlm}|^2 \frac{1}{2k} \left\langle L_{n-l-1}^{2l+1} \left| \xi L_{n-l-1}^{2l+1} \right\rangle_{L,2l+1} \quad (4.2.87)$$

mit dem Skalarprodukt (4.2.66), bzgl. dessen die L_i^{2l+1} orthogonal sind. Die Rekursionsformel (4.2.73) liefert

$$\xi L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) = 2n L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) - (n-l-1)(n+l) L_{n-l-2}^{2l+1}(\xi) - L_{n-l}^{2l+1}(\xi), \quad (4.2.88)$$

und unter Ausnutzung der Orthogonalität der assoziierten Laguerrepolynome finden wir schließlich mit (4.2.71)

$$\begin{aligned} |N_{nlm}|^2 \frac{1}{2k} 2n \left\langle L_{n-l-1}^{2l+1} \left| L_{n-l-1}^{2l+1} \right\rangle_{L,2l+1} &= |N_{nlm}|^2 \frac{n(n-l-1)(n+l)!}{k} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \\ N_{nlm} &= \sqrt{\frac{k}{n(n-l-1)(n+l)!}}. \end{aligned} \quad (4.2.89)$$

Dies in (4.2.82) eingesetzt ergibt nach einigen Umformungen schließlich für die normierten Energieeigenfunktionen

$$u_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{4k^3}{n(n+l)!(n-l-1)!}} (2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (4.2.90)$$

Das Schrödinger-Coulomb-Eigenwertproblem besitzt noch Lösungen für $E \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. Dies entspricht der **Streuung** eines Teilchens an einem Coulombpotential. Wir gehen auf diese Lösungen im nächsten Abschnitt ein.

4. Zentralpotentiale

Kapitel 5

Streutheorie

Die Bedeutung der Streuung von Teilchen für die Quantenphysik kann kaum überschätzt werden. Man kann wohl ohne Übertreibung sagen, daß ein großer Teil unseres heutigen Wissens über den Aufbau der Materie aus Elementarteilchen und die zwischen ihnen wirkenden Kräfte **Streuexperimenten** zu verdanken ist.

Unter einem Streuexperiment verstehen wir dabei, daß zwei Teilchen weit entfernt voneinander mit relativ wohlbestimmtem Impuls präpariert werden, so daß sie aufeinandertreffen und miteinander reagieren. Für nicht zu hohe Energien, wie wir sie in diesem Skript über nichtrelativistische Quantentheorie behandeln, wird dabei die elektromagnetische Wechselwirkung wirksam, und wir können zunächst von punktförmigen Teilchen ausgehen, die miteinander über die **Coulombwechselwirkung** interagieren. Betrachten wir etwa die Streuung an einem Atom, wird die Coulombwechselwirkung jedoch bei großen Abständen weitgehend durch die Elektronen um den Atomkern abgeschirmt, so daß das Potential $V(\vec{r})$ wesentlich schneller als ein reines Coulombpotential abfällt. Wir betrachten zunächst diesen Fall **kurzreichweitiger Wechselwirkungen**. Die Streuung im Coulombpotential werden wir weiter unten noch genauer betrachten, weil es aufgrund seiner **Langreichweitigkeit** eine gesonderte Behandlung erfordert. Für Potentiale, die mit dem Abstand schneller als $1/|\vec{r}|$ abfallen, können wir davon ausgehen, daß für große Abstände der Teilchen voneinander, dieselben sich praktisch wie freie Teilchen verhalten. Wir folgen hier der Darstellung der Streutheorie mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung unter Konstruktion geeigneter Wellenpakete, die die wirkliche Situation des Streuexperiments adäquat beschreiben [RT67, Mes99]. Die in vielen Lehrbüchern präsentierte stationäre Version mit ebenen Wellen im einlaufenden Kanal ist bestenfalls heuristisch, trägt aber einigen wesentlichen Aspekten des Streuprozesses nicht genügend Rechnung. Insbesondere bleibt unklar, warum bei der Definition des Streuquerschnittes nur der Streuanteil der Welle zu berücksichtigen ist. Auch wird die physikalische Bedeutung des Interferenzterms und der Zusammenhang zum optischen Theorem in der „Wellenpaketformulierung“ wesentlich klarer. Diese etwas mühsamere Einführung in die Streutheorie lohnt sich also!

5.1 Die quantenmechanische Formulierung des Streuvorgangs

Wir betrachten im folgenden zunächst den einfachsten Fall einer **elastischen Zweiteilchenstreuung unterscheidbarer Teilchen**, d.h. wir nehmen an, es finden bei dem Stoß keine intrinsischen Anregungen der Stoßpartner statt. Vielmehr sollen nach dem Streuvorgang wieder dieselben Teilchen wie zu Beginn vorhanden sein. Der dazugehörige Hamiltonoperator ist dann durch (4.2.1) gegeben, und wir können das Streuproblem, wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben, auf die Streuung eines **Quasiteilchens**

mit der reduzierten Masse $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ an einem äußeren Potential zurückführen. Der dazugehörige Hamiltonoperator lautet

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2\mu} + V(\vec{\mathbf{r}}) =: \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}. \quad (5.1.1)$$

Wir gehen, wie oben gesagt, davon aus, daß (in der Ortsdarstellung betrachtet) $V(\vec{\mathbf{r}})$ im Unendlichen schneller als $\mathcal{O}(1/|\vec{\mathbf{r}}|)$ abfällt. Dann dürfen wir annehmen, daß sich das Quasiteilchen zu einer Zeit $t_i \rightarrow -\infty$ sehr weit weg vom Streuzentrum befindet, d.h. daß sein Zustand $|\Phi_i, t_i\rangle$ für $t = t_i$ ¹ in der Ortsdarstellung einer Wellenfunktion $\Phi_i(t_i, \vec{\mathbf{r}})$ entspricht, welches nur außerhalb einer Kugel K_R merklich von 0 verschieden ist. Zugleich soll sein Impuls $\vec{\mathbf{p}}$ relativ scharf bestimmt sein, so daß sich das Teilchen auf das Streuzentrum zubewegt. Zuzufolge der Heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x_j \Delta p_j \geq \hbar/2$ ($j \in \{1, 2, 3\}$) wird dieses Wellenpaket im Ortsraum eine relativ zur de Broglie-Wellenlänge $2\pi\hbar/|\vec{\mathbf{p}}|$ große Ausdehnung besitzen. Andererseits gehen wir davon aus, daß es auf einer makroskopischen Skala als wohl lokalisiert in großer Entfernung vom Streuzentrum $\vec{\mathbf{r}} = 0$ befindlich angesehen werden kann. Wir sagen dazu im folgenden kurz, daß die räumliche Unschärfe **mikroskopisch groß aber makroskopisch klein** sei.

Bei der Konstruktion des Anfangszustandes stehen wir also vor einem etwas ungewöhnlichen Problem. Wir wollen nämlich ein Wellenpaket konstruieren, das anfangs (zur Zeit t_i) in einem im obigen Sinne mikroskopisch großen, makroskopisch kleinen Raumgebiet konzentriert ist und sich sehr weit weg vom Ursprung des Koordinatensystems befindet, wo das Potential $V(\vec{\mathbf{x}})$ merklich von 0 verschieden ist. Es soll etwa bei $t \simeq 0$ dort eintreffen. Da das Potential zu Beginn der Zeitentwicklung wegen des mangelnden Überlapps mit dem Wellenpaket kaum eine Rolle spielt, wird sich dann das Wellenpaket anfangs gemäß der freien Bewegung zeitlich entwickeln. Wir nennen ein solches Wellenpaket einen **asymptotische freien Anfangszustand** oder kurz **in-Zustand**. Im Impulsraum wird es also näherungsweise die asymptotische Gestalt

$$\tilde{\psi}_i(\vec{\mathbf{p}}, t_i) = A_{\vec{\mathbf{p}}_i}(\vec{\mathbf{p}}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E(\vec{\mathbf{p}}) t_i\right) \quad \text{mit} \quad E(\vec{\mathbf{p}}) = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad (5.1.2)$$

besitzen. Dabei ist $A_{\vec{\mathbf{p}}_i}$ eine scharf um $\vec{\mathbf{p}} = \vec{\mathbf{p}}_i$ gepeakte Funktion.

Der nach dem **Schrödingerbild** zeitlich sich entwickelte **exakte Streuzustand** ist dann offenbar durch

$$|\psi, t\rangle = \lim_{t_i \rightarrow -\infty} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{\mathbf{p}} \tilde{\psi}_i(\vec{\mathbf{p}}, t_i) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_i)\mathbf{H}\right] |\vec{\mathbf{p}}\rangle \quad (5.1.3)$$

gegeben. Hierbei ist das größte mathematische Problem der Grenzübergang $t_i \rightarrow -\infty$, der nicht ohne weiteres mit dem Integral vertauscht werden kann. Um dies zu bewerkstelligen, verwenden wir die allgemeine Formel

$$\lim_{t_i \rightarrow -\infty} f(t_i) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 d\tau f(\tau) \exp\left(\frac{\eta}{\hbar} \tau\right). \quad (5.1.4)$$

Zu deren Beweis substituieren wir $\tau' = \eta/\hbar \tau$. Dies führt in der Tat auf

$$\int_{-\infty}^0 d\tau' f\left(\frac{\hbar}{\eta} \tau'\right) \exp(\tau') \xrightarrow{\eta \rightarrow 0^+} f(-\infty) \int_{-\infty}^0 \exp(\tau') = f(-\infty). \quad (5.1.5)$$

¹Wir arbeiten zunächst im **Schrödingerbild** der Zeitentwicklung.

5.1. Die quantenmechanische Formulierung des Streuvorgangs

Setzen wir (5.1.2) in (5.1.3) ein, können wir also unter Verwendung von (5.1.4)

$$|\psi, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t\right) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} A_{\vec{p}_i}(\vec{p}) \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 d\tau \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{H} - E_{\vec{p}} - i\eta)\tau\right] |\vec{p}\rangle \quad (5.1.6)$$

schreiben.

Führen wir die Integration bzgl. τ aus und vertauschen im Sinne von Distributionen den Grenzübergang $\eta \rightarrow 0^+$ mit der Integration über \vec{p} , gelangen wir zu den **stationären Streuzuständen**

$$|\phi_{\vec{p}}^+\rangle = \text{w-lim}_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i\eta}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i\eta} |\vec{p}\rangle. \quad (5.1.7)$$

Wir wollen zunächst zeigen, daß dies tatsächlich ein **Eigenzustand des exakten Hamiltonoperators** zum Eigenwert $E_{\vec{p}} = \vec{p}^2/(2m)$ ist. Dazu verwenden wir, daß

$$\mathbf{H}_0 |\vec{p}\rangle = E_{\vec{p}} |\vec{p}\rangle \quad (5.1.8)$$

und folglich

$$i\eta |\vec{p}\rangle = (\mathbf{H}_0 - E_{\vec{p}} + i\eta) |\vec{p}\rangle = [(E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i\eta) + \mathbf{V}] |\vec{p}\rangle \quad (5.1.9)$$

ist. Dies in (5.1.7) eingesetzt liefert

$$|\phi_{\vec{p}}^+\rangle = \left(\mathbb{1} + \frac{1}{(E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i0^+)} \mathbf{V} \right) |\vec{p}\rangle. \quad (5.1.10)$$

Wenden wir auf diese Gleichung den Operator $E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i0^+$ an, erhalten wir

$$(E_{\vec{p}} - \mathbf{H}) |\phi_{\vec{p}}^+\rangle = (E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + \mathbf{V}) |\vec{p}\rangle = (E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0) |\vec{p}\rangle = 0 \Rightarrow \mathbf{H} |\phi_{\vec{p}}^+\rangle = E_{\vec{p}} |\phi_{\vec{p}}^+\rangle, \quad (5.1.11)$$

und das wollten wir zeigen.

Damit folgt aus (5.1.6) die formale Lösung des Streuproblems

$$|\psi, t\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} A_{\vec{p}_i}(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{\vec{p}}t\right) |\phi_{\vec{p}}^+\rangle. \quad (5.1.12)$$

Die Herleitung zeigt, daß die $|\phi_{\vec{p}}^+\rangle$ diejenigen **stationären Zustände** bzgl. des exakten Hamiltonoperators sind, für die der Streuzustand (5.1.12) sich für $t \rightarrow -\infty$ sich asymptotisch wie ein Wellenpaket freier Teilchen mit dem Impuls \vec{p}_i bewegt.

Um nun den Streuvorgang zu charakterisieren, müssen wir diesen Zustand für große Zeiten $t \rightarrow \infty$ untersuchen. Aus der physikalischen Situation erwarten wir, daß es sich dabei um die **Superposition** aus dem ursprünglichen mit Impuls \vec{p}_i **einlaufenden Wellenpaket** und einer kugelwellenartigen auslaufenden **Streuwellenfront** handeln muß. Um dies genauer zu untersuchen, stellen wir zunächst die Lippmann-Schwinger-Gleichung [LS50] für die stationären Streuzustände $|\phi_{\vec{p}}^+\rangle$ auf. Dazu gehen wir zu (5.1.7) zurück und addieren zunächst $(E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0) |\vec{p}\rangle = 0$

$$|\phi_{\vec{p}}^+\rangle = \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i0^+} (i0^+ + E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0) |\vec{p}\rangle. \quad (5.1.13)$$

Dies lösen wir nach $|\vec{p}\rangle$ auf

$$|\vec{p}\rangle = \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \underbrace{(E_{\vec{p}} - \mathbf{H} + i0^+)}_{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+ - \mathbf{V}} |\phi_{\vec{p}}^+\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \mathbf{V} \right) |\phi_{\vec{p}}^+\rangle. \quad (5.1.14)$$

Die rechte Seite ausmultipliziert und die Formel etwas umgestellt liefert die besagte **Lippmann-Schwinger-Gleichung**

$$|\phi_{\vec{p}}^+\rangle = |\vec{p}\rangle + \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \mathbf{V} |\phi_{\vec{p}}^+\rangle. \quad (5.1.15)$$

Für die folgenden Betrachtungen über die asymptotischen Eigenschaften der zeitabhängigen Lösung (5.1.12) ist es am zweckmäßigsten, in die **Ortsdarstellung** überzugehen. Dazu multiplizieren wir die Lippmann-Schwinger-Gleichung (5.1.15) von links mit $\langle \vec{x} |$ und schieben im zweiten Term auf der rechten Seite an geeigneter Stelle eine Eins in der Form $\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|$ ein:

$$\phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \phi_{\vec{p}}^+\rangle = u_{\vec{p}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x}' \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \right| \vec{x}' \right\rangle V(\vec{x}') \phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}'), \quad (5.1.16)$$

wobei wir die Ortsdarstellung der Impulseigenfunktion mit

$$u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p}\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x} \right) \quad (5.1.17)$$

bezeichnet haben.

Als nächstes rechnen wir den **Integralkern**

$$G_{0,\vec{p}}^+(\vec{x} - \vec{x}') = \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \right| \vec{x}' \right\rangle \quad (5.1.18)$$

auf der rechten Seite aus. Wenden wir den Operator $E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+$ in der Ortsdarstellung an, erhalten wir

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{x}} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \right) G_{0,\vec{p}}^+(\vec{x} - \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (5.1.19)$$

d.h. $G_{0,\vec{p}}^+$ ist bis auf Faktoren eine **Green-Funktion der Helmholtz-Gleichung**.

Schieben wir nun eine Eins in der Form $\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}' |\vec{p}'\rangle \langle \vec{p}'|$ in (5.1.18) ein, erhalten wir

$$G_{0,\vec{p}}^+(\vec{x} - \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}' \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_{\vec{p}} - \mathbf{H}_0 + i0^+} \right| \vec{p}' \right\rangle u_{\vec{p}'}^*(\vec{x}'). \quad (5.1.20)$$

Wegen $\mathbf{H}_0 = \vec{p}^2/(2\mu)$ ist dies

$$G_{0,\vec{p}}^+(\vec{x} - \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \right] \frac{1}{E_{\vec{p}} - E_{\vec{p}'} + i0^+}. \quad (5.1.21)$$

5.1. Die quantenmechanische Formulierung des Streuvorgangs

Um dieses Fourier-Integral zu berechnen, ist es bequem, die Substitutionen $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ und $\vec{p}' = \hbar\vec{k}'$ vorzunehmen. Weiter führen wir die Abkürzung $\vec{r} = \vec{x} - \vec{x}'$ ein. Zur Integration führen wir Kugelkoordinaten mit der Richtung von \vec{r} als Polarachse und $u = \cos\vartheta$ ein. Dann wird der Integrand unabhängig vom Azimuthwinkel φ , und wir erhalten

$$G_{0,\vec{p}}^+(\vec{r}) = \frac{2\mu}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_{-1}^1 du \frac{\exp(ik'ru)}{k^2 - k'^2 + i0^+}. \quad (5.1.22)$$

Das Integral über u läßt sich unmittelbar ausführen. Da der entstehende Integrand eine gerade Funktion in k' wird, können wir zu einer Integration über $k' \in \mathbb{R}$ übergehen und im Summanden $\propto \exp(-ik'r)$ das Vorzeichen der Integrationsvariable wechseln. Damit erhalten wir

$$G_{0,\vec{p}'}^+(\vec{r}) = -\frac{2m}{(2\pi\hbar)^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{k'}{k'^2 - k^2 - i0^+} \exp(ik'r). \quad (5.1.23)$$

Wegen der Exponentialfunktion können wir uns den Integrationsweg in der oberen komplexen k' -Ebene durch einen unendlich großen Halbkreis geschlossen denken und den Residuensatz anwenden. Der Integrand besitzt die beiden Pole erster Ordnung $k' = \pm(k + i0^+)$, von denen nur derjenige mit dem oberen Vorzeichen in der oberen Halbebene liegt und folglich allein zum Residuensatz beiträgt. Wir erhalten also schließlich

$$G_{0,\vec{p}'}^+(\vec{r}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2 r} \exp\left(\frac{i p r}{\hbar}\right), \quad (5.1.24)$$

wobei wir wieder $k = p/\hbar$ gesetzt haben. Wir erhalten also eine **auslaufende Kugelwelle**, wenn wir die Zeitabhängigkeit des Wellenpakets (5.1.12) berücksichtigen, wie es der physikalischen Bedeutung der Streuwelle entspricht. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung der stationären Streulösung (5.1.16) nimmt also nunmehr die Form

$$\phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}) = u_{\vec{p}}(\vec{x}) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \frac{\exp(i p |\vec{x} - \vec{x}'|/\hbar)}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}'). \quad (5.1.25)$$

an. Wir interessieren uns für das **asymptotische Verhalten** dieser Lösung weit außerhalb der Reichweite R des Potentials, also für $x = |\vec{x}| \gg R$. Dann können wir im Nenner des Integranden $|\vec{x} - \vec{x}'| \simeq x = |\vec{x}|$ und im Exponenten $|\vec{x} - \vec{x}'| \simeq x - \vec{x}' \cdot \vec{x}/x$ setzen. Dies liefert

$$\phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{f_{\vec{p}}(\hat{\vec{x}})}{x} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \right] \quad (5.1.26)$$

mit der **Streuamplitude**

$$f_{\vec{p}}(\hat{\vec{x}}) = -4\pi^2 \mu \hbar \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' u_{\vec{p}\hat{\vec{x}}}^*(\vec{x}') V(\vec{x}') \phi_{\vec{p}}^+(\vec{x}') = -4\pi^2 \mu \hbar \left\langle p\hat{\vec{x}} \left| \mathbf{V} \right| \phi_{\vec{p}}^+ \right\rangle. \quad (5.1.27)$$

Dabei ist $\hat{\vec{x}} = \vec{x}/x$ der Einheitsradiusvektor.

Gehen wir nun mit der asymptotischen Entwicklung des stationären Streuzustandes (5.1.26) in die Ortsdarstellung des Wellenpakets (5.1.12) ein, so erhalten wir

$$\psi(t, \vec{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}}(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{\vec{p}} t\right) \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{f_{\vec{p}}(\hat{\vec{x}})}{x} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \right]. \quad (5.1.28)$$

Dem ersten Summanden in der Klammer entspricht nun in der Tat das freie einlaufende Wellenpaket

$$\psi_{\text{ein}}(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi \hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}_i}(\vec{p}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - E_{\vec{p}} t) \right]. \quad (5.1.29)$$

Dabei setzen wir voraus, daß $A_{\vec{p}_i}$ eine um den einlaufenden Impuls \vec{p}_i scharf gepeakte Funktion sein soll, so daß wir den Exponenten des Integranden in niedrigster Ordnung um \vec{p}_i entwickeln können:

$$\vec{p} \cdot \vec{x} - E_{\vec{p}} t = \vec{p}_i \cdot \vec{x} - E_i t + \vec{p}' \cdot (\vec{x} - \vec{v}_i t) \quad \text{mit} \quad \vec{v}_i = \partial_{\vec{p}_i} E_{\vec{p}_i} = \frac{\vec{p}_i}{\mu}. \quad (5.1.30)$$

Dies in (5.1.29) eingesetzt liefert

$$\psi_{\text{ein}} \simeq \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_i \cdot \vec{x}) \right] \Phi_0(\vec{x} - \vec{v}_i t) \quad (5.1.31)$$

mit der Einhüllenden des freien Wellenpakets

$$\Phi_0(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}'}{(2\pi \hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}_i}(\vec{p}_i + \vec{p}') \exp \left(\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot \vec{p}' \right). \quad (5.1.32)$$

Dieses Wellenpaket ist voraussetzungsgemäß makroskopisch lokalisiert um $\vec{x} = 0$ aber doch die Ortsbreite wesentlich größer als die de Broglie-Wellenlänge $\lambda_i = 2\pi \hbar / p_i$ des einlaufenden Wellenpakets. Dies ist aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation in der Tat mit der Forderung $\Delta p \ll p_i$ verträglich, die wir an $A_{\vec{p}_i}$ gestellt hatten.

Der zweite Summand

$$\psi_{\text{streu}}(t, \vec{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\cong} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi \hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}_i}(\vec{p}) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_{\vec{p}} t \right) \left[\frac{f_{\vec{p}}(\hat{\vec{x}})}{x} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p x \right) \right] \quad (5.1.33)$$

ist der Streuteil der Wellenfunktion. Hier können wir die Entwicklung

$$p = |\vec{p}_i + \vec{p}'| = p_i + \hat{\vec{p}}_i \cdot \vec{p}' + \mathcal{O}(p'^2) \quad (5.1.34)$$

verwenden und annehmen, daß sich die Streuamplitude $f_{\vec{p}}(\hat{\vec{x}})$ nur langsam mit \vec{p} ändert und folglich durch $f_{\vec{p}_i}(\hat{\vec{x}})$ ersetzt und damit aus dem Integral herausgezogen werden kann. Der Streuteil des Wellenpaketes ist demnach insgesamt durch

$$\psi_{\text{streu}}(t, \vec{x}) = \frac{f_{\vec{p}_i}(\hat{\vec{x}})}{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_i x - E_i t) \right] \Phi_0[(x - v_i t) \hat{\vec{p}}_i] \quad (5.1.35)$$

gegeben. Nun gilt in der Tat $\psi_{\text{streu}}(t, \vec{x}) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow -\infty$, d.h. es liegt für Zeiten $t \rightarrow -\infty$ der Tat lediglich das aus der Richtung $\hat{\vec{p}}_i$ einlaufende Wellenpaket vor, wie es unsere Anfangsbedingung entsprechend dem Streuexperiment erfordert. Ansonsten ist die Streuwelle nur auf einer Kugelschale der Breite des einlaufenden Wellenpaketes um $x = v_i t$ wesentlich von 0 verschieden.

Für $x \rightarrow \infty$ überlappen weiter der einlaufende Anteil (5.1.31) und der Streuteil (5.1.35) nur in einem kleinen Raumwinkelbereich in der Vorwärtsrichtung $\hat{\vec{p}}_i$, der wieder durch die Breite des einlaufenden Wellenpakets bestimmt ist. Ist also der Detektor in hinreichend großem Raumwinkelabstand von der Einfallrichtung der Teilchen entfernt, werden nur tatsächlich gestreute Teilchen registriert. Im nächsten Abschnitt wollen wir den **Streuquerschnitt** als eine Größe definieren, die lediglich Eigenschaften des Streupotentials charakterisiert und im wesentlichen unabhängig von der detaillierten Form des einlaufenden Wellenpaketes ist.

5.2 Der Streuquerschnitt und das optische Theorem

Nun berechnen wir die Wahrscheinlichkeit, daß ein in der Richtung \hat{x} weit weg vom Streuzentrum $x \gg R$ aufgestellter Detektor bei sehr langer Meßdauer ein Teilchen registriert. Dabei gehen wir davon aus, daß dieser Detektor außerhalb der engen Überlappzone um die Vorwärtsstreurichtung ausgerichtet ist, so daß der auslaufende Strom praktisch ausschließlich durch den Streuwellenanteil (5.1.35) gegeben ist. Um die Wahrscheinlichkeit zu berechnen, daß ein Teilchen in diese Richtung gestreut wird, berechnen wir die Radialkomponente des entsprechenden Stroms

$$j_{\text{streu}} = \hat{x} \cdot \frac{1}{m} \text{Im} \left[\psi_{\text{streu}}^*(t, \vec{x}) \vec{\nabla} \psi_{\text{streu}}(t, \vec{x}) \right] = \frac{1}{m} \text{Im} \left[\psi_{\text{streu}}^*(t, \vec{x}) \partial_x \psi_{\text{streu}}(t, \vec{x}) \right]. \quad (5.2.1)$$

Zur Berechnung der Radialableitung der Streuwelle ist es am bequemsten auf (5.1.33) zurückzugreifen. Dann müssen wir unter dem Integral nur die Exponentialfunktion ableiten, denn wegen $(1/x)' = -1/x^2$ ergibt die Ableitung des Terms $1/x$ einen im asymptotischen Limes $x \rightarrow \infty$ vernachlässigbaren Beitrag. Wir erhalten dann nach Ausführung der Integration nach \vec{p} , wobei wir dieselben Näherungen, die oben zu (5.1.35) geführt haben vornehmen

$$j_{\text{streu}} = v_i \left| \frac{f_{\vec{p}_i}(\hat{x})}{x} \Phi_0[(x - v_i t) \hat{p}_i] \right|^2. \quad (5.2.2)$$

Da wir die Messung über einen sehr großen Zeitraum ausführen und uns nur dafür interessieren, ob während dieses Zeitraums ein Teilchen registriert wird oder nicht, ergibt sich die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen, im Raumwinkelement $d\Omega$ in Richtung von \hat{x} zu registrieren zu

$$\frac{dP(\hat{x})}{d\Omega} = v_i |f_{\vec{p}_i}(\hat{x})|^2 \int_{\mathbb{R}} dt |\Phi_0[(x - v_i t) \hat{p}_i]|^2. \quad (5.2.3)$$

Das Integral charakterisiert nun aber die Einzelheiten der Quelle, die uns nicht interessieren, solange wir nur an der Natur des Streupotentials interessiert sind. Daher definiert man den **differentiellen Streuquerschnitt** dadurch, daß man durch den Flächendichte der einfallenden Teilchen dividiert. Zu dessen Messung denken wir uns einen Detektor vor dem Streuzentrum in den Strahl in Richtung des einfallenden Teilchens gestellt. Wir erhalten dann für die gesamte registrierte Teilchenzahl pro Fläche

$$N_{\text{ein}} = v_i \int_{\mathbb{R}} dt |\Phi_0(\vec{x} - \vec{v}_i t)|^2. \quad (5.2.4)$$

Da hier $\vec{x} = -x \hat{p}_i$ ist, ist das Integral über die Zeit das gleiche wie in (5.2.3), d.h. normieren wir die Wahrscheinlichkeit pro Raumwinkelement (5.2.3) auf diesen einlaufenden Strom, erhalten wir eine Größe, das unter den gemachten Annahmen unabhängig von der genauen Struktur des einlaufenden Wellenpaketes ist, die man als **differentiellen Streuquerschnitt** bezeichnet. Wir erhalten dann

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{p}_i}(\hat{x})|^2. \quad (5.2.5)$$

Nun müssen wir uns noch über die Bedeutung der Interferenzterme im totalen Strom, die nur in Vorwärtsrichtung auftreten klar werden. Physikalisch ist deren Bedeutung sofort evident: Wir betrachten hier die **elastische Streuung**, d.h. die Gesamtwahrscheinlichkeit muß zeitlich erhalten sein. Dies folgt

unmittelbar aus der Selbstdjungiertheit des Hamiltonoperators in der Schrödingergleichung für das Gesamtwellenpaket, welches die Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho}(t, \vec{x}) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = 0 \quad \text{mit} \quad \rho(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2, \quad \vec{j}(t, \vec{x}) = \frac{1}{m} \text{Im} [\psi^*(t, \vec{x}) \vec{\nabla} \psi(t, \vec{x})] \quad (5.2.6)$$

erfüllt. Nun ist

$$\rho(t, \vec{x}) = |\psi_{\text{ein}}(t, \vec{x})|^2 + 2 \text{Re} [\psi_{\text{ein}}^*(t, \vec{x}) \psi_{\text{streu}}(t, \vec{x})] + |\psi_{\text{streu}}(t, \vec{x})|^2. \quad (5.2.7)$$

Außerhalb des Überlappungsgebiets des einlaufenden Wellenpakets und der Streuwelle, weit brauchen wir bei Beobachtung weit weg vom Streuzentrum für $t \rightarrow \infty$ bei der Berechnung von $\rho(t, \vec{x})$ nur den Streuteil zu berücksichtigen. Da die Gesamtwahrscheinlichkeit nach der Kontinuitätsgleichung aber zeitlich erhalten bleibt (und entsprechend auf 1 normiert ist, da das einlaufende Wellenpaket, welches für $t \rightarrow -\infty$ die Gesamtwellenfunktion darstellt, definitionsgemäß auf 1 normiert wurde), muß der Interferenzterm dafür sorgen, daß die Gesamtwahrscheinlichkeit auf 1 normiert bleibt, d.h. der Interferenzterm sorgt dafür, daß der Strom in Vorwärtsrichtung um genau den Betrag des gesamten gestreuten Stromanteils abgeschwächt wird. Dies entspricht in der klassischen Optik der **Schattenbildung** bei Streuung an einem Gegenstand.

Integrieren wir nun (5.2.6) über eine Kugel K_R mit sehr großem Radius R um das Streuzentrum, ergibt die Kontinuitätsgleichung (5.2.6) mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes

$$\frac{d}{dt} \int_{K_R} d^3 \vec{x} \rho(t, \vec{x}) + \int_{\partial K_R} d^2 \vec{F} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = 0. \quad (5.2.8)$$

Da die Wellenfunktion quadratintegrabel ist, fällt der Strom im Unendlichen hinreichend schnell ab, so daß im Limes $R \rightarrow \infty$ tatsächlich

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \rho(t, \vec{x}) = 0 \quad (5.2.9)$$

gilt, d.h. ist das einlaufende Wellenpaket zur Zeit $t_0 \rightarrow -\infty$ auf 1 normiert, so bleibt die Gesamtwellenfunktion (das sich aufgrund der obigen Betrachtungen aus dem ungestört weiterlaufenden einfallenden Wellenpaket und der Streukugelwelle additiv zusammensetzt) zu allen Zeiten auf 1 normiert. Da sich aber ψ_{ein} gemäß (5.1.29) für sich genommen nach der *freien Schrödingergleichung* bewegt, gilt $\langle \psi_{\text{ein}}, t | \psi_{\text{ein}}, t \rangle = 1$ für alle Zeiten t . Integrieren wir nun (5.2.9) bzgl. t zwischen zwei Zeiten $t_0 \rightarrow -\infty$ und $t_1 \rightarrow +\infty$, folgt daraus

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \rho(t_0, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} |\psi_{\text{ein}}(t_0, \vec{x})|^2 = 1 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \rho(t_1, \vec{x}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \{ |\psi_{\text{ein}}(t_1, \vec{x})|^2 + 2 \text{Re} [\psi_{\text{ein}}^*(t_1, \vec{x}) \psi_{\text{aus}}(t_1, \vec{x})] + |\psi_{\text{streu}}(t_1, \vec{x})|^2 \} \\ &= 1 + \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \{ |\psi_{\text{ein}}(t_1, \vec{x})|^2 + 2 \text{Re} [\psi_{\text{streu}}^*(t_1, \vec{x}) \psi_{\text{aus}}(t_1, \vec{x})] \} \end{aligned} \quad (5.2.10)$$

oder

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} |\psi_{\text{streu}}(t_1, \vec{x})|^2 = -2 \text{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} [\psi_{\text{ein}}^*(t_1, \vec{x}) \psi_{\text{streu}}(t_1, \vec{x})]. \quad (5.2.11)$$

Für $t_1 \rightarrow \infty$ trägt sowohl für den Streuwellenanteil als auch für den durchlaufenden ungestreuten Wellenanteil nur die asymptotische Region $x = |\vec{x}| \rightarrow \infty$ wesentlich zum Integral bei, wie wir aus (5.1.31) und (5.1.35) entnehmen können.

5.2. Der Streuquerschnitt und das optische Theorem

Wir betrachten diese Formel nun für $t \rightarrow \infty$. Gemäß (5.1.35) hängt in dieser Formel der Integrand auf der rechten Seite nur ψ_{ein}^* vom Raumwinkel relativ zur \hat{p}_i -Richtung ab, da nur der Überlappbereich zwischen dem einlaufenden Wellenpaket und der Streuwelle in Vorwärtsrichtung wesentlich zum Integral beiträgt und wir also für das gestreute Wellenpaket in (5.1.35) $f_{\hat{p}_i}(\hat{x}) = f_{\hat{p}_i}(\hat{p}_i)$ setzen dürfen. Daher berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned}
 \int_{S_2} d^2\Omega \psi_{\text{ein}}^*(t, \vec{x}) &\stackrel{(5.1.29)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}_i} \exp(iE_{\vec{p}}t) \cdot \int_{S_2} d^2\Omega \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{x}) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} A_{\vec{p}_i} \exp(iE_{\vec{p}}t) \frac{4\pi\hbar}{px} \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) \\
 &\simeq \frac{2\pi\hbar}{ip_ix} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_ix\right) \Phi_0[(x+v_it)\hat{p}_i] - \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_ix\right) \Phi_0[(x-v_it)\hat{p}_i] \right\} \\
 &\stackrel{t \rightarrow \infty}{\cong} \frac{2\pi\hbar i}{p_ix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_ix\right) \Phi_0[(x-v_it)\hat{p}_i].
 \end{aligned} \tag{5.2.12}$$

Damit ergibt sich unter Verwendung von (5.1.35) für die rechte Seite von (5.2.11) schließlich

$$\begin{aligned}
 -2\text{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} [\psi_{\text{ein}}^*(t_1, \vec{x}) \psi_{\text{streu}}(t_1, \vec{x})] &= -2\text{Re} \left[\frac{2\pi\hbar}{p_i} f_{\hat{p}_i}(\hat{p}_i) \int_0^\infty dx \left| \Phi_0[(x-v_it)\hat{p}_i] \right|^2 \right] \\
 &= \frac{4\pi\hbar}{p_i} \text{Im} f_{\hat{p}_i}(\hat{p}_i) \int_0^\infty dx \left| \Phi_0[(x-v_it)\hat{p}_i] \right|^2.
 \end{aligned} \tag{5.2.13}$$

Auf der linken Seite von (5.2.11) erhalten wir wieder wegen (5.1.35)

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} |\psi_{\text{streu}}(t_1, \vec{x})|^2 = \int_{S_2} d^2\Omega \left| f_{\hat{p}_i}(\hat{x}) \right|^2 dx \left| \Phi_0[(x-v_it)\hat{p}_i] \right|^2. \tag{5.2.14}$$

Setzen wir also (5.2.13) und (5.2.14) unter Beachtung von (5.2.5) gleich, erhalten wir das **optische Theorem**

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi\hbar}{p_i} \text{Im} f_{\hat{p}_i}(\hat{p}_i), \tag{5.2.15}$$

d.h. der Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude entspricht bis auf den Faktor $4\pi\hbar/p_i$ dem totalen Streuquerschnitt. Wie unsere Herleitung zeigt, besagt dies nichts anderes als daß der Anteil der aus der Vorwärtsrichtung herausgestreuten Teilchen dem entsprechend in Vorwärtsrichtung fehlenden Anteil entspricht. Freilich ist dies im Sinne der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion zu verstehen und letztlich eine Folge der unitären Zeitentwicklung der Wellenfunktion. Wir werden uns dies im folgenden Abschnitt nochmals auf andere Weise anhand der abstrakteren Beschreibung des Streuprozesses vermöge der **Streu matrix** (bzw. genauer gesagt dem **Streuoperator**) klar machen.

- 5.3 Die Streu- und die T -Matrix
- 5.4 Die Bornsche Näherung
- 5.5 Beispiel: Streuung am Yukawa-Potential
- 5.6 Partialwellenanalyse
- 5.7 Coulomb-Streuung
- 5.8 Distorted-wave-Born-Näherung (DWBA)

Kapitel 6

Galilei-Symmetrie

Die Analyse der grundlegenden physikalischen Theorien im Hinblick auf ihre Symmetrien kann in ihrer Bedeutung für die moderne Physik nicht überschätzt werden. Nicht zuletzt gestatten erst die fundamentalen Symmetrieprinzipien eine mathematisch konsistente physikalische Begründung der **Observablenalgebra**, insbesondere der **Kommutatorrelationen zwischen den Observablenoperatoren**, der Quantentheorie. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit den Symmetrien des **Galilei-Newtonschen Raum-Zeit-Kontinuums** und wie diese im Rahmen der Quantentheorie formuliert werden können. Dabei ergeben sich interessante Folgerungen, die zum Teil über die **heuristische Quantisierung klassischer Observablen** hinausgehen, wie wir sie in QM I verwendet haben, um zu einer quantentheoretischen Beschreibung von Teilchen zu gelangen. Insbesondere wird sich die Existenz einer in der klassischen Physik der Punktteilchen unbekannt Form des Drehimpulses, nämlich des **Spins von Teilchen** ergeben.

6.1 Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik

Die grundlegenden Annahmen der Newtonschen Mechanik lassen sich sehr anschaulich in Form von **Symmetrieprinzipien** formulieren. So sagt das 1. Newtonsche Gesetz (der **Trägheitssatz**) aus, daß es spezifische Bezugssysteme gibt, in denen Teilchen, auf die keine Kräfte wirken, sich stets geradlinig gleichförmig bewegen und daß ein Beobachter durch kein physikalisches Experiment irgendeine Form von absoluter Geschwindigkeit feststellen kann. Die grundlegenden Naturgesetze müssen also in allen zueinander **geradlinig gleichförmig bewegten Bezugssystemen** gleich aussehen, d.h. die Gleichungen sind **invariant unter Galilei-Boosts**. Seien (t, \vec{x}) die Zeit und die drei Raumkomponenten eines Punktteilchens bzgl. einer kartesischen Basis, welches zusammen mit der Festlegung irgendeines in diesem Bezugssystem ruhenden Koordinatenursprungs ein Inertialsystem definiert. Bewegt sich nun der Ursprung eines anderen Inertialsystems, in dem die Zeit und Ortskoordinaten durch (t', \vec{x}') gegeben seien, relativ zum ersten Bezugssystem mit der Geschwindigkeit \vec{w}_1 , so gilt

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \vec{w}_1 t, \quad (6.1.1)$$

wobei wir stillschweigend Newtons Grundannahme, daß die Zeit unabhängig von jeglichen physikalischen Vorgängen in allen Inertialsystemen gleich verläuft, verwendet haben. Diese Transformationen nennt man **Galilei-Boosts**.

Sie bilden mathematisch gesehen eine **Gruppe** mit der Hintereinanderausführung als Gruppenmultiplikation. Führen wir nämlich einen weiteren Boost zu einem dritten Inertialsystem (t'', \vec{x}'') , welches

6. Galilei-Symmetrie

sich gegen das Inertialsystem (t', \vec{x}') mit der Geschwindigkeit \vec{w}_2 bewegt, aus, erhalten wir zusammen mit (6.1.1)

$$t'' = t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x}'' - \vec{w}_2 t' = \vec{x} - (\vec{w}_2 + \vec{w}_1)t. \quad (6.1.2)$$

Die Gesamttransformation, die direkt von den Größen im Inertialsystem (t, \vec{x}) zum System (t'', \vec{x}'') führt, ist also ihrerseits durch einen Galileiboost gegeben, und zwar dem mit der Geschwindigkeit $\vec{w}_3 = \vec{w}_1 + \vec{w}_2$. Schreiben wir den Galilei-Boost mit Geschwindigkeit \vec{w} formal als Matrix-Vektormultiplikation in der Form

$$B(\vec{w}) \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} - \vec{w}t \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad B(\vec{w}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -w_x & 1 & 0 & 0 \\ -w_y & 0 & 1 & 0 \\ -w_z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.1.3)$$

ergibt sich diese Hintereinanderausführung durch die Matrizenmultiplikationsregel

$$B(\vec{w}_2)B(\vec{w}_1) = B(\vec{w}_1 + \vec{w}_2) = B(\vec{w}_1)B(\vec{w}_2). \quad (6.1.4)$$

Es ist weiter klar, daß $B(\vec{w} = 0) = \mathbb{1}_4$ das **neutrale Element der Gruppe** und $B(-\vec{w})$ das zu $B(\vec{w})$ **inverse Element** ist. Da weiter wegen (6.1.4) diese Boost-Matrizen kommutieren, nennt man diese **Galilei-Boost-Gruppe** eine **Abelsche Gruppe**.

Dies sind freilich noch nicht alle Symmetrien der Galilei-Newtonschen Raumzeit. Es wird weiter vorausgesetzt, daß die Naturgesetze sich nicht mit der Zeit ändern. Es kann also auch kein absoluter Zeitpunkt gegenüber irgendeinem anderen Zeitpunkt ausgezeichnet sein. Außerdem gehen wir davon aus, daß die Naturgesetze auch an jedem Ort die gleichen sind. Die Naturgesetze müssen also auch unter **Raum-Zeit-Translationen** invariant sein, d.h. ändern wir den Ursprung der Zeitrechnung und den Koordinatenursprung um irgendwelche konstanten Werte, also

$$t' = t - \alpha, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \vec{a} \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} T(\alpha, \vec{a}) \left[\begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} t - \alpha \\ \vec{x} - \vec{a} \end{pmatrix} \quad (6.1.5)$$

dürfen sich die Bewegungsgleichungen eines Systems von Punktteilchen nicht ändern. Es ist klar, daß auch diese Transformationen, die wir mit $T(\alpha, \vec{a})$ bezeichnen wollen, untereinander eine Abelsche Gruppe bilden, denn es gilt offenbar

$$T(\alpha_2, \vec{a}_2)T(\alpha_1, \vec{a}_1) = T(\alpha_1 + \alpha_2, \vec{a}_1 + \vec{a}_2). \quad (6.1.6)$$

Ebenso bilden die Transformationen, die sich aus beliebigen Hintereinanderausführungen von Galileiboosts und Raum-Zeit-Translationen erzeugen läßt, eine Gruppe, allerdings *keine* Abelsche (*Übung*).

Schließlich wird für jeden (inertialen) Beobachter der Raum als euklidisch angenommen, so daß auch keine Wahl irgendeines kartesischen Basissystems gegenüber einem anderen ausgezeichnet ist, d.h. auch die Orientierung des Bezugssystems ist durch kein physikalisches Phänomen absolut bestimmt. Demnach müssen die Naturgesetze auch unter **räumlichen Drehungen** invariant sein:

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \hat{R}(\vec{\phi})\vec{x}. \quad (6.1.7)$$

Dabei ist $\vec{\phi}$ ein Vektor, dessen Richtung $\vec{n} = \vec{\phi}/\phi$ mit $\phi = 0 \leq |\vec{\phi}| \leq \pi$ die Richtung der Drehachse und dessen Betrag ϕ den Drehwinkel im Sinne der Rechten-Handregel angibt. Um diese Drehung soll die Basis des Bezugssystems (t', \vec{x}') gegen die des Bezugssystems (t, \vec{x}) verdreht sein. Konkret erhält man die

6.1. Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik

Wirkung der Drehung auf die Komponenten des Ortsvektors wie folgt: Die Projektion auf die Richtung der Drehachse $\vec{x}_{\parallel} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x})$ bleibt ungeändert, während der dazu senkrechte Anteil $\vec{x}_{\perp 1} = \vec{n} \times \vec{x}$ und $\vec{x}_{\perp} = (\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} = \vec{x} - \vec{x}_{\parallel}$ um den Winkel ϕ gedreht wird. Die Einheitsvektoren $\vec{b}_1 = \vec{x}_{\perp}/|\vec{x}_{\perp}|$, $\vec{b}_2 = \vec{n} \times \vec{x}/|\vec{n} \times \vec{x}|$ und \vec{n} bilden offenbar ein rechtshändiges kartesisches Basissystem, und folglich lautet die Drehung

$$\vec{x}' = \hat{R}(\phi)\vec{x} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + \cos \phi(\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} - \sin \phi \vec{n} \times \vec{x}. \quad (6.1.8)$$

Es ist klar, daß auch die Drehungen eine Gruppe bilden. Es ist die Gruppe der **reellen speziellen orthogonalen 3x3-Matrizen** $SO(3)$. Dies sind die reellen 3×3 -Matrizen, für die

$$\hat{R}\hat{R}^T = \mathbb{1}_3 \quad \text{und} \quad \det \hat{R} = 1 \quad (6.1.9)$$

gilt. Das inverse Element zu $\hat{R}(\vec{\phi})$ ist offenbar $\hat{R}(-\vec{\phi})$, und das neutrale Element der Gruppe ist $\hat{R}(0) = \mathbb{1}_3$. Da Drehungen um verschieden gerichtete Drehachsen *nicht* kommutieren, ist hier auf die Reihenfolge der Drehungen zu achten.

Es ist bequem, die Drehungen und die Boosts in eine 4×4 -Matrix

$$\Gamma(\vec{w}, \hat{R}) := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\vec{w} & \hat{R} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \hat{R} \in SO(3) \quad (6.1.10)$$

zusammenzufassen. Für $\hat{R} \neq \mathbb{1}_3$ entspricht dies der Hintereinanderausführung einer Drehung gefolgt von einem Galileiboost mit Geschwindigkeit \vec{w} . Hierbei ist auf die Reihenfolge der Operationen zu achten, denn die Drehungen und die Boosts bilden zwar eine Gruppe, aber Drehungen und Boosts vertauschen i.a. nicht miteinander! Die Matrizen (6.1.10) bilden die **Boost-Dreh-Gruppe**, denn die Hintereinanderausführung zweier solcher Transformationen ergibt

$$\Gamma(\vec{w}_2, \hat{R}_2)\Gamma(\vec{w}_1, \hat{R}_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(\vec{w}_2 + \hat{R}_2\vec{w}_1) & \hat{R}_2\hat{R}_1 \end{pmatrix} = \Gamma(\vec{w}_2 + \hat{R}_2\vec{w}_1, \hat{R}_2\hat{R}_1). \quad (6.1.11)$$

Man bezeichnet diese Symmetriegruppe der Galilei-Newtonschen Raum-Zeit auch als **homogene Galilei-Gruppe**, denn sie ist eine lineare Abbildung des Raum-Zeit-Vektors (t, \vec{x}) . Nehmen wir auch noch die Raum-Zeit-Translationen hinzu, indem wir die Wirkung einer solchen aus Boosts, Translationen und Drehungen kombinierten Transformation auf die Raum-Zeit-Vektoren durch

$$\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) \left[\begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} t - \alpha \\ D\vec{x} - \vec{w}t - \vec{a} \end{pmatrix} \quad (6.1.12)$$

definieren, haben wir schließlich die volle **Galilei-Gruppe** konstruiert. Für die Hintereinanderausführung zweier solcher Transformationen ergibt sich

$$\Gamma(\vec{w}_2, \alpha_2, \vec{a}_2, \hat{R}_2)\Gamma(\vec{w}_1, \alpha_1, \vec{a}_1, \hat{R}_1) = \Gamma(\hat{R}_2\vec{w}_1 + \vec{w}_2, \alpha_1 + \alpha_2, \hat{R}_2\vec{a}_1 + \vec{a}_2 - \vec{w}_2\alpha_1, \hat{R}_2\hat{R}_1). \quad (6.1.13)$$

Die inverse Transformation zu $\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R})$ folgt aus der Forderung

$$\Gamma(\vec{w}', \alpha', \vec{a}', \hat{R}')\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = \Gamma(0, 0, 0, \mathbb{1}_3). \quad (6.1.14)$$

Mit der Gruppenmultiplikationsregel (6.1.13) folgt daraus das Gleichungssystem

$$\hat{R}'\vec{w} + \vec{w}' = 0, \quad \alpha + \alpha' = 0, \quad \hat{R}'\vec{a} + \vec{a}' - \vec{w}'\alpha = 0, \quad \hat{R}'\hat{R} = \mathbb{1}_3. \quad (6.1.15)$$

6. Galilei-Symmetrie

Dies läßt sich leicht nach den gesuchten Parametern auflösen (*Übung!*), so daß sich schließlich

$$\Gamma^{-1}(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = \Gamma(-\hat{R}^{-1}\vec{w}, -\alpha, -\hat{R}^{-1}(\vec{a} + \vec{w}\alpha), D^{-1}) \quad (6.1.16)$$

ergibt.

Wir können im folgenden die einzelnen Untergruppen der volle Galileigruppe getrennt behandeln, wie bereits oben geschehen, denn sie ergab sich ja durch Zusammensetzung aus Galileiboosts, raum-zeitlichen Translationen und räumlichen Drehungen. In der obigen Konvention gilt

$$\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = T(\alpha, \vec{a})B(\vec{w})\hat{R} \quad (6.1.17)$$

Es ergibt sich eine erhebliche Vereinfachung der Analyse von solchen **kontinuierlichen Symmetrien**, wenn man zunächst **infinitesimale Transformationen** betrachtet, also solche Transformationen für sehr kleine Abweichungen vom Gruppeneinheitselement. Im vorliegenden Fall der Galileigruppe wird dies dadurch erleichtert, daß die Transformationen offensichtlich differenzierbar nach den Parametern \vec{w} , α , \vec{a} und $\vec{\phi}$ in der Parametrisierung der Drehmatrix D gemäß (6.1.8). Solche Gruppen nennt man **Lie-Gruppen**¹.

Während sich für die Translationen und Boosts zunächst keine erhebliche Vereinfachung zu ergeben scheint, führt eine Entwicklung von \cos und \sin in (6.1.8) nach einem infinitesimalen Drehwinkel $\delta\phi$ zu

$$\vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + (\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} - \delta\phi \vec{n} \times \vec{x} = \vec{x} - \delta\vec{\phi} \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (6.1.18)$$

Für die infinitesimale Änderung des Ortsvektors aufgrund der infinitesimalen Drehung ergibt sich also

$$\delta\vec{x} = -\delta\vec{\phi} \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (6.1.19)$$

Man rechnet auch leicht nach (*Übung!*), daß die Hintereinanderausführung zweier solcher infinitesimaler Drehungen sich zu

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi}_2)\hat{R}(\delta\vec{\phi}_1)\vec{x} = \vec{x} - (\delta\vec{\phi}_1 + \delta\vec{\phi}_2) \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi_1^2, \delta\phi_2^2). \quad (6.1.20)$$

ergibt.

Man kann nun die infinitesimalen Transformationen offenbar wieder als Matrizen schreiben. Für die Komponenten des Vektors ergibt sich aufgrund der Definition des Vektorprodukts ja

$$\delta\vec{x} = -\delta\vec{\phi} \times \vec{x} = \vec{e}_i(-\epsilon_{ijk} \delta\phi_j)x_k. \quad (6.1.21)$$

Definieren wir nun drei Matrizen \mathfrak{J}_j durch²

$$i(\mathfrak{J}_j)_{ik} := -\epsilon_{ijk}, \quad (6.1.22)$$

können wir für (6.1.21) auch

$$\delta\vec{x} = i\delta\phi_j(\mathfrak{J}_j)_{ik}x_k =: i(\delta\vec{\phi} \cdot \vec{\mathfrak{J}})\vec{x} \quad (6.1.23)$$

schreiben. Die infinitesimalen Matrizen $\delta\vec{\phi} \cdot \vec{\mathfrak{J}}$ bilden nun offenbar einen **Vektorraum**, wobei die Hintereinanderausführung zweier infinitesimaler Drehungen sich gemäß (6.1.20) als die Summe der entsprechenden Matrizen ergibt. In diesem Sinne bilden die drei durch (6.1.22) definierten Matrizen \mathfrak{J}_j eine Basis für die infinitesimalen Drehungen.

¹Sophus Lie (1842-1899), norwegischer Mathematiker

²Die Vorzeichenwahl der \mathfrak{J}_j ist willkürlich. Wir wählen die Bezeichnungen dieser infinitesimalen Generatoren sowie die Vorzeichen bereits hier so, wie es später auch in der Quantentheorie der üblichen Konvention entspricht.

6.1. Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik

Mit Matrizen können wir aber noch weitere Operationen ausführen, nämlich die Matrizenmultiplikation. Die Multiplikation zweier \mathfrak{J} -Matrizen führt aber i.a. aus dem Vektorraum der infinitesimalen Drehungen heraus (*Übung*). Es stellt sich allerdings heraus, daß in solchen Fällen stets der **Kommutator** zweier infinitesimaler Drehungen wieder eine infinitesimale Drehung ergibt. Freilich müssen wir dazu die infinitesimalen Drehungen in höherer als linearer Ordnung in den Drehvektoren $\delta\vec{\phi}$ entwickeln. Es gilt nämlich offenbar

$$\begin{aligned} [\hat{R}(\delta\vec{\phi}_2), \hat{R}(\delta\vec{\phi}_1)] &= (\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{1j}\mathfrak{J}_j)(\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{2k}\mathfrak{J}_k) - (\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{2k}\mathfrak{J}_k)(\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{1j}\mathfrak{J}_j) \\ &= -\delta\phi_{1j}\delta\phi_{2j}[\mathfrak{J}_j, \mathfrak{J}_k] \stackrel{!}{=} i\delta\phi_{3l}\mathfrak{J}_l. \end{aligned} \quad (6.1.24)$$

Wir müssen also zeigen, daß es Zahlen f_{cab} gibt, so daß

$$[\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b] = if_{cab}\mathfrak{J}_c \quad (6.1.25)$$

gilt. Dazu berechnen wir den Kommutator aufgrund der Definition (6.1.23), indem wir die Matrizen in Komponenten ausschreiben

$$\begin{aligned} [\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b]_{jl} &= -(\epsilon_{ajk}\epsilon_{bkl} - \epsilon_{bjk}\epsilon_{akl}) = -(\delta_{aj}\delta_{bl} - \delta_{bj}\delta_{al}) \\ &\stackrel{!}{=} if_{cab}(\mathfrak{J}_c)_{jl} = f_{cab}\epsilon_{jcl} = -f_{cab}\epsilon_{cjl}. \end{aligned} \quad (6.1.26)$$

Daraus ergibt sich

$$[\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b] = i\mathfrak{J}_c f_{cab} \quad \text{mit} \quad f_{cab} = \epsilon_{cab}. \quad (6.1.27)$$

Die Kommutatoren zweier beliebiger infinitesimaler Rotationen lassen sich also wieder durch solche infinitesimalen Rotationen schreiben, d.h. der Vektorraum ist abgeschlossen unter der Kommutatoroperation. Bezeichnen wir nun mit Frakturbuchstaben $\mathfrak{a} = \vec{a} \cdot \vec{t}$ eine beliebige solche infinitesimale Transformation, so gilt für irgendwelche drei solcher Elemente die **Jacobi-Identität**

$$[[\mathfrak{a}, \mathfrak{b}], \mathfrak{c}] + [[\mathfrak{b}, \mathfrak{c}], \mathfrak{a}] + [[\mathfrak{c}, \mathfrak{a}], \mathfrak{b}] = 0. \quad (6.1.28)$$

Man bezeichnet einen Vektorraum \mathfrak{L} , auf dem ein antisymmetrisches Produkt $[\cdot, \cdot]: \mathfrak{L} \rightarrow \mathfrak{L}$, welches für irgendwelche drei Elemente $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c} \in \mathfrak{L}$ die Jacobi-Identität (6.1.28) erfüllt, als **Lie-Algebra**. Eine Lie-Algebra ist im wesentlichen durch ihre Strukturkonstanten bzgl. irgendeiner Basis definiert.

Wir können nun umgekehrt aus den infinitesimalen Drehungen wieder endliche Drehungen gewinnen, indem wir nur hinreichend oft eine infinitesimale Drehung ausführen. Betrachten wir dazu zunächst Drehungen um eine feste Achse, die durch den Einheitsvektor \vec{n} vorgegeben ist. Für zwei Drehungen um eine vorgegebene feste Achse gilt nämlich

$$\hat{R}(\phi_2\vec{n})\hat{R}(\phi_1\vec{n}) = \hat{R}[(\phi_1 + \phi_2)\vec{n}]. \quad (6.1.29)$$

Dies zeigt man unmittelbar durch Hintereinanderausführung der beiden Drehungen gemäß (6.1.8) und Anwendung der Additionstheoreme für Cosinus und Sinus. Offenbar bilden also Drehungen um eine feste Achse eine Abelsche einparametrische Untergruppe, wobei sich die Parameter (in unserem Falle die Drehwinkel ϕ_1 und ϕ_2) bei einer Hintereinanderausführung addieren. Man nennt eine solche Untergruppe einer Lie-Gruppe auch kurz eine **Einparametergruppe**.

Nun können wir aber wegen (6.1.30) offenbar

$$\hat{R}(\phi\vec{n}) = \left[\hat{R}\left(\frac{\phi}{N}\vec{n}\right) \right]^N \quad \text{mit} \quad N \in \mathbb{N} \quad (6.1.30)$$

schreiben. Für $N \gg 1$ können wir die Drehung in den eckigen Klammern durch eine infinitesimale Drehung approximieren, wobei wir nur Glieder bis zur Ordnung ϕ/N mitnehmen müssen, d.h. es gilt

$$\hat{R}(\phi\vec{n}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbb{1}_3 + i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} \frac{\phi}{N} \right]^N = \exp(i\phi\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}}). \quad (6.1.31)$$

Man kann durch direkte Rechnung über die Reihenentwicklung der rechts stehenden Matrix-Exponential-Abbildung zeigen, daß diese Überlegung tatsächlich richtig ist.

Eine andere Herleitung desselben Ergebnisses erhält man, indem man zunächst die Drehungen in eine feste Richtung \vec{n} nach dem Drehwinkel ableitet. Wegen (6.1.29) gilt nämlich

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\phi} \hat{R}(\phi\vec{n}) &= \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{D[(\phi + \Delta\phi)\vec{n}] - \hat{R}(\phi\vec{n})}{\Delta\phi} = \hat{R}(\phi\vec{n}) \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{\hat{R}(\Delta\phi\vec{n}) - \mathbb{1}_3}{\Delta\phi} \\ &= \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{\Delta\phi i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} + \mathcal{O}(\Delta\phi^2)}{\Delta\phi} \hat{R}(\phi\vec{n}) = i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} \hat{R}(\phi\vec{n}). \end{aligned} \quad (6.1.32)$$

Liest man dies als Differentialgleichung für $\hat{R}(\phi\vec{n})$ und berücksichtigt die Anfangsbedingung $\hat{R}(0) = \mathbb{1}_3$, erhält man wieder (6.1.31). Man erhält also die Einparameteruntergruppen einer durch Matrizenabbildung realisierten Liegruppe aus deren Liealgebra durch die Matrix-Exponential-Abbildung. Man nennt daher die Lie-Algebra Elemente $\mathfrak{a} \in \mathfrak{L}$ auch die „infinitesimalen Erzeugenden“ der entsprechenden Gruppenoperationen.

Bemerkung: Für die Drehgruppe haben wir eben gesehen, daß man überhaupt die ganze Gruppe durch die Matrix-Exponential-Abbildung aus Lie-Algebra-Elementen zurückgewinnen kann. Dies ist bei allgemeineren Liegruppen nicht mehr unbedingt der Fall.

6.2 Hamiltonsche kanonische Mechanik

In diesem Kapitel erinnern wir in aller Kürze an die Formulierung der klassischen Mechanik von Punktteilchen mit Hilfe des **Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung** in seiner Hamiltonschen (erweiterten) Form.

Die Wirkung für einen Massenpunkt wird zunächst über die **Lagrange-Funktion** $L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$ als Funktional der Trajektorien im Konfigurationsraum definiert:

$$A[\vec{x}] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t). \quad (6.2.1)$$

Die von dem Teilchen tatsächlich durchlaufene Trajektorie ergibt sich aus dem **Prinzip der kleinsten Wirkung**, demzufolge das Wirkungsfunktional entlang dieser Trajektorie extremal (bzw. zumindest stationär) sein muß, wobei die Endpunkte der Bahn zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 festzuhalten sind:

$$\delta A[\vec{x}] = 0 \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \delta \vec{x}(t_1) = \delta \vec{x}(t_2) = 0. \quad (6.2.2)$$

Führt man die Variation aus, erhält man

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\delta \vec{x} \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} + \delta \dot{\vec{x}} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.2.3)$$

6.2. Hamiltonsche kanonische Mechanik

Da beim Hamiltonschen Prinzip die Zeit nicht variiert wird, gilt $\delta \dot{\vec{x}} = d/dt(\delta \vec{x})$, und durch partielle Integration folgt unter den Randbedingungen in (6.2.2)

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \vec{x} \left[\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.2.4)$$

Da wir nun für $\delta \vec{x}$ beliebige hinreichend glatte Funktionen einsetzen dürfen, folgt aus dem Verschwinden der Variation des Wirkungsfunktionals wegen (6.2.4) das Verschwinden der eckigen Klammer unter dem Integral und also die **Euler-Lagrange-Gleichungen**

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.2.5)$$

Setzen wir für ein Newtonsches Partikelchen unter dem Einfluß eines äußeren Potentials die Lagrange-Funktion

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(t, \vec{x}). \quad (6.2.6)$$

an, ergeben die Euler-Lagrange-Gleichungen in der Tat die **Newtonsche Bewegungsgleichung**

$$m \ddot{\vec{x}} = - \frac{\partial V}{\partial \vec{x}} := \vec{F}. \quad (6.2.7)$$

Für das folgende ist allerdings die **Hamiltonsche Formulierung** im **Phasenraum** zweckmäßiger. Dazu definieren wir die zu den Konfigurationsvariablen \vec{x} gehörigen **kanonisch konjugierten Impulse**

$$\vec{p} := \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \quad (6.2.8)$$

und die **Hamilton-Funktion** als **Legendre-Transformierte** der Lagrangefunktion bzgl. \vec{p} :

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t). \quad (6.2.9)$$

Dabei sind in der Lagrangefunktion die Geschwindigkeiten $\dot{\vec{x}}$ durch die kanonischen Impulse \vec{p} auszudrücken. Die Wirkung wird dann zu einem Funktional für **Phasenraumtrajektorien** $[\vec{x}(t), \vec{p}(t)]$,

$$A[\vec{x}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt [\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - H(\vec{x}, \vec{p}, t)]. \quad (6.2.10)$$

Das **erweiterte Hamiltonsche Prinzip** besagt dann, daß sich die tatsächlich durchlaufene Phasenraumtrajektorie des Teilchens aus der Stationarität unter unabhängigen Variationen $\delta \vec{x}$, $\delta \vec{p}$ mit den Randbedingungen $\delta \vec{x}(t_1) = \delta \vec{x}(t_2) = 0$ ergibt³.

Führen wir die Variation aus, ergeben sich die **Hamiltonschen kanonischen Gleichungen** (*Übung!*)

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{x}}. \quad (6.2.11)$$

Daß diese in der Tat zu den Euler-Lagrange-Gleichungen äquivalent sind, ergibt sich direkt durch Bildung des totalen Differentials von (6.2.9):

$$dH = d\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - d\vec{x} \cdot \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - dt \frac{\partial L}{\partial t} = d\vec{p} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} + d\vec{x} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} + dt \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (6.2.12)$$

³Bemerkung: Die $\delta \vec{p}$ werden frei variiert, ohne spezielle Randbedingungen zu verlangen!

6. Galilei-Symmetrie

Dabei haben wir von der Definition der kanonisch konjugierten Impulse (6.2.8) Gebrauch gemacht. Ein Vergleich der Differentiale ergibt

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}. \quad (6.2.13)$$

Die erste Gleichung ist identisch mit der ersten Hamiltonschen Gleichung in (6.2.11). Gelten dann für die Trajektorie die Lagrangegleichungen folgt zusammen mit (6.2.8) auch die zweite Hamiltonsche Gleichung.

Der Vorteil der Hamiltonschen Formulierung liegt im Zusammenhang mit den Symmetriebetrachtungen und schließlich der Analogie zur Quantentheorie in folgender Beobachtung. Betrachten wir eine beliebige Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, wobei Ω den durch (\vec{x}, \vec{p}) parametrisierten sechsdimensionalen **Phasenraum** bezeichnet, so folgt für Trajektorien, die den Hamiltonschen kanonischen Gleichungen genügen,

$$\frac{d}{dt}f(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \dot{\vec{x}} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \dot{\vec{p}} \stackrel{(6.2.11)}{=} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} =: \{f, H\}_{\text{pb}}. \quad (6.2.14)$$

Dabei definieren wir die **Poisson-Klammer** für zwei beliebige Phasenraumfunktionen $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\{f, g\}_{\text{pb}} = \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{x}}. \quad (6.2.15)$$

Es ist nun entscheidend, daß die Phasenraumfunktionen mit der Poisson-Klammer eine **Lie-Algebra** bilden. Es ist offensichtlich, daß die Poisson-Klammer linear in beiden Argumenten ist und daß sie antisymmetrisch ist, d.h. daß

$$\{f, g\}_{\text{pb}} = -\{g, f\}_{\text{pb}} \quad (6.2.16)$$

gilt. Auch der Nachweis der Jacobiidentität

$$\{\{f, g\}_{\text{pb}}, h\}_{\text{pb}} + \{\{g, h\}_{\text{pb}}, f\}_{\text{pb}} + \{\{h, f\}_{\text{pb}}, g\}_{\text{pb}} = 0 \quad (6.2.17)$$

ist durch Nachrechnen unter Verwendung der Definition (6.2.15) zu führen, wenngleich dies mit etwas Schreibarbeit verbunden ist (*Übung!*).

6.3 Kanonische Transformationen

Die kanonischen Transformationen sind umkehrbar eindeutige Funktionen $\mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \Omega$

$$\vec{x} = \vec{x}(t, \vec{X}, \vec{P}), \quad \vec{p} = \vec{p}(t, \vec{X}, \vec{P}), \quad (6.3.1)$$

die die Eigenschaft haben, daß sie die Struktur der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen (6.2.13) invariant lassen. Um diese Eigenschaft genauer zu charakterisieren und die Form des Hamilton-Operators in den neuen Koordinaten $H'(t, \vec{X}, \vec{P})$ zu erhalten, ist es am bequemsten, die Invarianz der Variation der Wirkung zu verlangen. Dazu muß in

$$I[\vec{X}, \vec{P}] - I[\vec{x}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\dot{\vec{X}} \cdot \vec{P} - H'(t, \vec{X}, \vec{P}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{p} + H(t, \vec{x}, \vec{p}) \right] \quad (6.3.2)$$

6.3. Kanonische Transformationen

der Integrand in der eckigen Klammer offenbar die **totale Zeitableitung** einer Funktion von $\vec{x}(t)$ und $\vec{X}(t)$ (sowie evtl. explizit von t) allein sein, weil nur dann die Variation aufgrund der Nebenbedingungen $\delta q(t_1) = \delta Q(t_1) = \delta q(t_2) = \delta Q(t_2) = 0$ identisch verschwindet, d.h. es muß gelten

$$\begin{aligned} \dot{\vec{X}} \cdot \vec{P} - H'(t, \vec{X}, \vec{P}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{p} + H(t, \vec{x}, \vec{p}) &= -\frac{d}{dt} f(t, \vec{x}, \vec{X}) \\ &= -\left[\dot{\vec{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \dot{\vec{X}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial}{\partial t} \right] f(t, \vec{x}, \vec{X}). \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

Dabei bezieht sich die partielle Zeitableitung allein auf die explizite Zeitabhängigkeit von f . Durch Vergleich der Koeffizienten vor $\dot{\vec{X}}$ und $\dot{\vec{x}}$ finden wir schließlich

$$\begin{aligned} \vec{P} &= -\frac{\partial}{\partial \vec{X}} f(t, \vec{x}, \vec{X}), \\ \vec{p} &= +\frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(t, \vec{x}, \vec{X}), \\ H'(t, \vec{X}, \vec{P}) &= H(t, \vec{X}, \vec{P}) + \frac{\partial}{\partial t} f(t, \vec{x}, \vec{X}). \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

Gibt man also umgekehrt irgendeine beliebige Funktion $f(\vec{x}, \vec{X}, t)$ vor, so kann man sich vermöge (6.3.4) die fehlenden Variablen \vec{P} und \vec{p} sowie die auf die neuen Phasenraumkoordinaten \vec{X}, \vec{P} transformierte Hamiltonfunktion verschaffen, so daß die Bewegungsgleichungen in den neuen Koordinaten und mit der neuen Hamiltonfunktion wieder durch die kanonischen Hamiltonschen Gleichungen gegeben sind. Solche Transformationen nennen wir **kanonische Transformationen**, weil sie den kanonischen Hamiltonformalismus forminvariant lassen. Man nennt die Funktion f in (6.3.4) in diesem Zusammenhang auch die **Erzeugende der kanonischen Transformation**.

Man kann sich freilich durch direktes Nachrechnen der Ableitungen vermöge der Kettenregel auch direkt davon überzeugen, daß durch die Wahl der alten und neuen Koordinaten vermöge (6.3.4) tatsächlich die kanonischen Gleichungen in den neuen und alten Variablen äquivalent sind (*Übung!*).

Es ist klar, daß wir die Symmetrietransformationen der Galileigruppe innerhalb der Hamiltonschen Formulierung der kanonischen Mechanik durch solche kanonischen Transformationen darstellen müssen. Wie wir gleich sehen werden, ist es für diesen Zweck günstiger, die erzeugende Funktion durch eine willkürlich vorgegebene Funktion der Form $g(\vec{x}, \vec{P}, t)$ festzulegen. Damit das totale Differential von f wieder nur von $d\vec{x}$ und $d\vec{X}$ abhängt, müssen wir eine **Legendre-Transformation** der Gestalt

$$f(\vec{x}, \vec{X}, t) = g(\vec{x}, \vec{P}, t) - \vec{X} \cdot \vec{P} \quad (6.3.5)$$

durchführen. In der Tat ergibt sich dann

$$\left[d\vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + d\vec{X} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + dt \frac{\partial}{\partial t} \right] f = \left[d\vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + d\vec{P} \frac{\partial}{\partial \vec{P}} + dt \frac{\partial}{\partial t} \right] g - d\vec{X} \cdot \vec{P} - \vec{X} \cdot d\vec{P} \quad (6.3.6)$$

Verwendet man auf der linken Seite die Beziehungen (6.3.4) und vergleicht die Koeffizienten der Differentiale mit denen auf der rechten Seite, erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{X} &= \frac{\partial}{\partial \vec{P}} g(\vec{x}, \vec{P}, t), \\ \vec{p} &= \frac{\partial}{\partial \vec{x}} g(\vec{x}, \vec{P}, t), \\ H'(t, \vec{X}, \vec{P}) &= H(t, \vec{x}, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{x}, \vec{P}, t). \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

6.4 Das Noether-Theorem (klassisch)

Wir wollen nun die im vorigen Abschnitt entwickelte Theorie der kanonischen Transformationen auf Symmetrien anwenden. Für das folgende genügt es, **infinitesimale Symmetrietransformationen** zu betrachten. Wir untersuchen infinitesimale Änderungen der Phasenraumvariablen und berücksichtigen zugleich eine Umparametrisierung der Zeit:

$$\vec{X} = \vec{x} + \delta \vec{x}, \quad \vec{P} = \vec{p} + \delta \vec{p}, \quad t' = t + \delta t. \quad (6.4.1)$$

Damit die Transformation bzgl. der Phasenraumvariablen eine kanonische Transformation ist, stellen wir sie mit einer kanonischen Transformation dar. Wir setzen weiter voraus, die Transformation sei durch eine Einparametergruppe gegeben wie Abschnitt 6.1 beschrieben. Den entsprechenden Parameter nennen wir α . Eine infinitesimale Transformation kann dann offenbar durch eine erzeugende Funktion der Gestalt

$$g(\vec{x}, \vec{P}, t) = \vec{x} \cdot \vec{P} + \delta \alpha G(\vec{x}, \vec{P}, t) \quad (6.4.2)$$

beschrieben werden. In der Tat folgt zunächst aus (6.3.7)

$$\vec{X} = \vec{x} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{P}} G(\vec{x}, \vec{P}, t). \quad (6.4.3)$$

Wir berücksichtigen nun nur Terme in erster Ordnung in $\delta \alpha$, so daß wir im zweiten Term für \vec{P} auch \vec{p} einsetzen können, d.h. es ist

$$\vec{X} = \frac{\partial}{\partial \vec{P}} g = \vec{x} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{p}} G(\vec{x}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (6.4.4)$$

Für die kanonischen Impulse finden wir gemäß (6.3.7)

$$\vec{p} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} g = \vec{P} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{x}} G(\vec{x}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (6.4.5)$$

Bis auf Größen der Ordnung $\mathcal{O}(\delta \alpha^2)$ ist also

$$\vec{P} = \vec{p} - \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{x}} G(\vec{x}, \vec{p}, t). \quad (6.4.6)$$

Eine infinitesimale Symmetrietransformation liegt nun definitionsgemäß genau dann vor, wenn

$$\delta H = \left[\delta \vec{x} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \delta \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} + \delta t \frac{\partial}{\partial t} \right] H = 0 \quad (6.4.7)$$

ist. Setzen wir darin (6.4.4) und (6.4.6) ein, finden wir

$$\delta H = \delta \alpha \left[\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{x}} \right] + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (6.4.8)$$

Dies können wir definitionsgemäß durch die Poissonklammer gemäß (6.2.15) ausdrücken

$$\delta H = \delta \alpha \{H, G\}_{\text{pb}} + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (6.4.9)$$

6.4. Das Noether-Theorem (klassisch)

Andererseits läßt sich aber die Änderung von H aufgrund der kanonischen Transformation wegen (6.3.7) auch durch

$$\delta H = \delta \alpha \frac{\partial G}{\partial t} + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (6.4.10)$$

schreiben. Substituieren wir also $\delta t \frac{\partial H}{\partial t}$ in (6.4.9), finden wir

$$\delta \alpha \left[\{H, G\}_{\text{pb}} - \frac{\partial G}{\partial t} \right] = -\delta \alpha \left[\{G, H\}_{\text{pb}} + \frac{\partial G}{\partial t} \right] = 0. \quad (6.4.11)$$

Wegen der (6.2.4) folgt dann **für die tatsächliche Phasenraumtrajektorie der Teilchen**

$$\frac{d}{dt} G(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0. \quad (6.4.12)$$

Dies ist das **Noether-Theorem**⁴: Die kanonische Erzeugende jeder Einteilchensymmetriegruppe der Hamilton-Funktion ist eine **Erhaltungsgröße** der Bewegungsgleichungen. Aus der obigen Herleitung ist klar, daß auch die Umkehrung gilt: Jede Erhaltungsgröße der Bewegungsgleichungen stellt die kanonische Erzeugende einer Einparametersymmetriegruppe dar.

Formal haben also die kanonischen Transformationen eine sehr große Ähnlichkeit mit dem Lie-Gruppenformalismus aus Abschnitt 6.1: Die Lie-Algebra ist dabei durch den Vektorraum der Phasenraumfunktionen mit der Poisson-Klammer als Lie-Produkt gegeben. Die entsprechende endliche Gruppe können wir für Transformationen, bei denen die Zeit nicht transformiert wird, formal mit Hilfe der durch den Generator erzeugten **Lie-Ableitung** finden. Für die infinitesimale Transformation einer beliebigen Phasenraumfunktion $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ folgt wie oben für die Hamiltonfunktion hergeleitet

$$\delta f = \delta \alpha \{f, G\}_{\text{pb}}. \quad (6.4.13)$$

Betrachten wir die endliche Transformation der Phasenraumkoordinaten als Funktion des Einparametergruppenparameters α folgt daraus

$$\frac{d}{d\alpha} f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t] = \{f, G\}_{\text{pb}} =: i\mathcal{L}_G f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t]. \quad (6.4.14)$$

Da G voraussetzungsgemäß selbst nicht von α abhängt, folgt als formale Lösung

$$f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t] = \exp(i\alpha \mathcal{L}_G) f[\vec{x}, \vec{p}, t]. \quad (6.4.15)$$

Wir wenden nun das Noether-Theorem auf die Einparameteruntergruppen der Galileitransformationen an.

Zeittranslationen: Für zeitliche Translationen ist

$$\delta \vec{x} = \delta \alpha \dot{\vec{x}}, \quad \delta \vec{p} = \delta \alpha \dot{\vec{p}}, \quad \delta t = \delta \alpha. \quad (6.4.16)$$

Damit dies eine Symmetrietransformation der Hamilton-Funktion ist, darf diese gemäß (6.4.9) nicht explizit von der Zeit abhängen. Da die zeitliche Änderung der Phasenraumvariablen \vec{x} und \vec{p} durch die Hamiltonfunktion gegeben ist, ist die zu zeitlichen Translationen gehörige kanonische Erzeugende die Hamilton-Funktion und diese ist zeitlich erhalten, wenn sie nicht explizit von der Zeit abhängt. Dies

⁴Amalie (Emmy) Noether, 1882-1935, deutsche Mathematikerin

6. Galilei-Symmetrie

ist wegen (6.2.14) und der Antisymmetrie der Poisson-Klammer trivial, denn falls H nicht explizit von der Zeit abhängt, ist

$$\frac{d}{dt}H(\vec{x}, \vec{p}) = \{H, H\}_{\text{pb}} \equiv 0. \quad (6.4.17)$$

Die zur zeitlichen Translationsinvarianz gehörige Erhaltungsgröße nennen wir **Energie**, so daß diese folglich durch die Hamiltonfunktion gegeben ist.

Räumliche Translationen: Angenommen, die Hamilton-Funktion sei unter räumlichen Translationen in der Richtung \vec{n} invariant. Die Symmetrietransformation lautet

$$\delta \vec{x} = -\vec{n} \delta \alpha, \quad \delta \vec{p} = 0, \quad \delta t = 0. \quad (6.4.18)$$

Aus (6.4.3) und (6.4.6) folgt für die Erzeugendenfunktion

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{x}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} = \vec{n}. \quad (6.4.19)$$

Die erzeugende Funktion ist also (bis auf eine irrelevante Konstante)

$$G(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{n} \cdot \vec{p}, \quad (6.4.20)$$

d.h. die dazugehörige Erhaltungsgröße ist die **Komponente des kanonischen Impulses** in Richtung von \vec{n} . Die Symmetrie liegt gemäß (6.4.9) tatsächlich vor, wenn die entsprechende Richtungsableitung

$$\{H, G\}_{\text{pb}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{x}} = \vec{n} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \quad (6.4.21)$$

der Hamilton-Funktion nach den Ortskoordinaten verschwindet. Dies ist auch anschaulich klar: Translationsinvarianz unter Verschiebungen in Richtung von \vec{n} bedeutet, daß die Hamilton-Funktion nicht von der entsprechenden Ortskomponente abhängt.

Drehungen: Die infinitesimalen Drehungen um eine Drehachse in Richtung von \vec{n} sind gemäß (6.1.21) durch

$$\delta \vec{x} = -\delta \alpha \vec{n} \times \vec{x} \stackrel{!}{=} -\delta \alpha \frac{\partial G}{\partial \vec{p}}, \quad \delta \vec{p} = -\delta \alpha \vec{n} \times \vec{p} \stackrel{!}{=} \delta \alpha \frac{\partial G}{\partial \vec{x}}. \quad (6.4.22)$$

gegeben. Es ist also

$$\frac{\partial G}{\partial p_j} = \epsilon_{jkl} n_k q_l \Rightarrow G(\vec{x}, \vec{p}) = \epsilon_{jkl} n_k q_l p_j = \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) + \tilde{G}(\vec{x}). \quad (6.4.23)$$

Leiten wir dies nach x_l ab, erhalten wir

$$\epsilon_{jkl} n_k p_j + \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_l} \stackrel{!}{=} -\epsilon_{lkj} n_k p_j = +\epsilon_{jkl} n_k p_j \Rightarrow \tilde{G}(\vec{x}) = \text{const.} \quad (6.4.24)$$

Die Konstante ist wieder physikalisch irrelevant, so daß also

$$G(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) =: \vec{n} \cdot \vec{L} \quad (6.4.25)$$

ggf. die Erhaltungsgröße die durch \vec{n} gegebene Komponente des **Drehimpulses** $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ ist. Eine einfache Rechnung (*Übung*) ergibt gemäß (6.4.9), daß die Symmetrie vorliegt, wenn

$$\vec{n} \cdot \left(\vec{x} \times \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} + \vec{p} \times \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \right) = 0. \quad (6.4.26)$$

6.4. Das Noether-Theorem (klassisch)

Falls wir eine Hamilton-Funktion der einfachsten Form

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (6.4.27)$$

vorliegen haben, reduziert sich dies auf die Forderung, daß

$$\vec{n} \cdot [\vec{x} \times \vec{\nabla} V(\vec{x})] = -\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{F}) = 0 \quad (6.4.28)$$

ist, d.h. daß die Komponente des **Drehmoments** in Richtung der Drehachse verschwindet. Damit die Hamilton-Funktion dieser Form überhaupt unter allen Drehungen invariant ist, muß diese Forderung für alle \vec{n} gelten, und es muß $\vec{M} = \vec{x} \times \vec{F} = 0$ gelten. Dies ist offenbar genau dann erfüllt, wenn $\vec{F} \propto \vec{x}$ ist. Das bedeutet, daß das Potential eine Funktion von $|\vec{x}|$ sein muß, denn nur dann ist

$$\vec{\nabla} V(|\vec{x}|) = V'(|\vec{x}|) \vec{\nabla} |\vec{x}| = V'(|\vec{x}|) \vec{x} / |\vec{x}| \propto \vec{x}. \quad (6.4.29)$$

Dies ist ein typisches Beispiel dafür, wie Symmetrieforderungen die mögliche Form der Hamiltonfunktion einschränken können.

Galilei-Boosts: Betrachten wir schließlich noch einen Galileiboost in Richtung von \vec{n} . Gemäß (6.1.1) lautet die infinitesimale Transformation für ein Teilchen in einem äußeren Potential

$$\delta \vec{x} = -\delta w \vec{n} t, \quad \delta \vec{p} = -\delta w m \vec{n}, \quad \delta t = 0. \quad (6.4.30)$$

Es ergibt sich daraus für die Erzeugende der kanonischen Transformation

$$G(\vec{x}, \vec{p}, t) = \vec{n} \cdot (m \vec{x} - \vec{p} t). \quad (6.4.31)$$

Damit dies eine Symmetrie ist, muß gemäß (6.4.11) für eine Hamilton-Funktion in der Gestalt (6.4.27)

$$\vec{n} \cdot \left(m \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - t \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} - \vec{p} \right) = -\vec{n} \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} \right) = 0 \quad (6.4.32)$$

gelten. Das Potential muß also von der Ortskomponente in Richtung von \vec{n} unabhängig sein, d.h. es genügt für die Galilei-Boost-Invarianz bereits die Translationsinvarianz in diese Richtung. In diesem Fall ist wegen (6.4.20) also automatisch auch $\vec{p} = \text{const}$, und der entsprechende Erhaltungssatz besagt wegen (6.4.31), daß

$$\vec{n} \cdot \vec{x} = \vec{n} \cdot \left(\vec{x}_0 + \frac{\vec{p}}{m} t \right) \quad (6.4.33)$$

mit einer Integrationskonstanten \vec{x}_0 gilt.

Verlangt man nun überhaupt Invarianz unter der vollen Galilei-Gruppe, so ergibt sich für ein einzelnes Teilchen, daß $V = \text{const}$ sein muß, da in alle Richtungen räumliche Translationsinvarianz herrschen muß. Aus der zeitlichen Translationsinvarianz folgt weiter, daß H nicht explizit von der Zeit abhängen darf. Es ist also $H = H(\vec{p})$. Aus der Rotationsinvarianz folgt unter der Voraussetzung, daß \vec{p} sich unter Drehungen wie ein Vektor verhält, daß H nur vom Betrag von \vec{p} abhängen darf. Schließlich verlangt die Boostinvarianz zusätzlich die Erhaltung der Geschwindigkeit, welche gemäß (6.4.31) $\dot{\vec{x}} = \vec{p}/m$ ist. Andererseits verlangt die eine verbleibende nichttriviale Hamiltonsche kanonische Gleichung, daß

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \stackrel{!}{=} \frac{\vec{p}}{m} \quad (6.4.34)$$

6. Galilei-Symmetrie

ist, und das lässt sich wiederum aufintegrieren integrieren zu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \text{const}, \quad (6.4.35)$$

wobei die Integrationskonstante willkürlich ist, da sie in die Bewegungsgleichungen nicht eingeht. Wir haben also aus der Forderung nach **Invarianz unter der vollen Galilei-Gruppe** für ein einzelnes Teilchen die Hamiltonfunktion für ein freies Punktteilchen erhalten.

Für Zweiteilchensysteme folgt aus genau analogen Betrachtungen (*Übung*) die Form

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|). \quad (6.4.36)$$

Wieder schränkt die Symmetrie unter allgemeinen Galilei-Transformationen die mögliche Form der Hamilton-Funktion stark ein. Das Potential der Zentralkraft für die Wechselwirkungskraft selbst folgt allerdings nicht aus der Galilei-Invarianz. Die konkrete Form der Zentralkräfte ist also im Rahmen der Newtonschen Mechanik eine zusätzliche (empirische!) Information erfordernde Fragestellung, die nicht durch die Galilei-Symmetrie allein entschieden werden kann.

Wir können nun bereits die oben erwähnte Verbindung der Galileigruppe der klassischen Mechanik zur Quantentheorie erahnen: Gelingt es, die infinitesimalen Boosts, raum-zeitlichen Translationen und die Drehungen als Symmetrietransformationen im quantentheoretischen Formalismus darzustellen, erhält man die Kommutatorrelationen der Observablenoperatoren zu Energie, Impuls (raum-zeitliche Translationen), Drehimpuls (Drehungen) und Ortsvektor (Galilei-Boosts). Dabei ergeben sich aus den infinitesimalen Gruppenoperationen die Liealgebra und damit die Kommutatorregeln zwischen den entsprechenden Observablenoperatoren.

Ein Beispiel haben wir in Abschnitt 2.1 anhand der räumlichen Translationen angegeben. Wir wollen diese Betrachtung nun durch eine systematische Untersuchung der Galilei-Gruppe vervollständigen. Wie wir sehen werden, gewinnen wir daraus zum einen die aus QM I bekannte Quantentheorie eines klassischen Punktteilchens als Spezialfall aber auch die wichtige Verallgemeinerung auf **Teilchen mit Spin**.

6.5 Quantentheoretische Formulierung von Symmetrien

Um Symmetrieprinzipien für die in den vorigen Abschnitten im Kontext der klassischen Mechanik besprochenen kontinuierlichen Raum-Zeit-Symmetrien in der Quantentheorie zu behandeln, benötigen wir die **Darstellungstheorie von Lie-Gruppen** bzw. **Lie-Algebren** auf dem Raum der **quantenmechanischen Zustände**. Dabei ist es wichtig, daß die Zustandsvektoren immer nur **bis auf einen Phasenfaktor** relevant sind. Es ist daher zur Beschreibung der quantenmechanischen Zustände hinreichend, statt der Zustandsvektoren selbst die entsprechenden **Statistischen Operatoren des reinen Zustands**

$$\mathbf{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (6.5.1)$$

zu verwenden. Wie wir in Abschnitt 2.8 gesehen haben, können Symmetrien durch unitäre Operatoren \mathbf{U} beschrieben werden. Die Statistischen Operatoren und Observablenoperatoren transformieren sich dann gemäß

$$\mathbf{P}'_\psi = \mathbf{U}\mathbf{P}_\psi\mathbf{U}^\dagger, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger. \quad (6.5.2)$$

Daraus wird aber unmittelbar klar, daß jede unitäre Transformation, die sich von \mathbf{U} nur um einen Phasenfaktor unterscheidet,

$$\mathbf{U}' = \exp(i\varphi)\mathbf{U}, \quad (6.5.3)$$

vollständig äquivalent zu der Realisierung der Symmetrie durch \mathbf{U} ist, denn die Ausdrücke (6.5.2) ändern sich nicht, wenn man statt \mathbf{U} die Transformation \mathbf{U}' verwendet. Es sind also die unitären Transformationen, die Symmetrien beschreiben, nur bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor festgelegt.

Betrachtet man genauer, welche Größen gemäß den Postulaten der Quantentheorie (vgl. Abschnitt 2.2) beobachtbaren Aussagen entsprechen, stellt man sogar fest, daß Symmetrietransformationen auch durch **antiunitäre Transformationen** beschrieben werden können. Dabei heißt eine Transformation \mathbf{A} antiunitär, wenn sie **antilinear** ist, d.h. wenn

$$\mathbf{A}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1^* \mathbf{A} |\psi_1\rangle + \lambda_2^* \mathbf{A} |\psi_2\rangle \quad (6.5.4)$$

gilt. Weiter heißt eine antilineare Abbildung \mathbf{U} **antiunitär**, wenn für Skalarprodukte beliebiger Vektoren

$$\langle \mathbf{U}\psi_1 | \mathbf{U}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad (6.5.5)$$

ist.

Nach einem berühmten **Theorem von Wigner** muß jede Symmetrietransformation in der Quantentheorie entweder durch eine unitäre oder eine antiunitäre Transformation dargestellt werden. Den einfachen aber umfangreichen Beweis wollen wir hier nicht führen. Der interessierte Leser sei auf [Bar64] oder [Hee98] verwiesen. Außerdem zeigt sich, daß Symmetrietransformationen, die stetig aus der Identität $\mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ hervorgehen, stets durch **unitäre Operatoren** dargestellt werden müssen.

Sei also G eine Lie-Gruppe mit Parametern $\theta = (\theta_a) \in D \subseteq \mathbb{R}^n$, wobei $a \in \{1, 2, \dots, n\}$. Dann definieren wir die Funktion $f : D^2 \rightarrow D$ durch die Forderung

$$\Gamma(\theta_2)\Gamma(\theta_1) = \Gamma[f(\theta_2, \theta_1)]. \quad (6.5.6)$$

Es sei nun $\mathbf{U} : G \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})^5$, so daß

$$\mathbf{U}(\Gamma_2\Gamma_1) = \exp[i\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1)]\mathbf{U}(\Gamma_2)\mathbf{U}(\Gamma_1) \quad (6.5.7)$$

mit $\Phi(\Gamma_1, \Gamma_2) \in \mathbb{R}$ für alle $\Gamma_1 = \Gamma(\theta_1), \Gamma_2 = \Gamma(\theta_2) \in G$ gilt. Man bezeichnet solch eine Abbildung eine **unitäre Strahldarstellung der Gruppe**. Offensichtlich stellt sie bis auf die quantentheoretisch irrelevanten Phasenfaktoren eine Realisierung der Gruppe durch unitäre Abbildungen auf dem Hilbertraum dar. Falls $\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1) \equiv 0$ ist, spricht man von einer **unitären Darstellung der Gruppe**. Oft kann man durch einfache Umdefinition der Phasen der unitären Abbildungen alle $\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1)$ zum Verschwinden bringen. Dann ist es bequemer und ohne Beschränkung der Allgemeinheit möglich, direkt mit der dadurch entstehenden Darstellung zu arbeiten. Wie wir sehen werden, ist es für die Galileigruppe nicht möglich, eine für die Quantentheorie adäquate Darstellung zu finden, d.h. man muß eine echte Strahldarstellung betrachten.

Die Analyse der möglichen Strahldarstellungen für Lie-Gruppen wird nun erheblich erleichtert, weil man zunächst die entsprechenden Darstellungen der dazugehörigen Lie-Algebra betrachten kann und dann, zumindest in einer Umgebung der Gruppenidentität, aus diesen durch Exponentiation die dazugehörigen Strahldarstellungen der Gruppe selbst gewinnen können. Im folgenden schreiben wir auch

⁵ $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ bezeichnet alle unitären Transformationen des Hilbertraums \mathcal{H}

6. Galilei-Symmetrie

kurz $\mathbf{U}(\theta)$ für $\mathbf{U}[\Gamma(\theta)]$ und $\Phi(\theta_2, \theta_1)$ für $\Phi[\Gamma(\theta_2), \Gamma(\theta_1)]$. Definitionsgemäß sollen die Parameter so gewählt werden, daß $\Gamma(0) = \mathbb{1}_G$ ist. Dann folgt aus der Beziehung (6.5.6)

$$f(\theta, 0) = f(0, \theta) = \theta. \quad (6.5.8)$$

Daraus folgt für die Entwicklung der Funktion f bis zur zweiten Ordnung in den Gruppenparametern

$$f_a(\theta_2, \theta_1) = \theta_{2a} + \theta_{1a} + C_{abc} \theta_{2b} \theta_{1c} + \dots \quad \text{mit} \quad C_{abc} = \left. \frac{\partial^2 f_a(\theta_2, \theta_2)}{\partial \theta_{2a} \partial \theta_{1b}} \right|_{\theta_1 = \theta_2 = 0}. \quad (6.5.9)$$

Weiter können wir die Phasen einer jeden Transformation $\mathbf{U}(\Gamma)$ so gewählt denken, daß

$$\Phi(\theta_2, 0) = \Phi(0, \theta_1) \equiv 0 \quad (6.5.10)$$

ist. Aus dieser Bedingung folgt dann für die Entwicklung der Phasen

$$\Phi(\theta_2, \theta_1) = \Phi_{ab} \theta_{2a} \theta_{1b} + \dots \quad (6.5.11)$$

(*Übung!*).

Setzen wir weiter

$$i\tau_a = \left. \frac{\partial \mathbf{U}(\theta)}{\partial \theta_a} \right|_{\theta=0} \quad (6.5.12)$$

und nehmen wir an, daß die Gruppe (zumindest in einer bestimmten Umgebung der Gruppenidentität) **einfach zusammenhängend** ist, so daß für ein gegebenes (endliches) $\theta \in D$ die ganze gerade Verbindungslinie $\lambda\theta$, $\lambda \in [0, 1]$, ebenfalls in D liegt, so können wir dieselben Argumente wie bei der Herleitung von (6.1.31) für die Drehgruppe anwenden und erhalten

$$\mathbf{U}(\theta) = \exp(i\tau_a \theta_a). \quad (6.5.13)$$

Aus der Unitarität der \mathbf{U} folgt dann unmittelbar die Selbstadjungiertheit der τ_a , denn zunächst gilt

$$\mathbf{U}(\theta)\mathbf{U}^\dagger(\theta) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{U}(\theta)}{\partial \theta_a} \mathbf{U}^\dagger(\theta) + \mathbf{U}(\theta) \frac{\partial \mathbf{U}^\dagger(\theta)}{\partial \theta_a} = 0. \quad (6.5.14)$$

Setzen wir hierin $\theta = 0$ und verwenden die Definition (6.5.12) der τ_a , folgt in der Tat

$$\tau_a^\dagger = \tau_a. \quad (6.5.15)$$

Nun können wir mit Hilfe von (6.5.9) und (6.5.11) die Strahldarstellungseigenschaft (6.5.7) bis zur zweiten Ordnung in den Gruppenparametern entwickeln. Nach kurzer Rechnung (*Übung!*) folgt

$$\begin{aligned} & \mathbb{1}_{\mathcal{H}} + i\tau_a (\theta_{2a} + \theta_{1a} + C_{abc} \theta_{2b} \theta_{1c}) \\ & \quad - \frac{1}{2} \tau_b \tau_c (\theta_{2b} \theta_{2c} + \theta_{2b} \theta_{1c} + \theta_{2c} \theta_{1b} + \theta_{1a} \theta_{1b}) + \Phi_{bc} \theta_{2b} \theta_{1c} \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \\ \stackrel{!}{=} & \mathbb{1}_{\mathcal{H}} + i\tau_a (\theta_{1a} + \theta_{2a}) - \frac{1}{2} \tau_b \tau_c (\theta_{1b} \theta_{1c} + 2\theta_{2b} \theta_{1c} + \theta_{2b} \theta_{2c}) \end{aligned} \quad (6.5.16)$$

Der Koeffizientenvergleich liefert nach Kürzen der auf beiden Seiten gleichen Terme

$$i\tau_a C_{abc} - \frac{1}{2} \{\tau_b, \tau_c\} + \Phi_{bc} \mathbb{1} = -\tau_b \tau_c. \quad (6.5.17)$$

6.6. Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie

Vertauschen wir in (6.5.16) θ_1 mit θ_2 , erhalten wir wieder (6.5.17), allerdings mit vertauschten Indizes b und c . Ziehen wir diese Gleichung von (6.5.17) ab, finden wir für die **Kommutatorrelation**

$$[\tau_b, \tau_c] = if_{abc}\tau_a + iC_{bc}\mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (6.5.18)$$

Dabei heißen die

$$f_{abc} = C_{acb} - C_{abc} \quad \text{und} \quad C_{bc} = \Phi_{bc} - \Phi_{cb} \quad (6.5.19)$$

die **Strukturkonstanten** bzw. **Zentralladungen** der **Strahldarstellung der Lie-Algebra**. Während die Strukturkonstanten unabhängig von der konkreten Darstellung sind, denn C_{abc} folgt ja gemäß (6.5.6) als eine Eigenschaft der gewählten Parametrisierung der Gruppe, hängen die Zentralladungen von der Darstellung ab.

Die Strukturkonstanten und Zentralladungen gehorchen nun aber noch bestimmten Bedingungen, die sich aus der **Jacobi-Identität**

$$[\tau_a, [\tau_b, \tau_c]] + [\tau_b, [\tau_c, \tau_a]] + [\tau_c, [\tau_a, \tau_b]] = 0 \quad (6.5.20)$$

ergeben, die für beliebige Operatoren τ_a , τ_b und τ_c identisch erfüllt ist (*Übung!*). Verwenden wir nämlich (6.5.18) in (6.5.20) und vergleichen die Koeffizienten, folgt (*Übung!*)

$$f_{ead}f_{dbc} + f_{ebd}f_{dca} + f_{ecd}f_{dab} = 0, \quad (6.5.21)$$

$$C_{ad}f_{dbc} + C_{bd}f_{dca} + C_{cd}f_{dab} = 0. \quad (6.5.22)$$

Da (6.5.21) von den Zentralladungen unabhängig ist, gilt offensichtlich (6.5.22) identisch, wenn

$$C_{ab} = f_{eab}\phi_e \quad \text{mit} \quad \phi_e \in \mathbb{R} \quad (6.5.23)$$

ist. Falls es solche Zahlen ϕ_e für eine gegebene Darstellung tatsächlich gibt, können wir zunächst die Generatoren vermöge

$$\tau'_a = \tau_a + \phi_a \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \quad (6.5.24)$$

umdefinieren. Damit haben wir neue Operatoren τ'_a , die eine echte Darstellung der Lie-Algebra bilden, d.h. es gilt (*Übung*)

$$[\tau'_b, \tau'_c] = if_{abc}\tau'_a, \quad (6.5.25)$$

und durch

$$\mathbf{U}'(\theta) = \exp(i\theta_a \tau'_a) = \exp(i\phi_a \theta_a) \exp(i\theta_a \tau_a) = \exp(i\phi_a \theta_a) \mathbf{U}(\theta) \quad (6.5.26)$$

wird (zumindest in einer einfach zusammenhängenden Umgebung der Gruppenidentität) eine zur Strahldarstellung $\mathbf{U}(\theta)$ quantentheoretisch äquivalente **echte unitäre Darstellung** der Gruppe definiert.

Da es einfacher ist, mit echten Darstellungen statt mit Strahldarstellungen zu operieren, werden wir im folgenden möglichst viele Zentralladungen durch einen Ansatz (6.5.24) zu eliminieren versuchen. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, gelingt dies für die physikalisch relevanten Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe nur teilweise.

6.6 Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie

Mit den Vorbereitungen des vorigen Abschnitts können wir nun die Analyse der für die Quantentheorie relevanten unitären Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe angehen.

6. Galilei-Symmetrie

Das generelle Vorgehen beim Aufsuchen der unitären Strahldarstellungen einer vorgegebenen Symmetriegruppe besteht darin, zunächst die dazugehörigen Darstellungen der (Strahl-)Lie-Algebren zu finden. Die selbstadjungierten Operatoren der Lie-Algebra bilden dann die **Observablenoperatoren** der entstehenden Quantentheorie. In unserem Fall der **Galilei-Gruppe** gelangen wir dadurch zu den Realisierungen der Observablen Energie, Impuls, Drehimpuls und Schwerpunkt (für ein einzelnes Teilchen also dem Ortsvektor).

Um die möglichen Strahldarstellungen aus den Kommutatorrelationen der Lie-Algebra, die aus der Gruppenstruktur folgen, konkret zu berechnen, werden (verallgemeinerte) Orthonormalbasissysteme aus Eigenvektoren eines möglichen maximalen Satzes kompatibler Operatoren konstruiert und die Wirkung der unitären Gruppentransformationen auf diese Basisvektoren bestimmt. Dieses Programm führen wir nun für die Galilei-Gruppe aus.

Zunächst bestimmen wir die Lie-Klammerrelationen der Galilei-Lie-Algebra. Die Lie-Algebra hat, wie in Abschnitt 6.1 gesehen, zehn Parameter \vec{w} (Boosts), α (zeitliche Translationen), \vec{a} (räumliche Translationen) und $\vec{\phi}$ (Drehungen). Die Konvention für die Vorzeichen der Operatoren für die infinitesimalen Erzeugenden ist dabei wie folgt festgelegt:

$$\mathbf{U}(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \vec{\phi}) = \exp(-i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}} - i\alpha \mathbf{H} + i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{p}} + i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}). \quad (6.6.1)$$

Verwenden wir (6.1.13) und (6.1.21) für die Darstellung infinitesimaler Transformationen, finden wir für die Entwicklung der Parameter für die Hintereinanderausführung zweier infinitesimaler Galilei-Transformationen $\Gamma_3 = \Gamma_2 \Gamma_1$

$$w_{3j} = w_{1j} + w_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} w_{1l} + \dots, \quad (6.6.2)$$

$$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2, \quad (6.6.3)$$

$$a_{3j} = a_{1j} + a_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} a_{1l} + w_{2j} \alpha_1, \quad (6.6.4)$$

$$\phi_{3j} = \phi_{1j} + \phi_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} \phi_{1l} + \dots \quad (6.6.5)$$

Daraus lesen wir durch Vergleich mit der entsprechenden Entwicklung von (6.6.1) mit Hilfe der Definition (6.5.18) die Strukturkonstanten ab. Weiter setzen wir für alle Kommutatoren willkürliche Zentralladungen an, deren Anzahl wir im folgenden durch Elimination mit Hilfe der Jacobidentitäten (6.5.22) möglichst reduzieren wollen. Es folgen also zunächst die Kommutatorrelationen (*Übung!*) mit der allgemeinsten Möglichkeit für das Auftreten von Zentralladungen:

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{J}_j + iC_{kl}^{JJ} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.6)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{P}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{P}_j + iC_{kl}^{JP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.7)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{K}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{K}_j + iC_{kl}^{JK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.8)$$

$$[\mathbf{P}_k, \mathbf{P}_l] = iC_{kl}^{PP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.9)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{P}_k] = iC_k^{HP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.10)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_k] = iC_k^{HJ} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.11)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{P}_l] = iC_{kl}^{KP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.12)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{K}_k] = -i\mathbf{P}_k + iC_k^{HK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.13)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{K}_l] = iC_{kl}^{KK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (6.6.14)$$

Wir benutzen nun die **Jacobi-Identitäten** für die Zentralladungen (6.5.22), die aus den Jacobi-Identitäten für jeweils drei der Erzeuger (6.6.6-6.6.14) folgen. Dabei sind die Jacobi-Identitäten für die Strukturkonstanten (6.5.21) automatisch erfüllt, weil die obigen Kommutatorregeln aus der Strahldarstellung

6.6. Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie

der Lie-Algebra zur Galilei-Gruppe hervorgehen. Sie liefern also keine weiteren Einschränkungen. Außerdem brauchen wir nur Jacobi-Identitäten für die nichtabelschen Teile der Gruppe zu betrachten, weil für abelsche Untergruppen die Jacobi-Identitäten (6.5.22) automatisch erfüllt sind, weil in diesem Falle die entsprechenden Strukturkonstanten identisch verschwinden.

Da offensichtlich $C_{kl}^{JJ} = -C_{lk}^{JJ}$ sein muß, können wir alle möglichen Zentralladungen einer Strahldarstellung der Drehgruppe in der Form

$$C_{kl}^{jj} = -\epsilon_{nkl}\varphi_n \quad \text{mit} \quad \varphi_n \in \mathbb{R} \quad (6.6.15)$$

schreiben. Da die ϵ_{jkl} gerade die Strukturkonstanten der Drehgruppe sind, erfüllen also die Zentralladungen der Drehgruppe automatisch die Bedingung (6.5.23), so daß wir durch geeignete Phasenwahl der \mathbf{J}_k dafür sorgen können, daß

$$C_{kl}^{JJ} \equiv 0 \quad (6.6.16)$$

ist.

Die Jacobi-Identität für die drei Generatoren \mathbf{J}_k , \mathbf{P}_l und \mathbf{P}_m liefert mit (6.6.7) und (6.6.9)

$$\epsilon_{nmk}C_{ln}^{PP} + \epsilon_{nkl}C_{ml}^{PP} = 0. \quad (6.6.17)$$

Überschiebt man dies mit δ_{mk} folgt

$$\epsilon_{nkl}C_{kl}^{PP} = 0 \quad (6.6.18)$$

und folglich, da $C_{kl}^{PP} = -C_{lk}^{PP}$ ist,

$$C_{kl}^{PP} \equiv 0. \quad (6.6.19)$$

Auf exakt analoge Weise folgt aus der Jacobi-Identität für \mathbf{J}_k , \mathbf{K}_l und \mathbf{K}_m , daß auch

$$C_{kl}^{KK} \equiv 0 \quad (6.6.20)$$

sein muß.

Mit der Jacobi-Identität für \mathbf{P}_k , \mathbf{K}_l und \mathbf{J}_m finden wir

$$\epsilon_{nlm}C_{kn}^{PK} - \epsilon_{nmk}C_{nl}^{PK} = 0. \quad (6.6.21)$$

Überschiebt man dies mit δ_{mk} , folgt

$$\epsilon_{nlk}C_{kn}^{PK} = 0 \Rightarrow C_{kn}^{PK} = C_{nk}^{PK}. \quad (6.6.22)$$

Überschiebt man nun (6.6.21) mit ϵ_{jkm} , erhalten wir

$$3C_{jl}^{PK} = C_{kk}^{PK}\delta_{jl} \Rightarrow C_{jl}^{PK} = -m\delta_{jl} \quad (6.6.23)$$

mit $m \in \mathbb{R}$, wobei m selbst keine weiteren Einschränkungen durch die Gruppenstruktur erfährt. Hier haben wir also eine **nichttriviale Zentralladung** gefunden.

Verwenden wir nun die Jacobi-Identität für \mathbf{K}_k , \mathbf{J}_l und \mathbf{J}_m , erhalten wir

$$\epsilon_{nlm}C_{kn}^{KJ} - \epsilon_{nmk}C_{nl}^{KJ} - \epsilon_{nkl}C_{nm}^{KJ} = 0. \quad (6.6.24)$$

Überschiebt man diese Gleichung mit δ_{lm} , folgt

$$\epsilon_{nlk}C_{nl}^{KJ} = 0 \Rightarrow C_{nl}^{KJ} = C_{ln}^{KJ}. \quad (6.6.25)$$

6. Galilei-Symmetrie

Überschieben von (6.6.24) mit ϵ_{lmo} liefert zusammen mit (6.6.25)

$$2C_{ko}^{KJ} = C_{ll}^{KJ} \delta_{ok}. \quad (6.6.26)$$

Nochmaliges Überschieben mit δ_{ok} ergibt

$$2C_{ll}^{KJ} = 3C_{ll}^{KJ} \Rightarrow C_{ll}^{KJ} = 0, \quad (6.6.27)$$

und wegen (6.6.26) ist damit

$$C_{ko}^{KJ} \equiv 0. \quad (6.6.28)$$

Eine exakt gleichartige Rechnung ergibt vermöge der Jacobi-Identität für \mathbf{P}_k , \mathbf{J}_l und \mathbf{J}_m auch

$$C_{ko}^{PJ} \equiv 0. \quad (6.6.29)$$

Die Jacobi-Identität für \mathbf{H} , \mathbf{P}_k und \mathbf{J}_l liefert

$$\epsilon_{nkl} C_n^{HP} = 0 \Rightarrow C_n^{HP} \equiv 0. \quad (6.6.30)$$

Die Jacobi-Identität für \mathbf{H} , \mathbf{K}_k und \mathbf{J}_l ergibt

$$\epsilon_{nkl} C_n^{HK} = C_{lk}^{JP} \stackrel{(6.6.29)}{=} 0 \quad (6.6.31)$$

und damit

$$C_n^{HK} \equiv 0. \quad (6.6.32)$$

Die einzige nichttriviale Zentralladung ist also durch (6.6.23) gegeben. Zur Untersuchung der Darstellungen der Galilei-Gruppe genügt es also, von den Kommutatorregeln

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{J}_j, \quad (6.6.33)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{P}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{P}_j, \quad (6.6.34)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{K}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{K}_j \quad (6.6.35)$$

$$[\mathbf{P}_k, \mathbf{P}_l] = 0, \quad (6.6.36)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{P}_k] = 0, \quad (6.6.37)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_k] = 0, \quad (6.6.38)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{P}_l] = im \delta_{kl} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (6.6.39)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{K}_k] = -i\mathbf{P}_k, \quad (6.6.40)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{K}_l] = 0 \quad (6.6.41)$$

auszugehen.

6.7 Nichtrelativistische Elementarteilchen

Wir definieren nichtrelativistische Elementarteilchen als solche Teilchen, deren Hilbert-Raum der Zustände eine **irreduzible Strahldarstellung der vollen Galilei-Gruppe** bilden. Dabei heißt eine Strahldarstellung **irreduzibel**, wenn sich der Hilbert-Raum, auf dem diese Darstellung realisiert ist, nicht in (nichttriviale) Unter-Hilbert-Räume zerlegen läßt, d.h. aus jedem von 0 verschiedenen Vektor läßt sich

durch Anwendung der unitären Darstellungsmatrizen $\mathbf{U}(\vec{\omega}, \alpha, \vec{a}, \vec{\phi})$ eine vollständige Basis des Hilbertraumes konstruieren.

Wir können nun alle irreduziblen Strahldarstellungen der Galilei-Lie-Algebra gewinnen, wobei wir, wie im vorigen Abschnitt gesehen, von den Kommutatorrelationen (6.6.33-6.6.41) ausgehen können, d.h. nur die Boost-Translations-Untergruppe enthält gemäß (6.6.39) eine nichttriviale Zentralladung, welche bereits eine die Darstellung charakterisierende Größe m liefert. Wir werden sehen, daß dies die **Masse des Elementarteilchens** ist.

Um nun eine irreduzible Darstellung zu finden, genügt es, eine Basis des Hilbertraums zu konstruieren und die Wirkung der Gruppenoperationen auf diesen Basisvektoren anzugeben. Dabei werden wir so vorgehen, daß wir zunächst die Basisvektoren als simultanen Eigenvektor eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler konstruieren. Dazu wählen wir die simultanen Eigenvektoren $|E, \vec{p}, \sigma\rangle$ des Hamilton-Operators \mathbf{H} und der drei Impulskomponenten $\vec{\mathbf{P}}$. Dabei haben wir mit einem Satz zusätzlicher Parameter σ die Möglichkeit offen gelassen, daß diese **Energie-Impulseigenvektoren** entartet sein können. Nun betrachten wir zuerst die Wirkung eines Boostes auf diese Eigenvektoren. Von der klassischen Mechanik her erwarten wir, daß der Boost eines Energie-Impuls-Eigenvektors wieder einen solchen Eigenvektor zu entsprechend anderen Eigenwerten erzeugt. Betrachten wir also

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}). \quad (6.7.1)$$

Leiten wir diese Beziehung nach ω_j ab, erhalten wir aufgrund der Kommutatorrelationen (6.6.41) und (6.6.39)

$$\frac{\partial}{\partial \omega_j} \mathbf{P}'_k(\vec{\omega}) = m \delta_{kj} \quad (6.7.2)$$

und zusammen mit der Anfangsbedingung $\vec{\mathbf{P}}'(0) = \vec{\mathbf{P}}$

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) = \vec{\mathbf{P}} + m \vec{\omega} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (6.7.3)$$

Daraus folgt

$$\vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle \stackrel{(6.7.3)}{=} (\vec{p} + m \vec{\omega}) \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle. \quad (6.7.4)$$

Damit ist also $\exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle$ Impulseigenvektor zum Eigenwert

$$\vec{p}' = \vec{p} + m \vec{\omega}. \quad (6.7.5)$$

Eine entsprechende Betrachtung des Operators

$$\mathbf{H}'(\vec{\omega}) = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \mathbf{H} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \quad (6.7.6)$$

liefert mit (6.6.41) und (6.7.3)

$$\mathbf{H}'(\vec{\omega}) = \mathbf{H} + \vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{P}} + \frac{1}{2} m \vec{\omega}^2. \quad (6.7.7)$$

Entsprechend ist

$$\mathbf{H} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \left(E + \vec{\omega} \cdot \vec{p} + \frac{m}{2} \vec{\omega}^2 \right) \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle \quad (6.7.8)$$

6. Galilei-Symmetrie

Falls $m \neq 0$ ist, besitzt $\vec{\mathbf{P}}$ den ganzen \mathbb{R}^3 als Spektrum, und die **Boost-Untergruppe** wirkt aufgrund der angenommenen Irreduzibilität der Strahldarstellung transitiv auf den verallgemeinerten Impulseigenvektoren. Wir können daher die folgende **Wignerbasis** für die Impulseigenvektoren wählen:

$$|E, \vec{p}, \sigma\rangle := \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\mathbf{K}}\right) |E_0, \vec{p} = 0, \sigma\rangle. \quad (6.7.9)$$

Für den Energieeigenwert folgt dann wegen (6.7.8)

$$\mathbf{H} |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \left(E_0 + \frac{\vec{p}^2}{2m}\right) |E, \vec{p}, \sigma\rangle. \quad (6.7.10)$$

Wir können nun aber \mathbf{H} um beliebige zum Einheitsoperator proportionale Operatoren verschieben, ohne daß sich etwas an den Kommutatorrelationen (6.6.33-6.6.41) ändert. Wir dürfen also $E_0 = 0$ annehmen. Dann ist

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (6.7.11)$$

und folglich können wir statt $|E, \vec{p}, \sigma\rangle =: |\vec{p}, \sigma\rangle$ schreiben. Da voraussetzungsgemäß die $|\vec{p}, \sigma\rangle$ vollständig sind, folgt daraus

$$\mathbf{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} \sum_{\sigma} \mathbf{H} |\vec{p}, \sigma\rangle \langle \vec{p}, \sigma| = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} \sum_{\sigma} \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}, \sigma\rangle \langle \vec{p}, \sigma| = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m}. \quad (6.7.12)$$

Mit der Wahl der Eigenvektoren (6.7.9) können wir aufgrund der Kommutativität der Galilei-Boosts sofort die Wirkung der Galilei-Boostuntergruppe auf die Impulseigenvektoren angeben:

$$\exp(i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \exp\left(i\frac{m\vec{w} + \vec{p}}{m} \cdot \vec{\mathbf{K}}\right) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \stackrel{(6.7.9)}{=} |\vec{p} + m\vec{w}, \sigma\rangle. \quad (6.7.13)$$

Jetzt müssen wir noch die Wirkung von **Drehungen** auf die Eigenvektoren untersuchen. Setzen wir $\vec{\phi} = \phi\vec{n}$, so folgt aus den Kommutatorrelationen (6.6.34) ähnlich wie oben bei der Herleitung von (6.7.3) durch Ableiten nach ϕ und anschließendem Zurückintegrieren (*Übung*)

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\phi}) = \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) \vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) = \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{P}}. \quad (6.7.14)$$

Dabei ist $\hat{R} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ die gewöhnliche orthogonale Drehmatrix für eine Drehung um den Winkel ϕ um die durch \vec{n} gegebene Drehrichtung. Damit folgt

$$\vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle. \quad (6.7.15)$$

Es ist also $\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle$ Impulseigenvektor zum Eigenwert $\hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}$, und es muß folglich Zahlen $D_{\sigma', \sigma}(\vec{p}, \vec{\phi}) \in \mathbb{C}$ geben, so daß

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \sum_{\sigma'} D_{\sigma', \sigma}(\vec{p}, \vec{\phi}) \left| \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' \right\rangle \quad (6.7.16)$$

ist. Wir zeigen nun, daß die Matrizen $D_{\sigma', \sigma}(\vec{\phi}) := D_{\sigma', \sigma}(\vec{p} = 0, \vec{\phi})$ eine **unitäre Darstellung der Drehgruppe** bilden müssen und daß dann auch die Wirkung von Drehungen auf beliebige Eigenvektoren

$|\vec{p}, \sigma\rangle$ durch diese Darstellung bestimmt ist. Dazu wenden wir (6.7.16) wie folgt auf die Hintereinanderausführung zweier Drehungen

$$\exp(i\vec{\phi}_3 \cdot \vec{J}) = \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi}_1 \cdot \vec{J}) \quad (6.7.17)$$

an:

$$\begin{aligned} \exp(i\vec{\phi}_3 \cdot \vec{J}) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle &= \sum_{\sigma''} D_{\sigma''\sigma}(\vec{\phi}_3) |\vec{p} = 0, \sigma''\rangle \stackrel{!}{=} \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi}_1 \cdot \vec{J}) |0, \sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}_1) \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) |0, \sigma'\rangle = \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma''\sigma'}(\vec{\phi}_2) D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}_1) |0, \sigma''\rangle \\ &= \sum_{\sigma''} [\hat{D}(\vec{\phi}_2) \hat{D}(\vec{\phi}_1)]_{\sigma''\sigma} |0, \sigma''\rangle. \end{aligned} \quad (6.7.18)$$

Dies verlangt aber in der Tat die Darstellungseigenschaft

$$\hat{D}(\vec{\phi}_3) = \hat{D}(\vec{\phi}_2) \hat{D}(\vec{\phi}_1). \quad (6.7.19)$$

Falls wir also nichttriviale Darstellungen der Drehgruppe finden können, was wir im nächsten Abschnitt zeigen werden, transformieren sich Impulseigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ unter Drehungen unter eben dieser nichttrivialen Darstellung. Wir interpretieren diese der klassischen Physik fremde Eigenschaft, daß sich die Zustände eines ruhenden freien elementaren Teilchens unter Drehungen ändern können, dadurch, daß wir den durch diese Strahldarstellung der Galilei-Gruppe beschriebenen Teilchen eine zum Drehimpuls gehörige innere Quantenzahl zuschreiben, die als **Spin** bezeichnet wird. Dieser Name geht auf die etwas heikle Vorstellung zurück, daß Elementarteilchen neben den drei Translationsfreiheitsgraden eine Art inneren Drehimpuls in Analogie zum Drall eines ausgedehnten starren Körpers besitzen. Dies ist insofern problematisch als wir Elementarteilchen als punktförmig ansehen, da es physikalisch keinen Sinn ergibt, ihnen aufgrund der quantentheoretischen Beschreibung überhaupt eine Art von Ausdehnung zuzuordnen.

Nun können wir die Wirkung einer Drehung auf beliebige Basisvektoren $|\vec{p}, \sigma\rangle$ bestimmen. Dazu schreiben wir

$$\begin{aligned} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p}, \sigma\rangle &= \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \\ &= \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \end{aligned} \quad (6.7.20)$$

Nun gilt

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) = \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}'(\vec{\phi})\right) \quad (6.7.21)$$

mit

$$\vec{K}'(\vec{\phi}) = \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \vec{K} \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) = \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{K}, \quad (6.7.22)$$

wobei die letzte Gleichung genauso herzuleiten ist wie die entsprechende Gleichung (6.7.14) für den Impulsoperator. Verwenden wir zuerst (6.7.16) in (6.7.20) und wenden dann nacheinander (6.7.21) und (6.7.9) an, erhalten wir

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \sum_{\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}) |\hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma'\rangle, \quad (6.7.23)$$

6. Galilei-Symmetrie

wobei wir von der Orthogonalität der Drehmatrix $\hat{R}(\vec{\phi})$ Gebrauch gemacht haben:

$$\vec{p} \cdot [\hat{R}^{-1}(\vec{\phi})\vec{K}] = [\hat{R}^{-1T}(\vec{\phi})\vec{p}] \cdot \vec{K} = [\hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}] \cdot \vec{K}. \quad (6.7.24)$$

Damit haben wir die Wirkung aller Bestandteile der Strahldarstellung der Galilei-Gruppe für ein Elementarteilchen festgelegt. Es verbleibt uns nur noch, die Darstellungen der Drehgruppe zu charakterisieren, um alle möglichen Realisierungen von Matrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ zu ermitteln.

Wir müssen uns nun aber noch von der Unitarität der Strahldarstellung überzeugen. Für die zeitlichen und räumlichen Translationen ist dies klar, da diese die Basisvektoren $|\vec{p}, \sigma\rangle$ lediglich mit Phasenfaktoren multiplizieren, weil diese Vektoren konstruktionsgemäß Eigenvektoren der entsprechenden Erzeugenden \mathbf{H} und $\vec{\mathbf{P}}$ sind. Für die Boosts folgt

$$\begin{aligned} \langle \exp(i\vec{w} \cdot \vec{K})\vec{p}_1, \sigma_1 | \exp(i\vec{w} \cdot \vec{K})\vec{p}_2, \sigma_2 \rangle &= \langle \vec{p}_1 + m\vec{w}, \sigma_1 | \vec{p}_2 + m\vec{w}, \sigma_2 \rangle \\ &= \delta^{(3)}[(\vec{p}_1 + m\vec{w}) - (\vec{p}_2 + m\vec{w})] \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ &= \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} = \langle \vec{p}_1, \sigma_1 | \vec{p}_2, \sigma_2 \rangle. \end{aligned} \quad (6.7.25)$$

Dabei sind wir davon ausgegangen, daß die $|\vec{p}, \sigma\rangle$ auf die übliche Weise normiert und daß sich die Darstellungsmatrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ der Drehgruppe auf eine diskrete Basis beziehen. Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, daß dies notwendig der Fall ist. Betrachten wir schließlich noch die Drehungen:

$$\begin{aligned} \langle \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})\vec{p}_1, \sigma_1 | \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})\vec{p}_2, \sigma_2 \rangle &= \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma' \sigma_1}^* D_{\sigma'' \sigma_2} \langle \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}_1, \sigma' | \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}_2, \sigma'' \rangle \\ &= \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma' \sigma_1}^*(\vec{\phi}) D_{\sigma'' \sigma_2}(\vec{\phi}) \delta^{(3)}[\hat{R}(\vec{\phi})(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)] \delta_{\sigma' \sigma''} \\ &= \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) [\hat{D}^\dagger(\vec{\phi}) \hat{D}(\vec{\phi})]_{\sigma_1 \sigma_2}. \end{aligned} \quad (6.7.26)$$

Dabei haben wir bei der Umrechnung der δ -Distribution verwendet, daß $\det \hat{R}(\vec{\phi}) = 1$ ist. Damit also die Strahldarstellung unitär ist, muß

$$\hat{D}^\dagger(\vec{\phi}) \hat{D}(\vec{\phi}) = \mathbb{1}, \quad (6.7.27)$$

also die Darstellung der Drehgruppe $\hat{D}(\vec{\phi})$ **unitär** sein. Damit die Strahldarstellung irreduzibel ist, muß offenbar auch die unitäre Darstellung der Drehgruppe irreduzibel sein, denn nur dann können alle Eigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ durch Anwendung von Drehungen aus einem beliebigen solchen Zustand gewonnen werden.

Wir müssen also noch die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe finden, um unsere Darstellungstheorie der Galilei-Symmetrie und damit die Beschreibung nichtrelativistischer Elementarteilchen abzuschließen.

Zunächst bemerken wir, daß die Galilei-Boosts für sich genommen eine (Abelsche) Untergruppe der vollen Galilei-Gruppe bilden, die insbesondere keine Drehungen generieren kann. Daher können die eben konstruierten Basiszustände als dyadisches Produkt

$$|\vec{p}, \sigma\rangle = |\vec{p}\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (6.7.28)$$

geschrieben werden, und der Drehimpuls läßt sich in einen **Bahndrehimpuls-** und einen **Spinanteil** zerlegen:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} \times \mathbb{1} + \mathbb{1} \times \vec{\mathbf{S}} =: \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}. \quad (6.7.29)$$

6.8. Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe

Offensichtlich gelten dann die Drehimpulskommutatorregeln (6.6.33) für $\vec{\mathbf{L}}$ und $\vec{\mathbf{S}}$, und diese Operatoren kommutieren untereinander. Die Darstellung der Drehungen ist damit durch

$$\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})|\vec{p}, \sigma\rangle = \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{L}})|\vec{p}\rangle \otimes \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{S}})|\sigma\rangle \quad (6.7.30)$$

gegeben. Es läßt sich dann aus den Kommutatorrelationen (6.6.33-6.6.41) herleiten (*Übung!*), daß wir

$$\vec{\mathbf{L}} = \frac{1}{m} \vec{\mathbf{K}} \times \vec{\mathbf{P}} \quad (6.7.31)$$

setzen können. Der Spinoperator kommutiert mit allen Operatoren außer den Spinoperatorkomponenten selbst, die die Drehimpulsalgebra

$$[\mathbf{S}_k, \mathbf{S}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{S}_j \quad (6.7.32)$$

erfüllen.

6.8 Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe

Zur vollständigen Charakterisierung der unitären irreduziblen Strahldarstellungen der Galileigruppe fehlt jetzt nur noch die Konstruktion der irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe.

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, daß die $|\vec{p} = 0, \sigma\rangle = |\vec{p} = 0\rangle \otimes |\sigma\rangle$, also die Energie-Impuls-Eigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ einen Darstellungsraum der Drehgruppe zu einer irreduziblen unitären Darstellung aufspannen. Dabei wirken auf die $|\sigma\rangle$ die Spinoperatoren, die die Kommutatorregeln (6.7.32) erfüllen. Die entsprechenden unitären Darstellungen der Drehgruppe wollen wir im folgenden konstruieren.

Laut (6.6.33) wird die Lie-Algebra der Drehgruppe durch die drei selbstadjungierten Drehimpulsoperatoren $\vec{\mathbf{S}}$ aufgespannt, und es gelten die Kommutatorrelationen

$$[\mathbf{S}_j, \mathbf{S}_k] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{S}_l. \quad (6.8.1)$$

Zunächst erwarten wir, daß $\vec{\mathbf{S}}^2$ mit allen $\vec{\mathbf{S}}$ vertauscht. Mit (6.8.1) ist dies sofort zu bestätigen:

$$[\mathbf{S}_k, \mathbf{S}_l \mathbf{S}_l] = i\epsilon_{klm} (\mathbf{S}_l \mathbf{S}_m + \mathbf{S}_m \mathbf{S}_l) = 0. \quad (6.8.2)$$

Man nennt einen Operator, der mit allen Elementen einer Lie-Algebra vertauscht, einen **Casimir-Operator**. Folglich ist $\vec{\mathbf{S}}^2$ also ein Casimir-Operator der Drehgruppe. Wir können die irreduziblen Darstellungen einer Lie-Algebra durch den Eigenwert der untereinander kommutierenden Casimir-Operatoren charakterisieren, denn für eine irreduzible Darstellung können wir alle Vektoren durch Anwendung einer Drehung $\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{S}})$ auf einen Eigenvektor erzeugen. Dabei entstehen wieder Eigenvektoren der Casimir-Operatoren zu denselben Eigenwerten, d.h. eine irreduzible Darstellung ist vollständig durch die Eigenwerte eines vollständigen Satz kompatibler Casimir-Operatoren bestimmt. Die Lie-Algebra der Drehgruppe besitzt nun offenbar nur diesen einen Casimir-Operator, denn dies ist die einzige unter Drehungen invariante Größe, die sich aus $\vec{\mathbf{S}}$ gewinnen läßt.

Da die drei Drehimpulsoperatoren untereinander nicht vertauschen, muß sich der zu einer irreduziblen unitären Darstellung gehörige Vektorraum zum $\vec{\mathbf{S}}^2$ -Eigenwert λ durch die Eigenbasis einer beliebigen Komponente des Drehimpulsoperators, üblicherweise nimmt man \mathbf{S}_z , aufspannen lassen:

$$\vec{\mathbf{S}}^2 |\lambda, \sigma\rangle = \lambda |\lambda, \sigma\rangle, \quad \mathbf{S}_z |\lambda, \sigma\rangle = \sigma |\lambda, \sigma\rangle. \quad (6.8.3)$$

6. Galilei-Symmetrie

Wir haben durch die willkürliche Wahl von S_z zur Charakterisierung der Basisvektoren die z -Richtung ausgezeichnet. Es empfiehlt sich daher die Einführung eines Polarkoordinatensystems in der xy -Ebene. Dies ist aber nicht so einfach im Operatorformalismus zu realisieren. Wir nutzen eine andere Möglichkeit, die auch oft im Zusammenhang mit Rechnungen in der klassischen Mechanik nützlich ist, nämlich die Darstellung der xy -Ebene als komplexe Zahlenebene. Entsprechend konstruieren wir die *nicht selbstadjungierten* zueinander hermitesch adjungierten Operatoren

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y. \quad (6.8.4)$$

Wir werden im folgenden intensiven Gebrauch von Kommutatorrelationen dieser Operatoren machen, die sich leicht aus (6.8.1) herleiten lassen. Besonders einfach ist die Kommutativität mit \vec{S}^2 einzusehen

$$[S_{\pm}, \vec{S}^2] = 0, \quad (6.8.5)$$

weil \vec{S}^2 Casimiroperator der Drehalgebra ist. Die Anwendung von (6.8.1) führt sofort auf

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm}, \quad (6.8.6)$$

$$[S_+, S_-] = 2S_z. \quad (6.8.7)$$

Weiter rechnet man unter erneuter Anwendung von (6.8.1) leicht nach, daß

$$\vec{S}^2 = S_+ S_- + S_z(S_z - 1) \quad (6.8.8)$$

gilt, und durch Anwendung von (6.8.7) folgt hieraus sofort auch

$$\vec{S}^2 = S_- S_+ + S_z(S_z + 1). \quad (6.8.9)$$

Jetzt bestimmen wir die Eigenwerte von \vec{S}^2 und S_z . Zunächst ist \vec{S}^2 ein positiver Operator, was sich unmittelbar aus der Selbstadjungiertheit der \vec{S} ergibt. Damit ist $\lambda \geq 0$. Weiter zeigen wir, daß S_z für vorgegebenes λ beschränkt ist:

$$\sigma^2 = \langle \lambda, \sigma | S_z^2 | \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \vec{S}^2 - S_x^2 - S_y^2 | \lambda, \sigma \rangle \leq \langle \lambda, \sigma | \vec{S}^2 | \lambda, \sigma \rangle = \lambda \Rightarrow \sigma^2 \leq \lambda. \quad (6.8.10)$$

Nun gilt wegen (6.8.6)

$$S_z S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle = \{ [S_z, S_{\pm}] + S_{\pm} \} | \lambda, \sigma \rangle = (\sigma \pm 1) S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle. \quad (6.8.11)$$

Das bedeutet, daß entweder $S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $\sigma \pm 1$ oder der Nullvektor ist.

Sei nun $s = \max\{\sigma\}$. Dann ist zwingend

$$S_+ | \lambda, s \rangle = 0, \quad (6.8.12)$$

und (6.8.9) ergibt

$$\lambda = s(s + 1). \quad (6.8.13)$$

Sei jetzt $-s' = \min\{\sigma\}$. Dann gilt wegen $S_- | \lambda, -s' \rangle = 0$ und (6.8.8) $\lambda = s'(s' + 1)$ und zusammen mit (6.8.13) und $-s' \leq s$ folgert man $s = s'$. Meist wird die Darstellung, die durch den Eigenwert von \vec{S}^2

6.8. Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe

definiert ist, durch s gekennzeichnet, und wir folgen diesem Brauch. Dabei ist der Eigenwert λ von \vec{S}^2 durch (6.8.13) gegeben. Neben der Masse ist also zu einer vollständigen Charakterisierung eines Elementarteilchens auch sein **Spin** s notwendig. Damit ist aber die Bestimmung der intrinsischen Eigenschaften eines freien Teilchens auch vollständig erfaßt, wie wir bei der Konstruktion der irreduziblen unitären Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe gezeigt haben.

Jetzt legen wir die Orthonormalbasis des irreduziblen Darstellungsraums durch die Gleichung

$$S_- |\lambda, \sigma\rangle = N(\sigma) |\lambda, \sigma - 1\rangle \quad (6.8.14)$$

sowie die Forderung $N(\sigma) \in \mathbb{R}$ und $N(\sigma) \geq 0$ fest. Dies ist eine Rekursionsformel, die aus $|\lambda, s\rangle$ die Berechnung der übrigen zur irreduziblen Darstellung gehörigen Eigenvektoren von S_z gestattet. Diese bricht wegen der Beschränktheit der Eigenvektoren mit Erreichen des minimalen Eigenwertes $-s$ von S_z ab. Es muß also

$$S_-^k |\lambda, s\rangle = C_k |\lambda, s - k\rangle \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{N} \quad (6.8.15)$$

sein. Aufgrund der obigen Überlegung, daß der minimale Eigenwert von S_z gerade $-s$ ist, folgt damit

$$\exists k \in \mathbb{N} : s - k = -s \Rightarrow \exists k \in \mathbb{N} : s = k/2. \quad (6.8.16)$$

Damit sind die möglichen Eigenwerte von \vec{S}^2 gemäß (6.8.13) durch $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$ bestimmt. Die möglichen Eigenwerte von S_z sind dann aufgrund der Irreduzibilität der Darstellung gemäß (6.8.15) durch $\sigma \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$ gegeben, woraus sich die Dimension der Darstellung zu $\dim \text{Eig}[\vec{S}^2, s(s+1)] = 2s+1$ ergibt. Da die möglichen Werte von s ganzzahlige Vielfache von $1/2$ sind, gibt es zu jeder Dimension genau eine Darstellung der Drehgruppe. Insbesondere gehört zu $s=0$ die triviale Darstellung, in der alle Drehimpulsoperatoren den einen Basisvektor des Darstellungsraums annullieren, so daß alle Drehungen $\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$ auf diesem Darstellungsraum durch die Identität dargestellt werden. Dabei ist aber für halbzahligen Spin die Besonderheit zu beachten, daß Drehungen um 2π nicht zur Identität führen. Betrachten wir nämlich eine Drehung um die z -Achse, ergibt sich

$$\exp(-i\phi S_z) |\lambda, \sigma\rangle = \exp(-i\phi \sigma) |\lambda, \sigma\rangle. \quad (6.8.17)$$

Für $\phi = 2\pi$ ergibt sich aber

$$\exp(-i2\pi\sigma) = (-1)^{2\sigma}. \quad (6.8.18)$$

Falls also σ halbzahlig ist, ergibt sich ein Faktor -1 in (6.8.17). Dies ist allerdings für die Quantentheorie kein Problem, solange sich *alle* möglichen Zustandsvektoren eines Teilchens bei Drehungen um 2π mit -1 multiplizieren. Wir werden im folgenden sehen, daß der Bahndrehimpulsoperator (6.7.31) nur ganzzahlige Darstellungen besitzt, d.h. \vec{L}^2 besitzt stets Eigenwerte $l(l+1)$ mit $l \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$. Bei einer Drehung um 2π liefert dieser also keinerlei Phasenfaktoren, so daß für ein einzelnes Elementarteilchen in der Tat alle Basisvektoren mit *demselben* Phasenfaktor (6.8.18) multipliziert werden.

Hat man es nun mit Systemen aus mehreren Teilchen verschiedenen Spins zu tun, folgt aus dieser Überlegung weiter, daß es keine Superpositionen von Zustandsvektoren für Teilchen mit ganzzahligem und halbzahligem Spin geben kann, ohne die Invarianz unter Drehungen zu verletzen. Solche „Verbote“ von Überlagerungen von Zuständen nennt man eine **Superauswahlregel**.

Wir werden weiter unten noch ausführlich erörtern, daß für $s = 1/2$ die Operatoren $\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$ genau den unitären $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ -Matrizen mit Determinante 1 entsprechen. Diese bilden eine Gruppe, die man in der Mathematik als $SU(2)$, d.h. **Spezielle Unitäre Gruppe in zwei Dimensionen**, bezeichnet. Die $SU(2)$ besitzt, wie wir soeben gesehen haben, dieselbe Liealgebra wie die eigentliche Drehgruppe $SO(3)$,

6. Galilei-Symmetrie

ordnet aber jeder endlichen Drehung nicht eine $SU(2)$ -Matrix, sondern zwei zu, nämlich $\pm \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$. Der Spin erzeugt also nicht Darstellungen der eigentlichen Drehgruppe $SO(3)$ sondern der $SU(2)$. Wie wir gesehen haben, spricht allerdings quantentheoretisch nichts gegen eine solche Realisierung der Drehungen auf den Zuständen, solange wir die oben beschriebene Spin-Superauswahlregel beachten. Es ist auch empirisch wohlbekannt, daß es Teilchen mit Spin $1/2$ gibt, wie z.B. Elektronen. Außerdem wurden bislang auch nie experimentelle Hinweise auf Überlagerungszustände von Teilchen mit ganzzahligen und halbzahligen Spin gefunden, so daß die Charakterisierung der Elementarteilchen durch die Galilei-Gruppe im empirischen Sinne vollständig ist, solange man relativistische Effekte vernachlässigen kann.

Jetzt verbleibt zur vollständigen Bestimmung der Darstellungen der Spin-Drehgruppe (also mathematisch gesprochen der $SU(2)$) noch die Normierungsfaktoren in (6.8.14) zu berechnen,

$$N^2(\sigma) = \langle \mathbf{S}_- \lambda, \sigma | \mathbf{S}_- \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \mathbf{S}_+ \mathbf{S}_- | \lambda, \sigma \rangle = \lambda - \sigma(\sigma - 1), \quad (6.8.19)$$

wobei wir von (6.8.8), (6.8.3) und (6.8.13) Gebrauch gemacht haben. Treffen wir die Phasenwahl so, daß $N(s)$ positiv reell wird, folgt daraus

$$\mathbf{S}_- | \lambda, \sigma \rangle = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma-1)} | \lambda, \sigma - 1 \rangle. \quad (6.8.20)$$

Schließlich ist die Wirkung von \mathbf{S}_+ auf die Basisvektoren zu bestimmen, denn dann wissen wir aus (6.8.4) auch, wie die Komponenten \vec{S}_x und \vec{S}_y auf die Basisvektoren $| \lambda, \sigma \rangle$ wirken. Definieren wir $N'(\sigma)$ durch

$$\mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = N'(\sigma) | \lambda, \sigma + 1 \rangle, \quad (6.8.21)$$

folgt

$$N'^2(\sigma) = \langle \mathbf{S}_+ \lambda, \sigma | \mathbf{S}_+ \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \mathbf{S}_- \mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = \lambda - \sigma(\sigma + 1) \quad (6.8.22)$$

wobei wir (6.8.9) angewendet haben. Die gesuchte Gleichung lautet also

$$\mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma+1)} | \lambda, \sigma + 1 \rangle. \quad (6.8.23)$$

6.9 Das Noether-Theorem (quantenmechanisch)

Als nächstes müssen wir die Verträglichkeit der Symmetrietransformation mit der Zeitentwicklung herleiten. Dies muß eine Bedingung an die Symmetrietransformationen ergeben, die unabhängig von der Wahl des Bildes der Zeitentwicklung ist (vgl. Abschnitt 2.10ff). Daher können wir diese Bedingung in einem beliebigen Bild der Zeitentwicklung herleiten. Wir wählen dazu das Schrödingerbild. Ein beliebiger Zustand genügt dann wegen $\mathbf{Y}_S = \mathbf{H}_S$, $\mathbf{X}_S = 0$ (Definition des Schrödingerbildes) der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} | \Psi_S, t \rangle = -i \mathbf{H}_S(t) | \Psi_S, t \rangle. \quad (6.9.1)$$

Nun sei $\mathbf{U}_g(t)$ eine beliebige (i.a. explizit zeitabhängige) unitäre Transformation. Sei dann

$$| \Psi'_S, t \rangle = \mathbf{U}_g(t) | \Psi_S, t \rangle. \quad (6.9.2)$$

Es ist klar, daß \mathbf{U} genau dann Symmetrietransformation ist, wenn auch $| \Psi'_S, t \rangle$ der Zeitentwicklung, die durch (6.9.1) definiert ist, genügt, denn \mathbf{U} ist definitionsgemäß dann Symmetrietransformation, wenn

6.10. Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s

der Zustand $|\Psi'_S, t\rangle$ stets äquivalent zum Zustand $|\Psi_S, t\rangle$ ist. Durch Ableitung von (6.9.2) nach der Zeit finden wir unter Verwendung von (6.9.1) und der Annahme, daß diese Gleichung auch für $|\Psi'_S, t\rangle$ mit demselben Hamilton-Operator $\mathbf{H}_s(t)$ zutrifft, daß \mathbf{U}_g genau dann Symmetrietransformation ist, wenn

$$\frac{1}{i} [\mathbf{U}_g, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{U}_g}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \dot{\mathbf{U}}_g := 0 \quad (6.9.3)$$

ist, wobei $\dot{\mathbf{U}}_g$ die physikalische Zeitableitung von \mathbf{U} bedeutet. Da diese Gleichung bildunabhängig ist, vgl. (2.10.13), stellt sie die gesuchte Symmetriebedingung dar.

Es ist ferner klar, daß dieselben Betrachtungen auch auf die infinitesimalen Erzeugenden der Einparameteruntergruppen der Symmetriegruppe zutreffen. Ist nämlich α der entsprechende Parameter der Einparameteruntergruppe und \mathbf{g} der dazugehörige Generator, so gilt (im hier betrachteten Schrödingerbild)

$$\mathbf{U}_g(t) = \exp[-i\alpha \mathbf{g}_S(t)], \quad (6.9.4)$$

und somit

$$\mathbf{g}_S(t) = \left. \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{U}_g(t) \right|_{\alpha=0}. \quad (6.9.5)$$

Leiten wir dann Gleichung (6.9.3) nach α ab und beachten, daß im zweiten Term auf der linken Seite die Ableitung nach α mit der expliziten Zeitableitung vertauscht werden kann, ergibt sich die bildunabhängige Gleichung

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{1}{i} [\mathbf{g}, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = 0. \quad (6.9.6)$$

Dies ist aber das quantentheoretische Pendant zum klassischen Noethertheorem, besagt doch (6.9.6), daß jeder Generator der Einparametersymmetriegruppe \mathbf{g} notwendig eine Erhaltungsgröße ist, und umgekehrt ist jede Erhaltungsgröße auch der Generator ein Einparametersymmetriegruppe des betrachteten Systems.

6.10 Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s

Nun können wir eine vollständige Beschreibung für ein freies Teilchen mit beliebigem Spin angeben. Die irreduzible Darstellung des Spins durch die Matrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ aus Abschnitt 6.7 ist nämlich vollständig durch die Spinbetragsquantenzahl s definiert.

Zunächst folgt aus dem im vorigen Abschnitt hergeleiteten Noether-Theorem und der Kommutatorrelation (6.6.40), daß die Erzeugenden \mathbf{K}_j für Boosts explizit zeitabhängig sein müssen, denn es muß

$$\dot{\mathbf{K}}_j = \frac{1}{i} [\mathbf{K}_j, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{K}_j}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \mathbf{p}_j + \left(\frac{\partial \mathbf{K}_j}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.10.1)$$

Nun folgt aber aus (6.6.37)

$$\dot{\mathbf{P}}_j = \left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.10.2)$$

und damit durch Integration von (6.10.1)

$$\mathbf{K}_j = m\mathbf{X}_j - \mathbf{P}_j t, \quad (6.10.3)$$

6. Galilei-Symmetrie

wobei \mathbf{X}_j entsprechend dem Korrespondenzprinzip mit der klassischen Mechanik die *nicht* explizit zeitabhängigen **Ortskomponentenoperatoren** sein müssen. In der Tat folgt aus (6.6.39) unter Verwendung von (6.6.36), daß diese Operatoren die **Heisenberg-Algebra** für Orts- und Impulskomponenten

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k] = i\delta_{jk} \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \quad (6.10.4)$$

erfüllen. Wir haben bereits in Abschnitt 2.8 gezeigt, wie man mit diesen Kommutatorrelationen zu der aus QM 1 bekannten Darstellung der Quantentheorie mit Impuls- bzw. Ortswellenfunktionen gelangt. Für ein Teilchen mit Spin $s \neq 0$ kommen nur noch die $(2s + 1)$ Spinfreiheitsgrade hinzu. So ergibt sich z.B. für die Ortswellenfunktion eine $(2s + 1)$ -dimensionale Größe

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle, \quad (6.10.5)$$

wobei wir hier wieder im **Schrödingerbild** der Zeitentwicklung rechnen. Da der Spinoperator auch mit dem Ortsoperator vertauscht, können wir zugleich die drei Ortskomponenten und die z-Komponente des Spins messen. Die entsprechenden verallgemeinerten Eigenvektoren bezeichnen wir mit $|\vec{x}, \sigma\rangle$. Wie in Abschnitt 2.8 zeigt man sofort (*Übung!*), daß

$$\langle \vec{x}, \sigma | \vec{p}, \sigma' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \delta_{\sigma\sigma'} \quad (6.10.6)$$

ist. Die Wirkung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung ergibt sich sofort aus

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} \psi_\sigma(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x}, \sigma | \hat{\mathbf{P}} | \psi, t \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \vec{p} \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= -i\vec{\nabla}_{\vec{x}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \vec{p} \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= -i\vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi_\sigma(t, \vec{x}). \end{aligned} \quad (6.10.7)$$

Aus (6.7.12) folgt daraus sofort

$$\hat{H} \psi_\sigma(t, \vec{x}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi_\sigma(t, \vec{x}) = -\frac{\Delta_{\vec{x}}}{2m} \psi_\sigma(t, \vec{x}). \quad (6.10.8)$$

Als letztes Beispiel für den hier aus der Galileisymmetrie hergeleiteten Bra-Ket-Formalismus der nicht-relativistischen Quantentheorie für ein Teilchen mit Spin wollen wir die Wirkung einer **Drehung** auf die Ortswellenfunktion finden. Dazu benötigen wir lediglich (6.7.23). Sei $\psi'_\sigma(t, \vec{x})$ die Wellenfunktion für ein um $\vec{\phi}$ gedrehtes System. Dann gilt

$$\begin{aligned} \psi'_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \vec{p}, \sigma | \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \sum_{\sigma'} \langle D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\vec{\phi}) \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\vec{\phi}) \langle \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' | \psi, t \rangle. \end{aligned} \quad (6.10.9)$$

6.10. Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s

Dabei haben wir von der Unitarität der Drehmatrizen Gebrauch gemacht, die zu $D_{\sigma'\sigma}^{-1} = D_{\sigma'\sigma}^\dagger = D_{\sigma\sigma'}^*$ führt. Nun substituieren wir $\vec{p} = \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}'$ und verwenden wieder die Orthogonalität von $\hat{R}(\vec{\phi})$, die zu

$$\vec{p} \cdot \vec{x} = [\hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}'] \cdot \vec{x} = \vec{p}' \cdot [\hat{R}^\dagger(\vec{\phi})\vec{x}] = \vec{p}' \cdot \hat{R}^{-1}(\vec{\phi})\vec{x} \quad (6.10.10)$$

führt. Dies in (6.10.9) eingesetzt liefert (unter Verwendung von $\det \hat{R} = 1$)

$$\psi'_\sigma(t, \vec{x}) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\vec{\phi}) \psi_{\sigma'}(t, \hat{R}^{-1}\vec{x}). \quad (6.10.11)$$

Man nennt eine mehrkomponentige Feldgröße ψ_σ , die sich unter Drehungen gemäß (6.10.11) verhält, ein **Spinorfeld** zur Darstellung $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$. Das Spinorfeld zu $s = 0$ heißt dann entsprechend auch Skalarfeld, zu $s = 1$ Vektorfeld usw. Zur besseren Unterscheidung von den in der relativistischen Quantentheorie auftretenden Dirac-Spinoren bezeichnet man die hier in der nichtrelativistischen Quantentheorie vorkommenden Größen zum Spin $s = 1/2$ auch als **Weyl-Spinoren**.

Die Gl. (6.10.11) läßt sich freilich auch aus der Formel für infinitesimale Drehungen, angewandt auf die Wellenfunktion bestimmen, denn es ist

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} = -i\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}} + \hat{\vec{S}}, \quad (6.10.12)$$

wobei $\hat{\vec{S}}$ die auf die Spinorkomponenten ψ_σ wirkenden $(2s + 1) \times (2s + 1)$ -Matrizen sind. Bezeichnen wir mit $\psi(t, \vec{x})$ also die $2s + 1$ -komponentige Spinorwellenfunktion, so ist die Änderung der Wellenfunktion unter einer infinitesimalen Drehung bis auf Größen zweiter Ordnung in $\delta\vec{\phi} = \vec{n}\delta\phi$ offenbar durch

$$\delta\psi(t, \vec{x}) = i\delta\phi\vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}\psi(t, \vec{x}) = \delta\phi\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}} + \hat{\vec{S}})\psi(t, \vec{x}) = \delta\phi\vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}\psi(t, \vec{x} + \delta\phi\vec{n} \times \vec{x}) \quad (6.10.13)$$

gegeben. Dabei haben wir die Operatoridentität

$$\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}}) = (\vec{n} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} \quad (6.10.14)$$

verwendet.

Etwas mehr Vorsicht ist bei der Betrachtung von **Galilei-Boosts** angebracht. Da die Generatoren $\vec{\mathbf{K}}$ explizit zeitabhängig sind, vertauschen sie nämlich nicht mit dem Hamiltonoperator (vgl. (6.6.40)). Die Spinorwellenfunktion im geboosteten Bezugssystem ist durch

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, \sigma | \psi, t \rangle \quad (6.10.15)$$

gegeben. Im hier verwendeten Schrödingerbild der Zeitentwicklung gilt

$$|\psi, t\rangle = \exp(-it\mathbf{H})|\psi, 0\rangle. \quad (6.10.16)$$

Der Zustand im geboosteten Bezugssystem ist derjenige, für den zur Anfangszeit $t = 0$

$$|\psi', 0\rangle = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}})|\psi, 0\rangle \quad (6.10.17)$$

gilt. Die Zeitentwicklung erfolgt dann mit dem ursprünglichen Hamiltonoperator

$$|\psi', t\rangle = \exp(-it\mathbf{H})|\psi', 0\rangle = \exp(-it\mathbf{H})\exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}})|\psi, 0\rangle. \quad (6.10.18)$$

Um wieder (6.7.13) anwenden zu können, schieben wir wieder die Entwicklung des Einsoperators nach Impuls-Spin-Eigenzuständen ein:

$$\begin{aligned}
 \psi'_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \langle \vec{x}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) \exp(-i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}}) | \vec{p}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(6.7.13)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \langle \vec{x}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) | \vec{p} - m\vec{w}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(6.7.12)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \exp\left[-\frac{i(\vec{p} - m\vec{w})^2}{2m} t\right] \langle \vec{x}, \sigma | \vec{p} - m\vec{w}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(6.10.6)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[i\vec{x} \cdot (\vec{p} - m\vec{w}) - i\frac{(\vec{p} - m\vec{w})^2}{2m} t\right] \langle \vec{p}, \sigma | \psi, 0 \rangle \\
 &= \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[i\vec{p} \cdot (\vec{x} + \vec{w}t) - i\frac{\vec{p}^2}{2m} t\right] \\
 &\quad \times \langle \vec{p}, \sigma | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(6.7.12)}{=} \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp[i\vec{p} \cdot (\vec{x} + \vec{w}t)] \\
 &\quad \times \langle \vec{p}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(6.10.5)}{=} \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \psi_\sigma(t, \vec{x} + \vec{w}t).
 \end{aligned} \tag{6.10.19}$$

Die Wellenfunktion verhält sich also nicht einfach wie ein Skalar unter Galilei-Boosts, wie man naiverweise erwarten würde, sondern erhält einen zusätzlichen Phasenfaktor. Wieder ergibt sich die Superwahlregel, daß Zustände zu Teilchen mit verschiedener Masse nicht superponiert werden dürfen, wenn die Theorie Galilei-invariant sein soll. Das Auftreten dieses Phasenfaktors ist auf die Rolle der Masse als nichttriviale Zentralladung zurückzuführen.

6.11 Die Pauli-Gleichung

In diesem Abschnitt behandeln wir als ein konkretes Beispiel für Teilchen mit Spin ein Teilchen mit Spin 1/2. Dies ist nicht nur die einfachste Realisierung eines Teilchens mit Spin, sondern es ist auch praktisch äußerst wichtig, da alle (bislang bekannten) Elementarteilchen, die die „Materie“ konstituieren, solche Spin-1/2-Teilchen sind⁶. Freilich beziehen sich alle Betrachtungen in diesem Abschnitt auf den Fall, daß die nichtrelativistische Beschreibung der Teilchen gerechtfertigt ist. Das ist allerdings für einen durchaus großen Anwendungsbereich der Fall. So können die Atome mit nicht zu großen Ladungszahlen durch die nichtrelativistische quantenmechanische Beschreibung der Bewegung der Elektronen um den Atomkern sehr gut beschrieben werden. Entsprechend wird auch die Molekül- und Festkörperphysik durch die nichtrelativistische Vielteilchenphysik, auf die wir im nächsten Kapitel ausführlich zu sprechen kommen, abgedeckt.

Wir wollen nun den Hamilton-Operator für ein Teilchen mit Spin 1/2, das sich in einem äußeren **elektromagnetischen Feld** \vec{E}, \vec{B} bewegt, finden. Dazu bedienen wir uns des Hilfsmittels der kanonischen Quantisierung, indem wir zunächst die Situation im Rahmen der klassischen Mechanik betrachten.

⁶Das sind die Leptonen (Elektron, Muon, τ) und Quarks (up, down, charm, strange, top, bottom).

6.11. Die Pauli-Gleichung

Um die Lagrangefunktion aufstellen zu können, benötigen wir zunächst die Darstellung des elektromagnetischen Feldes durch die elektromagnetischen Potentiale:

$$\vec{E}(t, \vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi(t, \vec{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(t, \vec{x}), \quad \vec{B}(t, \vec{x}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(t, \vec{x}). \quad (6.11.1)$$

Dabei sind die Potentiale Φ und \vec{A} nur bis auf eine **Eichtransformation** bestimmt, denn für ein beliebiges skalares Feld χ ergeben

$$\Phi'(t, \vec{x}) = \Phi(t, \vec{x}) - \partial_t \chi(t, \vec{x}), \quad \vec{A}'(t, \vec{x}) = \vec{A}(t, \vec{x}) + \vec{\nabla} \chi(t, \vec{x}) \quad (6.11.2)$$

offensichtlich dieselben Felder \vec{E} und \vec{B} .

Die Lagrangefunktion für die (nichtrelativistische) Bewegung eines geladenen Punktteilchens im elektromagnetischen Feld lautet dann

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - q[\Phi(t, \vec{x}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(t, \vec{x})]. \quad (6.11.3)$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus den Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = 0. \quad (6.11.4)$$

Bildet man die Ableitungen, erhält man unter Verwendung von (6.11.1) in der Tat die richtige Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\vec{x}} = q[\vec{E}(t, \vec{x}) + \dot{\vec{x}} \times \vec{B}(t, \vec{x})]. \quad (6.11.5)$$

Wir gehen nun in der üblichen Weise zum Hamilton-Formalismus über, indem wir zunächst die **kanonischen Impulse** berechnen:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m\dot{\vec{x}} + q\vec{A}(t, \vec{x}). \quad (6.11.6)$$

Wir bemerken, daß dies *nicht* mit dem mechanischen Impuls $m\dot{\vec{x}}$ übereinstimmt. Die Hamilton-Funktion ergibt sich nach kurzer Rechnung (*Übung!*) zu

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + q\Phi(t, \vec{x}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}(t, \vec{x})]^2 + q\Phi(t, \vec{x}). \quad (6.11.7)$$

Wir erhalten also die Hamiltonfunktion aus dem Ausdruck für die Energie eines freien Teilchens, indem wir $\dot{\vec{x}}$ gemäß (6.11.6) durch den kanonischen Impuls ausdrücken und die potentielle Energie $q\Phi$ addieren. Wir werden nun in ähnlicher Weise in der Quantentheorie vorgehen. Es ist dabei klar, daß wir den quantenmechanischen Hamilton-Operator nicht eindeutig aus der klassischen Hamiltonfunktion herleiten können. Es handelt sich bei der kanonischen Quantisierung lediglich um ein heuristisches Verfahren, welches letztlich nur durch den Erfolg in der Beschreibung der in Experimenten beobachteten Phänomene zu rechtfertigen ist. Später, bei der Behandlung der relativistischen Quantenfeldtheorie, werden wir eine überzeugendere Begründung für den nun herzuleitenden Hamilton-Operator finden.

Wir betrachten Teilchen mit Spin 1/2 genauer. Es ist gemäß Abschnitt 6.8 klar, daß die Eigenwerte des Operator S_z , die Werte $\sigma \in \{-1/2, +1/2\}$ annehmen können. Als Orthonormalbasis für die Spinzustände wählen wir entsprechend $|\sigma = 1/2\rangle$ und $|\sigma = -1/2\rangle$ (in dieser in der Literatur üblichen Reihenfolge). Bzgl. dieser Basis ergeben sich die Spin-Matrizen wie folgt. Zunächst gilt

$$S_z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle \Rightarrow \hat{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (6.11.8)$$

6. Galilei-Symmetrie

Die übrigen Komponenten finden wir aus (6.8.20)

$$\mathbf{S}_- |\sigma = 1/2\rangle = |\sigma = -1/2\rangle, \quad \mathbf{S}_- |\sigma = -1/2\rangle = 0 \quad (6.11.9)$$

und damit

$$\hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \hat{S}_-^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.11.10)$$

Aus (6.8.4) erhalten wir schließlich die übrigen Spinmatrizen

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x, \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (6.11.11)$$

Die Matrizen $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ und $\hat{\sigma}_z$ heißen **Pauli-Matrizen**, und wir werden nun einige nützliche Rechenregeln herleiten. Wegen der Kommutatorrelationen (6.8.1) für die Spinoperatoren, die natürlicherweise auch für die Spinmatrizen gelten, folgt für die Pauli-Matrizen unmittelbar

$$[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\epsilon_{ljk} \hat{\sigma}_l. \quad (6.11.12)$$

Durch direktes Nachrechnen (*Übung*) findet man die nicht minder wichtigen **Antikommutatorregeln**

$$\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} = 2\delta_{jk} \mathbb{1}_2. \quad (6.11.13)$$

Kommen wir nun zum Hamilton-Operator. Entsprechend unserem oben besprochenen heuristischen Vorgehen schreiben wir zunächst den Hamilton-Operator des freien Teilchens in der Form

$$\mathbf{H}_{\text{frei}} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{2m} (\hat{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{p}})(\hat{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{p}}). \quad (6.11.14)$$

Dabei haben wir benutzt, daß den Kommutatorrelationen (6.6.36) gemäß die Operatoren für die Impulskomponenten vertauschen und demnach der letzte Umformungsschritt sofort aus (6.11.13) folgt. Wir gehen nun entsprechend dem oben bei der analogen Situation der klassischen Mechanik besprochenen Prinzip der minimalen Substitution im Sinne der kanonischen Quantisierung vor, um den Hamilton-Operator für die Bewegung des Teilchens im elektromagnetischen Feld zu erhalten. Wie wir sogleich sehen werden, ist es dabei entscheidend, die etwas umständlich erscheinende Formulierung mit den Pauli-Matrizen in (6.11.14) zu verwenden und nicht direkt die übliche Form (welche für freie Teilchen selbstverständlich identisch ist). Wir erhalten dann den Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} [\hat{\sigma} \cdot (\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathbf{A}})] [\hat{\sigma} \cdot (\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathbf{A}})] + q\Phi. \quad (6.11.15)$$

Um diesen Hamilton-Operator genauer zu analysieren, bietet es sich an, in der Ortsdarstellung zu arbeiten. Dabei fassen wir die Wellenfunktionen

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, \sigma | \Psi \rangle \quad (6.11.16)$$

zu einem zweikomponenten **Weyl-Spinor**

$$\psi(t, \vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(t, \vec{x}) \\ \psi_{-1/2}(t, \vec{x}) \end{pmatrix} \quad (6.11.17)$$

6.11. Die Pauli-Gleichung

zusammen. Auf diesen Wellenfunktionen operieren dann sowohl die aus QM I bekannten Differentialoperatoren als auch 2×2 -Matrizen wie die Pauli-Matrizen. Der Hamilton-Operator (6.11.15) lautet in der Ortsdarstellung offenbar

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})] [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})] + q\hat{\Phi}. \quad (6.11.18)$$

Um den physikalischen Gehalt dieses Hamilton-Operators zu analysieren, multiplizieren wir zunächst den ersten Term (6.11.15) aus:

$$[\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})] [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})] = (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}) - q[(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})] + q^2(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}). \quad (6.11.19)$$

Dies läßt sich noch weiter vereinfachen. Da die Impulskomponenten miteinander kommutieren, gilt

$$(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}) = \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k p_j p_k = \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k \} p_j p_k = \delta_{jk} p_j p_k = \vec{p}^2, \quad (6.11.20)$$

wobei wir (6.11.13) verwendet haben. Da das Vektorpotential eine reine Funktion des Ortsoperators ist, vertauschen auch dessen Komponenten, so daß dieselbe Rechnung

$$(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}) = \vec{A}^2 \quad (6.11.21)$$

ergibt. Wenden wir uns nun dem mittleren Term in (6.11.19) zu. Hier ist Vorsicht geboten, denn die Impulskomponenten vertauschen nicht mit den Komponenten des ortsabhängigen Vektorpotentials. Hier ist es am einfachsten, die Wirkung des entsprechenden Differentialoperators auf die Wellenfunktion zu untersuchen:

$$\begin{aligned} [(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})]\psi &= -i\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k (\partial_j A_k + A_j \partial_k)\psi \\ &= -i\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k [(\partial_j A_k)\psi + A_k \partial_j \psi + A_j \partial_k \psi]. \end{aligned} \quad (6.11.22)$$

Jetzt schreiben wir das Produkt der Pauli-Matrizen mit Hilfe von (6.11.12) und (6.11.13) wie folgt um:

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \frac{1}{2} \left[\{ \hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k \} + [\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] \right] = \delta_{jk} \mathbb{1}_2 + i\epsilon_{ljk} \hat{\sigma}_l. \quad (6.11.23)$$

Dies in (6.11.22) eingesetzt und ein wenig umgeformt, ergibt

$$[(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})]\psi = (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}})\psi + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B})\psi. \quad (6.11.24)$$

Dabei haben wir $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$ gemäß (6.11.1) verwendet. Fassen wir nun (6.11.20-6.11.24) zu dem Hamilton-Operator (6.11.18) zusammen, finden wir schließlich

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \frac{q}{2m} g_s (\vec{S} \cdot \vec{B}) + q\Phi \quad \text{mit} \quad g_s = 2, \quad (6.11.25)$$

wobei wir $\vec{\sigma} = 2\vec{S}$ geschrieben haben.

Daraus ergibt sich, daß ein elementares Teilchen (z.B. ein Elektron) bei minimaler Substitution ein mit dem Spin des Teilchens verknüpft magnetisches Moment besitzt, das durch den Operator

$$\vec{\mu} = \mu_B g_s \vec{S} \quad \text{mit} \quad \mu_B = \frac{e}{2m_e} = 5.7883817555(79) \cdot 10^{-11} \frac{\text{MeV}}{\text{T}}, \quad g_s = 2 \quad (\text{SI-Einheiten}) \quad (6.11.26)$$

6. Galilei-Symmetrie

repräsentiert wird (Zahlenwert aus $[N^+ 10]$). Es ist dabei zu beachten, daß für ein Elektron der negative Wert $q_e = -e$ mit der Elementarladung

$$e = 1.602176487(40) \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (\text{SI-Einheiten}) \quad (6.11.27)$$

zu verwenden ist. In unseren natürlichen Einheiten, wo das modifizierte Wirkungsquantum $\hbar = 1$ und die Lichtgeschwindigkeit $c = 1$ gesetzt sind, und in den ebenfalls in diesem Skript verwendeten **Heaviside-Lorentz-Einheiten** (HL-Einheiten) der Elektrodynamik ist e eine dimensionslose Variable, die sich aus der **Sommerfeldschen Feinstrukturkonstante**

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi} = \frac{1}{137.035999679(94)} \quad (\text{HL-Einheiten}) \quad (6.11.28)$$

ergibt. In SI-Einheiten ist

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \quad (\text{SI-Einheiten}). \quad (6.11.29)$$

Man kann übrigens leicht zwischen natürlichen Einheiten und SI-Einheiten hin- und herrechnen, indem man den Konversionsfaktor

$$\hbar c = 197.3269631(49) \text{ MeV fm} \quad (6.11.30)$$

verwendet. Außerdem ist in HL-Einheiten $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ zu setzen.

Der Parameter g_s in (6.11.25) heißt **Gyrofaktor** und ist (ähnlich wie die elektrische Ladung) eine für das Teilchen charakteristische Größe. Für Elementarteilchen ergibt sich aus dem Prinzip der minimalen Kopplung an elektromagnetische Felder der Gyrofaktor 2, wobei dies allerdings in der hier gezeigten nichtrelativistischen Behandlung nicht allzu zwingend erscheint, weil wir ja die minimale Kopplung in der spezifischen Weise mit den in den Hamiltonoperator freier Teilchen eingeschobenen Pauli-Matrizen (6.11.14) vornehmen mußten. Würden wir die minimale Kopplung einfach mit dem Hamiltonoperator $\vec{p}^2/(2m)$ vornehmen, erhielten wir ein verschwindendes magnetisches Moment, also $g_s = 0$. In der relativistischen Beschreibung von Spin-1/2-Teilchen vermöge der **Dirac-Gleichung** führt das Prinzip der minimalen Kopplung zwingend auf $g_s = 2$ für elementare Teilchen. Dies war (neben der Vorhersage der Existenz von Antiteilchen) einer der größten Erfolge der Dirac-Gleichung.

Man bezeichnet die in (6.11.26) definierte Größe μ_B als das **Bohrsche Magneton**. Es wurde von Bohr in seinem Atommodell, basierend auf der von ihm entwickelten „alten Quantentheorie“, bei dem Versuch, die Aufspaltung der Spektrallinien bei Atomen in magnetischen Feldern zu erklären, (**Zeeman-Effekt**) eingeführt. Während die klassische Elektronentheorie von Lorentz eine kontinuierliche Aufspaltung der Spektrallinien ergab, konnte Bohr den sog. **anomalen Zeemaneffekt** erklären, der auf der Quantelung des Bahndrehimpulses beruht. Dies werden wir gleich noch näher ausführen. Die allerdings ebenfalls beobachtete Aufspaltung in nur 2 (statt mindestens 3 aufgrund der Quantelung des Bahndrehimpulses) konnte nur durch Einführung des Elektronenspins erklärt werden, die schließlich durch Goudsmith und Uhlenbeck erfolgte, nachdem Kramers von Pauli überzeugt worden war, diese Idee besser nicht zu veröffentlichen. Der Hamilton-Operator (6.11.25) wurde schließlich von Pauli vorgeschlagen, nachdem er schließlich doch von der Korrektheit des Spins zur Spinquantenzahl 1/2 überzeugt werden konnte. Die Schrödinger-Gleichung mit dem Hamilton-Operator (6.11.25) für die zweikomponentige Weyl-Spinor-Wellenfunktion,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{A})^2 \psi(t, \vec{x}) - g_s \mu_B \hat{S} \cdot \vec{B}(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) + q\Phi(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) \quad (6.11.31)$$

heißt daher **Pauli-Gleichung**.

Wir bemerken noch, daß sich bei der sehr genau möglichen Vermessung des magnetischen Moments des Elektrons eine kleine Abweichung vom Wert $g_e = 2$ für ein elementares Teilchen ergibt. Der neueste Wert für diese Abweichung beträgt gemäß [N⁺10]

$$\frac{g_e - 2}{2} = (1159.65218073 \pm 0.00000028) \cdot 10^{-6}. \quad (6.11.32)$$

Theoretisch sind diese winzigen Abweichungen durch sich in der **Quantenelektrodynamik** ergebende Korrekturen in höherer Ordnung der Störungstheorie erklärbar.

Die Hadronen, allen voran die Kernbausteine Proton und Neutron, weisen allerdings deutlich von 2 verschiedene Gyrofactoren auf. Dies weist darauf hin, daß sie keine elementaren Teilchen sind, sondern ein komplizierter Bindungszustand aus drei Valenzquarks aufgrund der **starken Wechselwirkung**. Die Werte für die Gyrofactoren sind (wieder cf. [N⁺10])

$$g_p = 2.792847356 \pm 0.000000023, \quad g_n = -1.9130427 \pm 0.00000005. \quad (6.11.33)$$

Freilich beziehen sich diese Gyrofactoren auf das **Bohrsche Kernmagneton**

$$\mu_B^{(\text{nucl})} = \frac{e}{2m_p} = 3.1524512326(45) \cdot 10^{-14} \frac{\text{MeV}}{\text{T}} \quad (\text{SI-Einheiten}). \quad (6.11.34)$$

Der Gyrofaktor $g_s \simeq 2$, der sich hier aus der minimalen Kopplung in der spezifischen Form des freien Hamilton-Operators mit σ -Matrizen ergeben hat, folgt (allerdings eindeutig!) auch aus der relativistischen **Dirac-Gleichung**, auf die wir in einem späteren Kapitel genauer eingehen werden.

In der Atomphysik (insbesondere bei der Behandlung des Wasserstoffatoms in der Näherung, wo das Proton als einfaches Coulomb-Feld behandelt wird) ist es bei der Berechnung der Energieeigenzustände notwendig, den Symmetrien des Problems entsprechend die Pauligleichung in räumliche Kugelkoordinaten umzuschreiben, denn man wird simultane Eigenzustände von \mathbf{H} , \vec{J}^2 , J_z und S_z bzw. \mathbf{H} , \vec{J}^2 , \vec{L}^2 und L_z und S_z verwenden (bei ausgeschaltetem äußeren Magnetfeld). Den Zeeman-Effekt kann man dann für schwache Felder störungstheoretisch behandeln. Wir gehen darauf in dieser Vorlesung nicht näher ein. Diese Probleme werden ausführlich in vielen Quantenmechanik-Lehrbüchern behandelt (z.B. [LL77]).

Der Vollständigkeit halber schreiben wir noch den Hamilton-Operator für ein **konstantes Magnetfeld** etwas um. Offenbar ist das Vektorpotential durch

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{x} \times \vec{B} \quad \text{für} \quad \vec{B} = \text{const} \quad (6.11.35)$$

gegeben, denn es gilt in der Tat

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_j = \epsilon_{jkl} \partial_k A_l = -\frac{1}{2} \epsilon_{jkl} \epsilon_{lmn} \partial_k (x_m B_n) = -\frac{\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}}{2} B_n \delta_{km} = B_j. \quad (6.11.36)$$

Der erste Term in (6.11.25) lautet also

$$(\vec{p} - q\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - q(\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + q^2\vec{A}^2 = \vec{p}^2 - q\vec{B} \cdot \vec{L} + q^2\vec{A}^2. \quad (6.11.37)$$

6. Galilei-Symmetrie

Dabei haben wir verwendet, daß $[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k] = 0$ für $j \neq k$ und daher $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{p}} = -\vec{\mathbf{p}} \times \vec{\mathbf{x}}$ ist. Setzen wir dies in (6.11.25) ein, finden wir

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu_B \vec{\mathbf{B}} \cdot (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) + \frac{q^2}{2m} \vec{\mathbf{A}}^2 + q\Phi \quad \text{für} \quad \vec{\mathbf{A}} = -\frac{1}{2} \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{B}}, \quad \vec{\mathbf{B}} = \text{const.} \quad (6.11.38)$$

Man kann aufgrund des zweiten Terms

$$\vec{\mathbf{M}} = \mu_B (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \quad (6.11.39)$$

als Operator für das **totale magnetische Moment** des Teilchens interpretieren. Dabei entspricht der Bahnanteil im Sinne des Korrespondenzprinzips der entsprechenden klassischen Größe für ein auf einer Kreisbahn laufendes geladenes Punktteilchen (*Übung*). Der Spinanteil weist jedoch den zusätzlichen Gyrofaktor g_s auf und besitzt kein Analogon in der klassischen Physik eines geladenen Punktteilchens. Wir betrachten schließlich noch die **Eichinvarianz** der Pauligleichung, d.h. die Unabhängigkeit der physikalischen Bedeutung der Zeitentwicklung der Wellenfunktion von der Wahl der Eichung der elektromagnetischen Potentiale. Dazu machen wir den Ansatz

$$\psi'(t, \vec{\mathbf{x}}) = \exp[i\alpha(t, \vec{\mathbf{x}})]\psi(t, \vec{\mathbf{x}}) \quad (6.11.40)$$

für die eichtransformierte Wellenfunktion, denn ein reiner Phasenfaktor ändert nichts am physikalischen Gehalt der Wellenfunktion. In der Tat gilt dann für die linke Seite der Pauli-Gleichung (6.11.31)

$$i \frac{\partial \psi'}{\partial t} = i \exp(i\alpha) \left(i \frac{\partial \alpha}{\partial t} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right). \quad (6.11.41)$$

Zur Auswertung der rechten Seite betrachten wir zunächst

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')\psi' = \exp(i\alpha) [\vec{\nabla}\psi + i(\vec{\nabla}\alpha)\psi - iq(\vec{\mathbf{A}} + \vec{\nabla}\chi)\psi]. \quad (6.11.42)$$

Setzen wir nun

$$\alpha = q\chi, \quad (6.11.43)$$

so folgt

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')\psi' = \exp(iq\chi)(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})\psi. \quad (6.11.44)$$

Wendet man darauf nochmals diesen Operator an, folgt

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')^2 \psi' = \exp(iq\chi)(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})^2 \psi. \quad (6.11.45)$$

Damit folgt zusammen mit (6.11.41) und (6.11.43)

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= \exp(iq\chi) \left(i \frac{\partial \psi}{\partial t} - q \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi \right) = -(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')^2 \psi' - \mu_B g_s \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \psi' + q\Phi' \psi' \\ &= \exp(iq\chi) \left[-\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})^2 \psi + \left(\Phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi - \mu_B g_s \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \psi \right]. \end{aligned} \quad (6.11.46)$$

Kürzen des gemeinsamen Phasenfaktors ergibt also, daß aus der Pauligleichung für ψ' mit den elektromagnetischen Potentialen Φ' und $\vec{\mathbf{A}}'$ die Pauligleichung für ψ mit den ursprünglichen elektromagnetischen Potentialen Φ und $\vec{\mathbf{A}}$ folgt. Die Pauli-Gleichung ist also invariant unter der **lokalen Eichtransformation**

$$\begin{aligned} \psi'(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \exp[iq\chi(t, \vec{\mathbf{x}})]\psi(t, \vec{\mathbf{x}}), \\ \Phi'(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \Phi(t, \vec{\mathbf{x}}) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(t, \vec{\mathbf{x}}), \quad \vec{\mathbf{A}}'(t, \vec{\mathbf{x}}) = \vec{\mathbf{A}}(t, \vec{\mathbf{x}}) + \vec{\nabla} \chi(t, \vec{\mathbf{x}}). \end{aligned} \quad (6.11.47)$$

Dabei ist χ ein beliebiges skalares Feld. Wir werden in einem späteren Kapitel noch genau auf die Eichinvarianz der Elektrodynamik zurückkommen, die sich dort als notwendige Folgerung aus der Symmetrie der speziell relativistischen Raumzeit (**Minkowski-Raum**) unter **Poincaré-Transformationen** ergeben wird.

Eine interessante Folgerung aus dem Transformationsverhalten (6.11.47) ist, daß es in Theorien mit mehreren Teilchensorten keine Überlagerungen von Zustandsvektoren (bzw. Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung) zu Teilchen mit verschiedener Ladung geben darf, weil für solche Überlagerungen die Theorie nicht mehr eichinvariant wäre, weil dann die Phasenfaktoren für die verschiedenen Wellenfunktionen verschieden wären, denn diese enthält explizit die jeweilige Ladung der Teilchen. Dieses Verbot von Superpositionen heißt **Ladungs-Superauswahlregel**.

Wir leiten schließlich noch die Erhaltung der Norm der Wellenfunktion unter Zeitentwicklungen aus der Pauli-Gleichung her, die im abstrakten Bra-Ket-Formalismus (z.B. im Schrödingerbild) schon aus der Selbstadjungiertheit von \mathbf{H} folgt. Allerdings ergibt sich bei der Herleitung für die Wellenfunktion der **Wahrscheinlichkeitsstrom** für Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld, der uns im nächsten Kapitel noch nützlich sein wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messung eines Teilchens am Ort \vec{x} mit Spin-z-Komponente $\sigma = \pm 1/2$ ist nach dem Bornschen Postulat durch

$$P(t, \vec{x}, \sigma) = |\langle \vec{x}, \sigma | \psi(t) \rangle|^2 = |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 \quad (6.11.48)$$

gegeben⁷. Interessiert man sich für die reine Teilchendichte, unabhängig davon, welche Spineinstellung man vorfindet, folgt

$$P(t, \vec{x}) = \sum_{\sigma} |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 = \psi^\dagger(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x}). \quad (6.11.49)$$

Wir wollen nun zeigen, daß es eine **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** $\vec{j}(t, \vec{x})$ gibt, so daß die **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (6.11.50)$$

gilt. Dazu leiten wir (6.11.49) nach der Zeit ab und verwenden die Pauli-Gleichung für die Zeitableitungen. Wir benötigen dazu zunächst die Pauligleichung für den adjungierten Weyl-Spinor ψ^\dagger . Bilden wir also die hermitesch Adjungierte der Gleichung (6.11.31):

$$-i \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} + i\vec{A})^2 \psi^\dagger - g_s \mu_B \psi^\dagger \hat{S} \cdot \vec{B} + q\Phi(t, \vec{x})\psi^\dagger. \quad (6.11.51)$$

dabei haben wir die Selbstadjungiertheit der Spinmatrizen verwendet. Nach einigen Umformungen (*Übung*) gelangt man schließlich zu der folgenden Form des Wahrscheinlichkeitsstromes

$$\vec{j} = \frac{1}{2mi} [\psi^\dagger \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \psi - 2iq\vec{A} \psi^\dagger \psi]. \quad (6.11.52)$$

Es läßt sich auch leicht zeigen (*Übung*), daß dieser Ausdruck unter der Eichtransformation (6.11.47) invariant ist, wie es für physikalisch beobachtbare Größen wie den Wahrscheinlichkeitsstrom sein muß⁸.

⁷Wir verwenden hier o.b.d.A. das Schrödinger-Bild der Zeitentwicklung.

⁸Diese Größe ist physikalisch beobachtbar, denn man kann die Anzahl der Teilchen eines im durch ψ beschriebenen Zustand präparierten Ensembles zählen, die in einem bestimmten Zeitintervall dt durch ein Flächenelement $d\vec{F}$ fliegen. Der Erwartungswert dieser Anzahl von Teilchen (pro einlaufendes Teilchen) ist dann definitionsgemäß durch $dN = dt d\vec{F} \cdot \vec{j}$ gegeben.

6. Galilei-Symmetrie

Wir bestimmen noch den **Operator der elektrischen Stromdichte**. Dazu müssen wir den Erwartungswert der Teilchenenergie

$$E = \langle \mathbf{H} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger \mathbf{H} \psi \quad (6.11.53)$$

mit dem Hamilton-Operator (6.11.25) betrachten. Den Zusammenhang zur elektrischen Stromdichte ergibt sich aus dem Korrespondenzprinzip. In der Lagrangefunktion (6.11.3) hat man den Anteil

$$L_{\text{mag}} = q \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A} \quad (6.11.54)$$

bzw. für eine kontinuierliche Ladungsverteilung

$$L_{\text{mag}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \vec{j} \cdot \vec{A} \quad \text{mit} \quad \vec{j} = \rho \vec{v}, \quad (6.11.55)$$

wo ρ die Ladungsdichte der Ladungsverteilung bezeichnet. Variiert man also in der Lagrangefunktion \vec{A} , erhält man

$$\delta L = \delta L_{\text{mag}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \vec{A} \cdot \vec{j}. \quad (6.11.56)$$

Die entsprechende Variation im Hamilton-Operator ist

$$\delta H = -\delta L = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \vec{A} \cdot \vec{j}. \quad (6.11.57)$$

Genauso zeigt man (*Übung*), daß eine Variation nach dem skalaren Potential Φ

$$\delta H = -\delta L = + \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \Phi \rho \quad (6.11.58)$$

zur elektrischen Ladungsdichte führt.

Wenden wir diese Gleichungen auf (6.11.53) mit dem Hamilton-Operator (6.11.25) an, erhalten wir für die elektrische Ladungs- und Stromdichte

$$\rho = q \psi^\dagger \psi = qP, \quad \vec{j} = q\vec{j} + \mu_B g_s \vec{\nabla} \times (\psi^\dagger \hat{S} \psi). \quad (6.11.59)$$

Neben der konvektiven Stromdichte $\rho \vec{v} = q\vec{j}$ erhalten wir also noch einen Beitrag vom intrinsischen magnetischen Moment der Teilchen, den sie aufgrund ihres Spins besitzen. Es ist klar, daß wegen (6.11.50) und der Relation $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{V}) = 0$ für ein beliebiges Vektorfeld \vec{V} die Kontinuitätsgleichung auch für die elektrische Ladung gilt,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad (6.11.60)$$

d.h. die elektrische Ladung ist eine Erhaltungsgröße. Wir weisen noch darauf hin, daß bei einer Normierung von ψ auf 1 die hier betrachteten Ladungen und Ströme sich auf ein Teilchen im Sinne der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantentheorie beziehen. Will man reale Ensembles aus N Teilchen beschreiben, wobei man die Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigen kann, kann man die entsprechenden Größen mit N multiplizieren, um die im realen Experiment auftretenden Ladungs- und Stromverteilungen zu berechnen.

6.12 Der Stern-Gerlach-Versuch

Der Stern-Gerlach-Versuch zur „Richtungsquantelung“ wurde 1922, also schon vor der Entwicklung der modernen Quantentheorie ausgeführt⁹. Das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell sagte allerdings bereits damals voraus, daß der Drehimpuls quantisiert sein sollte. Außerdem war bekannt, daß ein Atom mit einer Elektronenkonfiguration in einem Zustand zum Bahndrehimpuls $l \neq 0$ (in moderner Sprache ausgedrückt) ein entsprechendes magnetisches Moment wie durch (6.11.39) aufweisen muß. Der Spin war allerdings noch unbekannt. Gleichwohl sollte ein Atomstrahl mit Atomen mit magnetischem Moment in einem inhomogenen Magnetfeld abgelenkt werden. Während die klassische Physik einfach eine kontinuierliche Aufweitung des Strahls vorhersagte, mußte nach dem Bohrschen Atommodell der Strahl in einem Magnetfeld mit Feldgradient in z-Richtung entsprechend der Quantelung der z-Komponente des Bahndrehimpulses in diskreter Weise abgelenkt werden. Stern und Gerlach gelang der Nachweis dieser Richtungsquantelung eines Atomstrahls von Silberatomen. Sie fanden eine Aufspaltung des Strahls entsprechend zweier Einstellmöglichkeiten der z-Komponente des Drehimpulses, was mit der damaligen Vorhersage des Bohr-Sommerfeld-Modells verträglich war. Die moderne Quantentheorie würde allerdings bei einem Teilchen ohne Spin nur Aufspaltungen in eine ungerade Anzahl von Strahlen vorhersagen, denn der Bahndrehimpuls gehört immer zu Darstellungen der Drehgruppe mit Drehimpulsquantenzahl $l \in \mathbb{N}_0$, und die z-Komponente des Bahndrehimpulses kann immer nur die $(2l + 1)$ Werte $m_z = \{0, \pm 1, \dots, \pm l\}$ annehmen.

Im Lichte der modernen Quantentheorie betrachtet ist allerdings die Aufspaltung in zwei Strahlen für Silberatome leicht erklärbar: Das Silberatom besitzt ein Valenzelektron, das sich im Grundzustand in einem Bahndrehimpulszustand $l = 0$ (s-Orbital) befindet. Die übrigen Elektronen füllen ihre entsprechenden Orbitale vollständig auf, so daß deren Gesamtdrehimpuls 0 ist. Entsprechend ist der Gesamtdrehimpuls des Atoms $J = 1/2$. Es verhält sich also wie ein neutrales Teilchen mit einer großen Masse und einem magnetischen Moment aufgrund des Spins $1/2$ dieses Elektrons, solange das Atom nicht auf irgendeine Weise in angeregte Zustände übergeht. Dies ist aber unter den Versuchsbedingungen von Stern und Gerlach nur höchst unwahrscheinlich. Daher können wir bei der Analyse des Experiments das Silberatom einfach als neutrales Teilchen mit einem magnetischen Moment entsprechend dem vom Spin des Valenzelektrons behandeln. Entsprechend der beiden Einstellmöglichkeiten für die z-Komponente des Spins ($\sigma = \pm 1/2$) spaltet sich also der Strahl in der Tat in zwei Teilstrahlen auf, von denen einer aus Teilchen mit $\sigma = 1/2$ und einer aus solchen mit $\sigma = -1/2$ besteht.

Schon diese qualitative Beschreibung zeigt, warum der Stern-Gerlach-Versuch auch heute noch als Musterbeispiel für den quantenmechanischen Meßprozeß dient: Er zeigt alle Charakteristika einer quantenmechanischen Messung, und wir wollen daher dieses Experiment aus quantentheoretischer Sicht genauer betrachten. Der Versuchsaufbau ist schematisch in Abb. 6.1 dargestellt. In einem Ofen wird Silber geschmolzen, und durch eine Öffnung tritt ein Atomstrahl aus und wird durch Blenden auf eine bestimmte Richtung fokussiert. Dies können wir im Sinne der Quantentheorie als **Präparation der Silberatome** auffassen. Wir haben es allerdings mit einem **gemischten Zustand** von Teilchen zu tun, die einen Impuls besitzen, der entsprechend einer thermischen Verteilung um den Mittelwert $\langle \vec{p} \rangle = \vec{e}_x p_0$ verteilt ist. Die Atome durchlaufen nun ein **inhomogenes zeitlich konstantes Magnetfeld**, welches wir in der Nähe des Strahls durch die Entwicklung bis zur ersten Ordnung in den Raumkoordinaten approximieren können:

$$\vec{B} = (B_0 + \beta z)\vec{e}_z - \beta y\vec{e}_y. \quad (6.12.1)$$

⁹Eine äußerst vergnügliche Darstellung der Historie des Stern-Gerlach-Versuchs findet sich in [FH03].

6. Galilei-Symmetrie

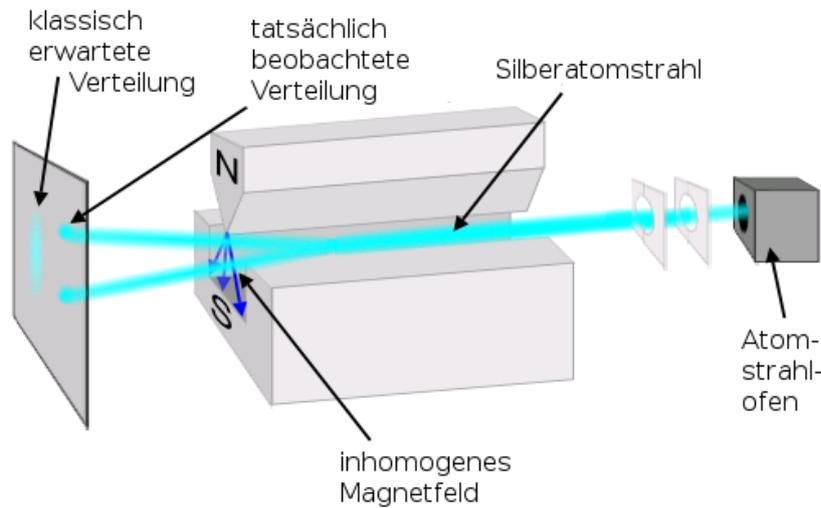


Abbildung 6.1: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Versuchs (Quelle des Bildes: Wikipedia).

Dieses Feld erfüllt offenbar die Maxwell-Gleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = 0 \quad (6.12.2)$$

für ein statisches Magnetfeld in einem quellenfreien Raumbereich. Der Hamiltonoperator (6.11.25) vereinfacht sich im gegebenen Falle wegen $q = 0$ zu¹⁰

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \mu_B g_s \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (6.12.3)$$

Setzen wir (6.12.1) ein, erhalten wir ein vom Spin abhängiges Potential, dessen klassisches Analogon einer konstanten Kraft entspricht. Um die Analyse weiter zu vereinfachen, nehmen wir an, daß $|B_0| \gg |\beta| |y|$ ist, wobei wir annehmen, der Strahl sei hinreichend in xy -Richtung um $x = 0, y = 0$ fokussiert. Dann können wir zunächst den einfacheren Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}' = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \mu_B g_s (B_0 + \beta z) S_z \quad (6.12.4)$$

verwenden. Betrachten wir Teilchen in einem S_z -Eigenzustand, haben wir es also mit der Bewegung in einem konstanten Kraftfeld zu tun, und die Atome werden für $\sigma = 1/2$ nach unten, für $\sigma = -1/2$ nach oben abgelenkt. Ein Atomstrahl, dessen Zustand durch eine beliebige Superposition aus solchen Eigenzuständen beschrieben wird, spaltet sich also entsprechend in zwei Teilstrahlen auf.

Falls die Strahlen in der yz -Ebene hinreichend fokussiert bleiben, bilden sich zwei wohlseparierte Teilstrahlen, die in der hier betrachteten Näherung aus reinen S_z -Eigenzuständen bestehen, d.h. in diesen Teilstrahlen haben wir es mit Teilchen zu tun, die eine wohldefinierte z -Komponente des Spins besitzen. Vorher war diese Spinkomponente unbestimmt. Durch das inhomogene Magnetfeld können wir nun einen der Teilstrahlen ausfiltern und so Teilchen mit determinierter Spinkomponente präparieren. Der Zustand des Gesamtensembles wird aber immer noch durch eine Superposition bzw. durch einen Statistischen Operator beschrieben. Allerdings sind nach Durchlaufen des Magnetfeldes **Ort und Spin- z -Komponente** verschränkt, d.h. eine hinreichend genaue Ortsmessung liefert zugleich auch einen

¹⁰Das Vorzeichen des Spinterms kehrt sich wegen der negativen Ladung des Elektrons um.

6.12. Der Stern-Gerlach-Versuch

wohlbestimmten Spinzustand. Man kann also durch Nachweis eines Silberatoms am Schirm mit einer nahezu 100%-Wahrscheinlichkeit sagen, welchen Wert $\sigma = \pm 1/2$ die Spin-z-Komponente dieses Silberatoms besitzt. Voraussetzung dafür ist allerdings, daß der Ort der Teilchen zumindest in z-Richtung so scharf bestimmt ist, daß die beiden Teilstrahlen als wohlsepariert angesehen werden können. In diesem Zusammenhang nennt man die Ortskomponente z auch eine **Zeigervariable**, denn sie wird bei dem betrachteten Versuchsaufbau zur Messung der eigentlich interessierenden Observable, nämlich der Spin-z-Komponente, im Sinne des Zeigers eines Meßgerätes verwendet.

Wir betrachten nun diese Vorgänge quantitativ. Zunächst beschreiben wir den Anfangszustand des Atomstrahls vereinfacht durch einen beliebigen Spinzustand und bzgl. des Ortes als Gaußsches Wellenpaket, das um $\vec{x} = 0$ gepeakt ist und einen entsprechend der Unschärferelation bestimmten Impuls mit $\langle \vec{p} \rangle = p_0 \vec{e}_x$ besitzt:

$$\psi_\sigma(t=0, \vec{x}) = \frac{c_\sigma}{(2\pi\Delta^2)^{3/4}} \exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{4\Delta^2} + ip_0x\right), \quad |c_{1/2}|^2 + |c_{-1/2}|^2 = 1. \quad (6.12.5)$$

Diese Wellenfunktion ist normiert (*Übung!*):

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} |\psi(t=0, \vec{x})|^2 = 1. \quad (6.12.6)$$

Die zeitliche Entwicklung dieser Wellenfunktion ist durch den Hamiltonoperator (6.12.3) bestimmt. Wir betrachten hier aber nur den einfacheren Hamiltonoperator (6.12.4) und berechnen den **Propagator**. Dazu verwenden wir die Methode, die wir in Abschnitt 2.11 verwendet haben, um den Propagator für das freie Teilchen zu berechnen.

Wir berechnen also die Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild, d.h. der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ ist zeitlich konstant, und die Zeitabhängigkeit der hier relevanten Observablenoperatoren wird durch die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{1}{i} [\vec{x}, \mathbf{H}'] = \frac{\vec{p}}{M}, \quad (6.12.7)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{1}{i} [\vec{p}, \mathbf{H}'] = -\vec{e}_z M a S_z, \quad (6.12.8)$$

$$\frac{dS_z}{dt} = \frac{1}{i} [S_z, \mathbf{H}'] = 0 \quad (6.12.9)$$

beschrieben. Dabei haben wir zur Abkürzung die Beschleunigung $a = \mu_B g_s \beta / M$ eingeführt. Die Gleichungen (6.12.7)-(6.12.9) sind unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen

$$\vec{x}(0) = \vec{x}', \quad \vec{p}(0) = \vec{p}', \quad S_z(0) = S'_z \quad (6.12.10)$$

zu lösen. Die Integration ist in diesem Falle sehr einfach und ergibt (*Übung!*)

$$\begin{aligned} \vec{x} &= -\frac{a}{2} t^2 S'_z \vec{e}_z + \frac{1}{M} \vec{p}' t + \vec{x}', \\ \vec{p} &= -M a t S'_z \vec{e}_z + \vec{p}', \\ S_z &= S'_z. \end{aligned} \quad (6.12.11)$$

Wie wir in (2.11.17) gesehen haben, ist das konjugiert Komplexe des Propagators durch

$$U_{\sigma\sigma'}^*(t, \vec{x}; t_0=0, \vec{x}') = \langle t=0, \vec{x}', \sigma' | t, \vec{x}, \sigma \rangle = \langle t=0, \vec{x}', \sigma' | \exp(it\mathbf{H}) | t=0, \vec{x}, \sigma \rangle \quad (6.12.12)$$

6. Galilei-Symmetrie

gegeben. Diese Gleichung folgt unmittelbar aus der Bewegungsgleichung für die Eigenvektoren nicht explizit zeitabhängiger Observablen im Heisenbergbild

$$|t, \vec{x}, \sigma\rangle = \exp(it\mathbf{H})|t=0, \vec{x}, \sigma\rangle. \quad (6.12.13)$$

Es handelt sich also um die Komponenten der simultanen \vec{x} - S_z -Eigenvektoren bzgl. der \vec{x}' - S'_z -Eigenbasis. Wir können diese Größe unter Verwendung von (6.12.11) bestimmen, indem wir zunächst die simultanen Eigenwertgleichungen in dieser Basis schreiben:

$$\begin{aligned} \hat{x} U_{\sigma\sigma'}^* &= \left(-\frac{a}{2} \vec{e}_z t^2 \sigma' + \frac{t}{iM} \vec{\nabla}_{x'} + \vec{x}' \right) U_{\sigma\sigma'}^* \stackrel{!}{=} \vec{x} U_{\sigma\sigma'}^*, \\ \hat{S}_z U_{\sigma\sigma'}^* &= \sigma' U_{\sigma\sigma'}^* \stackrel{!}{=} \sigma U_{\sigma\sigma'}^*. \end{aligned} \quad (6.12.14)$$

Die letzte Gleichung besagt, daß $U_{\sigma\sigma'} \propto \delta_{\sigma\sigma'}$ ist. In der hier betrachteten Näherung bleibt also ein Spin-z-Eigenzustand stets in diesem Eigenzustand, maW. es erfolgt während der Bewegung durch das Magnetfeld kein „Spin-Flip“. Wie wir unten noch sehen werden, ist dies allerdings die wesentliche Folge der hier betrachteten Näherung. Die Lösung von (6.12.14) ist ebenfalls einfach durch direkte Integration zu gewinnen (*Übung!*):

$$U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}') = N(t) \exp \left\{ \frac{iM}{2t} [(\vec{x}' - \vec{x})^2 - at^2 \sigma(z' + z)] \right\} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (6.12.15)$$

Dabei haben wir die Integrationskonstanten so angepaßt, daß unter der Voraussetzung, daß wir $N(t)$ so wählen können, daß

$$N(t) = N^*(-t) \quad (6.12.16)$$

ist,

$$U_{\sigma'\sigma}^*(-t, \vec{x}', \vec{x}) = U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}') \quad (6.12.17)$$

gilt¹¹. Um $N(t)$ zu bestimmen, verwenden wir die Tatsache, daß $U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}')$ die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt. Dies führt auf eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung für $N(t)$, die die Lösung (*Übung!*)

$$N(t) = \left(\frac{M}{2\pi it} \right)^{3/2} \exp[i\Phi_1(t)] \quad \text{mit} \quad \Phi_1(t) = -\frac{Ma\sigma t(24B_0 + \beta a\sigma t^2)}{24\beta} \quad (6.12.18)$$

besitzt. Dabei haben wir die zunächst unbestimmte Normierungskonstante bereits so gewählt, daß auch die Anfangsbedingung

$$U_{\sigma,\sigma'}(t=0, \vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (6.12.19)$$

erfüllt ist.

Die Wellenfunktion mit dem Gaußschen Wellenpaket (6.12.5) als Anfangsbedingung lautet also

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \sum_{\sigma'} U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}; \vec{x}') \psi_{\sigma'}(t=0, \vec{x}') = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/4} \left(\frac{M\Delta}{it + 2M\Delta^2} \right)^{3/2} c_\sigma \\ &\times \exp \left\{ -\frac{M^2\Delta^2}{4\Delta^4 M^2 + t^2} \left[\left(x - \frac{p_0 t}{M} \right)^2 + y^2 + \left(z + \frac{a\sigma t^2}{2} \right)^2 \right] \right\} \\ &\times \exp[i\Phi(t, \vec{x})] \end{aligned} \quad (6.12.20)$$

¹¹vgl. (2.11.11)

6.12. Der Stern-Gerlach-Versuch

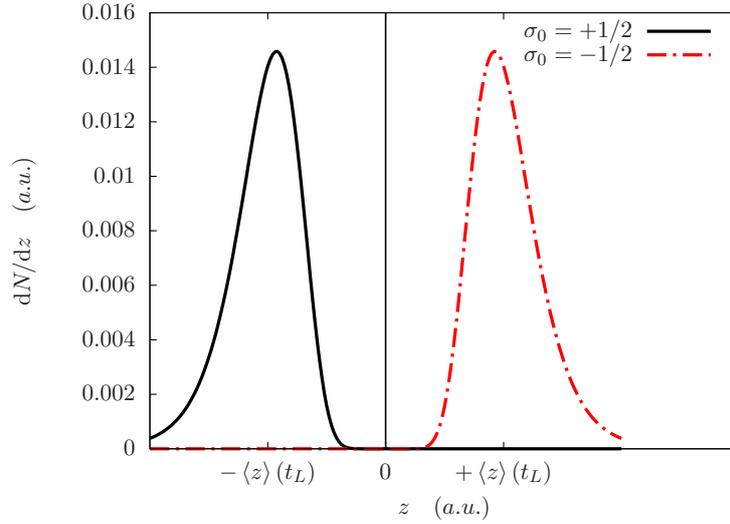


Abbildung 6.2: Wahrscheinlichkeitsverteilung für die z -Position eines Teilchens nach Durchlaufen eines inhomogenen Magnetfeldes bei $x = L$. Anfangs lag eine bei $\vec{x} = 0$ gepeakte Gaußverteilung vor, wobei die Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit eine Spinkomponente $\sigma = +1/2$ oder $\sigma = -1/2$ besitzen.

mit der Phase

$$\Phi(t, \vec{x}) = -\frac{aM\sigma B_0 t}{\beta} - \frac{M}{24(4M^2\Delta^4 + t^2)} \left\{ 16\Delta^4[3p_0^2 t - 6M p_0 x + aM^2 \sigma t(a\sigma t^2 + 6z)] + t(a^2\sigma_0^2 t^4 + 12a\sigma_0 t^2 z - 12\vec{x}^2) \right\}. \quad (6.12.21)$$

Um diese Wellenfunktion zu interpretieren, bilden wir ihr Betragsquadrat:

$$|\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{M^2 \Delta^2}{4M^2 \Delta^4 + t^2} \right)^{3/2} |c_\sigma|^2 \times \exp \left\{ -\frac{2M^2 \Delta^2}{4\Delta^4 M^2 + t^2} \left[\left(x - \frac{p_0 t}{M} \right)^2 + y^2 + \left(z + \frac{a\sigma}{2} t^2 \right)^2 \right] \right\}. \quad (6.12.22)$$

Die Ortswahrscheinlichkeitsverteilung für ein Teilchen mit anfangs scharf bestimmter Spin- z -Komponente σ ist also zur Zeit t in der Tat eine Gaußverteilung, mit Ortserwartungswerten entsprechend der Bewegung des entsprechenden klassischen Teilchens. Dies liegt daran, daß die Kraft hier konstant ist und folglich die Ortserwartungswerte aufgrund des Ehrenfestschen Theorems die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Dies ersieht man auch durch direkte Mittelwertbildung aus (6.12.11). Die Unschärfe jeder der Ortskomponenten ist

$$\Delta x(t) = \Delta y(t) = \Delta z(t) = \frac{\sqrt{4\Delta^4 M^2 + t^2}}{2M\Delta}. \quad (6.12.23)$$

Stellen wir nun einen Schirm bei $x = L$ auf, erreicht das Maximum des Wellenpakets diesen Schirm bei $t = t_L = 2ML/p_0$, und wir erhalten eine gute Separation der beiden Peaks in z -Richtung, wenn die entsprechende Unschärfe klein gegen $2z(t_L) = a\sigma t_L^2$ ist.

6. Galilei-Symmetrie

Gemessen werden (unter der Annahme einer idealen Photoplatte, die jedes Teilchen, das auf sie trifft, auch wirklich registriert) alle Teilchen, die im Laufe der Zeit $t \in (-\infty, \infty)$ bei $x = L$ ankommen. Die entsprechende Verteilung erhalten wir offenbar, indem wir die Stromkomponente

$$j_x(t, x = L, y, z) = \frac{1}{2M\hbar} \sum_{\sigma} [\psi_{\sigma} \partial_x \psi - (\partial_x \psi_{\sigma}^*) \psi] \quad (6.12.24)$$

über $t \in \mathbb{R}$ integrieren. In Abb. 6.2 haben wir diese Stromkomponente für die Situation, daß anfangs gleich viele Teilchen mit Spin-z-Komponenten $\sigma = \pm 1/2$ vorhanden waren (d.h. $c_{+1/2} = c_{-1/2} = 1/\sqrt{2}$) numerisch über $t \in \mathbb{R}$ und $y \in \mathbb{R}$ integriert, d.h. wir betrachten die Verteilung in z-Richtung. In der Tat sind aufgrund der Wahl der Anfangsparameter für dieses Beispiel die beiden Peaks entsprechend der Anfangseinstellung des Spins wohlsepariert, und die Teilchen besitzen entsprechend unserer Näherung des Hamiltonoperators (6.12.4) praktisch reine Spin-z-Zustände, wenn wir einen der beiden Teilstrahlen durch eine Blende laufen lassen, und den anderen vollständig absorbieren.

Betrachtet man statt der Näherung (6.12.4) den genaueren Hamiltonoperator (6.12.5), läßt sich das Problem nicht mehr geschlossen lösen. Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Orts-, Impuls- und Spinoperatoren lauten dann nämlich

$$\begin{aligned} \dot{\vec{p}} &= \frac{1}{\hbar} [\vec{p}, \mathbf{H}] = -a\mathbf{S}_z \vec{e}_z + a\mathbf{S}_y \vec{e}_y, \\ \dot{\vec{x}} &= \frac{\vec{p}}{M}, \\ \dot{\vec{S}} &= \mu_B g_s \vec{B} \times \vec{S}. \end{aligned} \quad (6.12.25)$$

Man kann allerdings mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie zeigen, daß für $B_0 \gg \beta \langle \gamma \rangle$ die Beimischungen von Teilchen mit entgegengesetzten Spin klein sind, weil die Korrekturglieder mit der großen **Larmorfrequenz** $\omega = \mu_B g_s B_0$ oszillieren und sich somit bei der Zeitintegration der entsprechenden Stromkomponente j_x gegenseitig aufheben. Genauere numerische Untersuchungen zur Berücksichtigung des Spin-Flips beim Stern-Gerlach-Versuch finden sich in [PBCBGC05].

Kapitel 7

Pfadintegrale

Die Pfadintegralmethode wurde 1942 von Feynman im Rahmen seiner Promotion als alternative Formulierung der Quantentheorie entwickelt [Fey48]. Der grundlegende Vorteil der Pfadintegralmethode gegenüber der Operatorformulierung besteht darin, daß sie in vielen Fällen die quantentheoretischen Größen mittels der Lagrange-Funktion anstelle der Hamiltonfunktion herzuleiten gestattet und überhaupt einen engen Zusammenhang der Quantentheorie zum **klassischen Wirkungsprinzip** herstellt. Es ergeben sich dabei nicht nur mathematische Vereinfachungen durch die Verwendung von **Funktionalen**, insbesondere für **störungstheoretische Anwendungen semiklassische Näherungsverfahren** und die **Streutheorie**, sondern auch interessante heuristische Aspekte zur Interpretation der Quantentheorie.

7.1 Die Feynman-Kac-Formel

Während Feynman (zumindest zeitweise) die Pfadintegralformulierung als alternativen Zugang zur Quantenmechanik gegenüber der historisch älteren in diesem Skript verwendeten kanonischen Quantisierung im Rahmen der Operatorformulierung der Quantentheorie betrachtete verwenden wir hier umgekehrt die Operatormethoden, um die Pfadintegrale zu begründen. Diese stellen insbesondere die Unitarität der Zeitentwicklung sicher, und wie wir sehen werden, ist die naive Korrespondenz zwischen dem klassischen Lagrangeformalismus der Mechanik und den Pfadintegralen nur für bestimmte Hamilton-Operatoren gültig.

Wir betrachten zunächst den einfachen Fall eines Teilchens, das sich in einer Raumdimension in einem vorgegebenen äußeren Potential $V(x)$ bewegt. Unser erstes Ziel ist die Berechnung des **Zeitentwicklungskerns** $U(t', x'; t, x)$ mittels Pfadintegralen. Im **Heisenbergbild** gilt

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \left\langle x', 0 \left| \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(t' - t) \right] \right| x, 0 \right\rangle. \quad (7.1.1)$$

Dabei haben wir die Lösung der Bewegungsgleichung für die Operatoren im Heisenbergbild (2.10.10) mit $\mathbf{X} = \mathbf{H}$ verwendet. Die Lösung für den nicht explizit zeitabhängigen Ortsoperator ist nämlich

$$\mathbf{x}(t) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t \right) \mathbf{x}_0 \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t \right), \quad (7.1.2)$$

wie man sich durch Ableiten nach der Zeit überzeugt. Dabei ist zu berücksichtigen, daß \mathbf{H} im Heisenbergbild zeitunabhängig ist, solange keine explizite Zeitabhängigkeit vorliegt, wovon wir hier ausgehen

7. Pfadintegrale

wollen. Daraus folgt aber für die Ortseigenvektoren

$$|x, t\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t\right)|x, 0\rangle. \quad (7.1.3)$$

Wir betrachten nun den einfachsten Fall eines Hamiltonoperators für ein sich entlang der x -Achse in einem Potential V bewegenden Teilchens. Der entsprechende Hamiltonoperator lautet

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \quad (7.1.4)$$

Im allgemeinen können wir (7.1.1) nicht geschlossen ausrechnen, da die Exponentialfunktion wegen der Nichtkommutativität des Orts- und Impulsoperators nicht einfach zu berechnen ist.

Die grundlegende Idee der Pfadintegralmethode zur Berechnung von (7.1.1) besteht daher darin, das Zeitintervall (t, t') in N Teilintervalle der Länge $\Delta t = (t - t')/N$ aufzuteilen. Da \mathbf{H} nicht explizit zeitabhängig ist (und also im Heisenbergbild überhaupt nicht von der Zeit abhängt), können wir schreiben

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t' - t)\right] = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\Delta t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\Delta t\right)\cdots\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\Delta t\right)}_{N \text{ Faktoren}}. \quad (7.1.5)$$

Durch Entwicklung des Faktors nach Δt gemäß

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\Delta t\right) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (7.1.6)$$

wird klar, daß zu jedem Zeitpunkt t

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\mathbf{H}\right) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}^2(t)}{2m}\Delta t\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}(t))\Delta t\right] + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (7.1.7)$$

gilt.

Setzen wir diese Näherung in (7.1.5) und dann in (7.1.1) ein, können wir an der jeweils geeigneten Stelle einen Einsoperator in der Form

$$\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}} dp |p, t\rangle\langle p, t| \quad \text{bzw.} \quad \mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}} dx |x, t\rangle\langle x, t| \quad (7.1.8)$$

einschieben. Dabei verwenden wir die Zeiten

$$t_j = t + j\Delta t, \quad j \in \{0, 1, \dots, N\}. \quad (7.1.9)$$

Schreiben wir zur Abkürzung $p(t_j) = p_j$ und $x(t_j) = x_j$, erhalten wir

$$\begin{aligned} U(t', x'; t, x) &= \int_{\mathbb{R}^N} dp_1 \dots dp_N \int_{\mathbb{R}^{N-1}} dx_1 \dots dx_{N-1} \\ &\times \left\langle x' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}_N^2}{2m}\Delta t\right) \right| p_N \right\rangle \left\langle p_N \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}_{N-1})\Delta t\right] \right| x_{N-1} \right\rangle \\ &\times \left\langle x_{N-1} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}_{N-1}^2}{2m}\Delta t\right) \right| p_{N-1} \right\rangle \left\langle p_{N-1} \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}_{N-2})\Delta t\right] \right| x_{N-2} \right\rangle \\ &\times \dots \\ &\times \left\langle x_1 \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}\Delta t\right) \right| p_1 \right\rangle \left\langle p_1 \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x})\Delta t\right] \right| x \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.1.10)$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \left\langle x_{k+1} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} \Delta t\right) \right| p_k \right\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_k^2}{2m} \Delta t\right) \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} p_k x_{k+1}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \\ \left\langle p_k \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\mathbf{x}_k) \Delta t\right) \right| x_k \right\rangle &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V(x_k) \Delta t\right] \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} x_k p_k\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \end{aligned} \quad (7.1.11)$$

Setzen wir dies in wiederum (7.1.10) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} U(t', x'; t, x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} dp_1 \dots dp_N \int_{\mathbb{R}^{N-1}} dx_1 \dots dx_{N-1} \\ &\times \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^N \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k)\right) + \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N p_k (x_k - x_{k-1})\right], \end{aligned} \quad (7.1.12)$$

Die Paare von Eigenwerten (x_k, p_k) können wir nun als diskrete Näherung von **Teilchenbahnen im Phasenraum** interpretieren. Dann wird die Summe im Exponenten im Limes $N \rightarrow \infty$ zu dem Integral entlang einer vorgegebenen Phasenraumtrajektorie $[x(t''), y(t'')] mit $t'' \in (t, t')$. Der Exponent wird dadurch zum **Wirkungsfunktional**$

$$S[x, p] = \int_t^{t'} dt'' \left[-H(x, p) + p \frac{dx}{dt} \right]. \quad (7.1.13)$$

Dabei sind die Endpunkte $x(t) = x$ und $x(t') = x'$ fixiert, während die Impulse keine Einschränkungen an den Endpunkten besitzen. Damit läßt sich (7.1.12) als das **Integral über alle Phasenraumtrajektorien** mit festgehaltenem Anfangs- und Endpunkt im Konfigurationsraum interpretieren. Dabei ist über solche Trajektorien zu integrieren, für die im Ortsraum die Randbedingungen $x(t) = x$ und $x(t') = x'$ gelten, während die kanonischen Impulse keinerlei Randbedingungen unterworfen sind. Dies weist schon auf einen engen Zusammenhang der Pfadintegralmethoden mit dem Hamiltonschen Wirkungsprinzip hin, wo genau diese Randbedingungen zu stellen sind. Wir schreiben nun den **Kontinuumsliches** von (7.1.12) symbolisch als

$$U(t', x'; t, x) = \mathcal{N} \int_{(t,x)}^{(t',x')} \mathcal{D}p \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x, p]\right). \quad (7.1.14)$$

Dabei ist \mathcal{N} eine Normierungskonstante, die durch die Anfangsbedingung $U(t+0^+, x'; t, x) = \delta(x' - x)$ bestimmt wird.

Wir können $U(t', x'; t, x)$ als **Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude** interpretieren, d.h. $|U(t', x'; t, x)|^2 dx dx'$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß ein Teilchen, das sich zur Zeit t in einem kleinen Ortsintervall dx um den Punkt x befunden hat, zur Zeit t' in einem Ortsintervall dx' um x' herum beobachtet wird.

Der entscheidende Schritt für eine Formulierung des Pfadintegrals als Summe über Ortsraumtrajektorien und nicht Phasenraumtrajektorien ist nun, daß wir die Integrale über die Impulse in (7.1.12) ausführen können. Dazu müssen wir die Integrale zunächst regularisieren, indem wir Δt durch $\Delta t - i0^+$ ersetzen. Dann werden die Impulsintegrale zu GaußIntegralen, die wir geschlossen ausrechnen können. Es ergibt sich dabei

$$I_k = \int dp_k \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{p_k^2}{2m} + \frac{i}{\hbar} p_k (x_k - x_{k-1})\right] = \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\Delta t}} \exp\left[\frac{im(x_k - x_{k-1})^2}{2\Delta t \hbar}\right]. \quad (7.1.15)$$

7. Pfadintegrale

Setzen wir dieses Resultat in (7.1.12) ein, finden wir das **Ortsraumfadintegral** für die Zeitentwicklungskern

$$U(t', x'; t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} dx_1 \cdots dx_{N-1} \times \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar i \Delta t}}^N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{k=1}^N \left[\frac{m(x_k - x_{k-1})^2}{2\Delta t^2} - V(x_k) \right] \right\}. \quad (7.1.16)$$

Im gleichen Sinne wie oben sehen wir, daß dies die diskretisierte Version des Pfadintegrals über Trajektorien im Ortsraum

$$U(t', x'; t, x) = \int_{(t,x)}^{(t',x')} \mathcal{D}x \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x] \right), \quad (7.1.17)$$

ist, wobei nunmehr die **Lagrangische Form des Wirkungsfunktionals**

$$S[x] = \int_t^{t'} dt L(\dot{x}, x) \quad \text{mit} \quad L(\dot{x}, x) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \quad (7.1.18)$$

als Argument der Exponentialfunktion auftaucht. Wir haben das Pfadintegralmaß nun mit $\mathcal{D}x$ bezeichnet, um an die zusätzlichen Faktoren in (7.1.16) zu erinnern.

In dieser Form besitzt das Pfadintegral die folgende intuitive Bedeutung: Die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß ein zur Zeit t am Ort x lokalisiertes Teilchen sich zur Zeit t' bei x' befindet, ist durch die **kohärente Summe** der Phasenfaktoren über alle möglichen Ortsraumpfade gegeben, wobei Anfangs- und Endpunkt entsprechend bei x bzw. x' fixiert sind.

Im nächsten Abschnitt berechnen wir als eines der sehr wenigen Beispiele, bei dem sich das Pfadintegral (7.1.18) tatsächlich analytisch auswerten läßt, erneut den Zeitentwicklungskern des harmonischen Oszillators, den wir bereits in Abschnitt 3.6.2 berechnet haben.

7.2 Der Propagator für das freie Teilchen (Gitterrechnung)

Für das freie Teilchen, also den Fall $V = 0$ läßt sich das Ortsraumfadintegral (7.1.17) in der Gitterversion (7.1.16) relativ leicht lösen. Dazu beachten wir, daß der Gitterpunkt x_j in der Summe in der Exponentialfunktion in nur zwei Termen vorkommt, nämlich für $k = j$ und $k = j + 1$. Es handelt sich offenbar um die Faltung zweier Gauß-Integrale, die freilich wieder ein Gauß-Integral ist. Die allgemeine Formel lautet

$$\int_{\mathbb{R}} dx \exp[-a_1(x - y_1)^2] \exp[-a_2(x - y_2)^2] = \sqrt{\frac{\pi}{a_1 + a_2}} \exp \left[-\frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2} (y_1 - y_2)^2 \right]. \quad (7.2.1)$$

Damit können wir nun (7.1.16) leicht iterativ berechnen. Es ergibt sich schließlich wieder das bereits bekannte Resultat (vgl.)

$$U(t', x'; t, x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)}} \exp \left(\frac{im(x' - x)^2}{2\hbar(t' - t)} \right). \quad (7.2.2)$$

7.3 Der Propagator für den harmonischen Oszillator (Gitterrechnung)

Die Lagrange-Funktion für den harmonischen Oszillator lautet

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (7.3.1)$$

Der entsprechende Hamiltonoperator ist wegen $p = \partial L / \partial \dot{x} = m\dot{x}$

$$H = p\dot{x} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (7.3.2)$$

gegeben und nicht nur in p sondern auch in x quadratisch. Deshalb können wir in diesem Fall über die diskretisierte Form (7.1.16) auch das Ortsraumfadintegral (7.1.17) berechnen.

Zunächst müssen wir uns mit der Frage befassen, wie die Randbedingungen $x(t) = x$ und $x(t') = x'$ an Anfang und Ende der Trajektorien, über die zu integrieren ist, berücksichtigt werden können. Wie wir gleich sehen werden, wird dies am bequemsten dadurch bewerkstelligt, daß wir zunächst die **klassische Trajektorie**, die durch den stationären Punkt des Wirkungsfunktionals unter diesen Randbedingungen gegeben ist, berechnen. Wir suchen also die Trajektorie, für die

$$\left. \frac{\delta S[x]}{\delta x} \right|_{x=x_{cl}} = 0 \quad \text{mit} \quad x(t) = x, \quad x(t') = x'. \quad (7.3.3)$$

Da die Wirkung quadratisch ist, können wir das Wirkungsfunktional um die klassische Trajektorie entwickeln, wobei die Entwicklung nach dem Glied zweiter Ordnung abbricht. Setzen wir $y = x - x_{cl}$, bedeutet dies

$$S[y + x_{cl}] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2} \left\{ \left. \frac{\delta^2 S}{\delta x_1 \delta x_2} \right|_{x=x_{cl}} y_1 y_2 \right\}_{12}, \quad (7.3.4)$$

wobei die geschweifte Klammer eine Abkürzung für mehrfache Zeitintegrale

$$\{f_{12\dots n}\}_{12\dots n} = \int_t^{t'} dt_1 \int_t^{t'} dt_2 \dots \int_t^{t'} dt_n f(t_1, t_2, \dots, t_n) \quad (7.3.5)$$

bedeutet. Es ist klar, daß wegen (7.3.3) kein in y linearer Term in (7.3.4) auftritt.

Da wir weiter das Pfadintegral über alle Trajektorien mit den in (7.3.3) angegebenen Randbedingungen zu erfolgen hat, können wir im Pfadintegral y zugunsten von x substituieren, wobei y die homogenen Randbedingungen

$$y(t) = y(t') = 0 \quad (7.3.6)$$

zu erfüllen hat. Wir erhalten also

$$U(t', x'; t, x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right) \int_{(t,0)}^{(t',0)} \mathcal{D}y \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \left\langle \frac{\delta S[x_{cl}]}{\delta x_1 \delta x_2} y_1 y_2 \right\rangle\right]. \quad (7.3.7)$$

Als erstes berechnen wir die Wirkung entlang der klassischen Trajektorie. Wir erinnern zunächst an die Herleitung der Bewegungsgleichung aus dem Variationsprinzip (7.3.3), welches nichts anderes als das **Hamiltonsche Prinzip** der klassischen Mechanik ist, welches hier bezeichnenderweise im Rahmen

7. Pfadintegrale

der Quantentheorie auftritt. Wir werden weiter unten noch näher auf diese Beziehung der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik eingehen. Jedenfalls variieren wir die klassische Trajektorie um δx :

$$\delta S = \int_t^{t'} dt'' \left[\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right]. \quad (7.3.8)$$

Eine partielle Integration liefert unter Berücksichtigung der Randbedingungen $\delta x(t) = \delta x(t') = 0$

$$\delta S = \int_t^{t'} dt \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right] \delta x. \quad (7.3.9)$$

Da ansonsten δx eine beliebige Funktion von t sein darf, ergibt die Stationaritätsforderung (7.3.3) die **Euler-Lagrange-Gleichungen** für die klassische Trajektorie

$$0 = \frac{\delta S}{\delta x} \Big|_{x=x_{cl}} = \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \Big|_{x=x_{cl}}. \quad (7.3.10)$$

Wir erhalten in der Tat die klassische Bewegungsgleichung für den harmonischen Oszillator, und unter Berücksichtigung der Randbedingungen in (7.3.3) lautet deren Lösung

$$x_{cl}(\tau) = x \cos[\omega(\tau - t)] + \frac{x' - x \cos[\omega(t' - t)]}{\sin[\omega(t' - t)]} \sin[\omega(\tau - t)]. \quad (7.3.11)$$

Das Wirkungsfunktional nimmt entlang dieser Trajektorie den Wert

$$S[x_{cl}] = \frac{m\omega \{ (x^2 + x'^2) \cos[\omega(t' - t)] - 2xx' \}}{2 \sin[\omega(t' - t)]} \quad (7.3.12)$$

an.

Schließlich müssen wir noch das verbliebende Pfadintegral in (7.3.7) berechnen. Dazu müssen wir wieder zu seiner diskretisierten Version gemäß (7.1.16) übergehen, wobei jedoch die einfacheren Randbedingungen $y(t) = y(t') = 0$ zur Anwendung kommen. Das Pfadintegral ist also durch

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar (t' - t)} \right)^{N/2} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} dy_1 \cdots dy_{N-1} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left[\frac{m(y_k - y_{k-1})^2}{2\Delta t} - \frac{m^2}{2} \omega^2 y_k^2 \Delta t \right] \right\} \quad (7.3.13)$$

gegeben. Da $y_0 = y_N = 0$, können wir das Argument in der Exponentialfunktion in der Form

$$\frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left[\frac{m(y_k - y_{k-1})^2}{2\Delta t} - \frac{m^2}{2} \omega^2 y_k^2 \Delta t \right] = \frac{m}{2\hbar \Delta t} \vec{y}^t M_N \vec{y} \quad (7.3.14)$$

schreiben, wobei \vec{y} den Spaltenvektor $(y_1, y_2, \dots, y_{N-1})^t$ und

$$M_N = \begin{pmatrix} C & -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & C & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & C & -1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad \text{mit } C = 2 - \omega^2 \Delta t^2 \quad (7.3.15)$$

7.4. Funktionale Methoden

eine $\mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ -Matrix bezeichnen.

Zunächst berechnen wir ein ähnliches k -dimensionales Gaußsches Integral mit einer symmetrischen positiv definiten Matrix M . Da solche Matrizen stets mit einer orthogonalen Transformation diagonalisiert werden können, erhalten wir

$$\int_{\mathbb{R}^k} d^k y \exp(-y^t M y) = \prod_{j=1}^k \int_{-\infty}^{\infty} dx_j \exp(-\lambda_j x_j^2). \quad (7.3.16)$$

Dabei sind die λ_j die Eigenwerte der Matrix M . Damit ist das Integral auf ein Produkt einfacher Gaußintegrale reduziert, was schließlich

$$\int_{\mathbb{R}^k} d^k y \exp(-y^t M y) = \sqrt{\frac{\pi^k}{\prod_{j=1}^k \lambda_j}} = \sqrt{\frac{\pi^k}{\det M}} \quad (7.3.17)$$

ergibt. Dieses Resultat können wir nun auf (7.3.13), indem wir $\Delta t \rightarrow \Delta t - i0^+$ setzen. Das bedeutet, daß wir lediglich die Determinante der Matrix (7.3.15) zu berechnen haben. Die etwas längere Rechnung ergibt nach Ausführen des Kontinuumslikes $N \rightarrow \infty$

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t' - t)]}}. \quad (7.3.18)$$

Damit ergibt sich schließlich der Zeitentwicklungskern des harmonischen Oszillators in der Ortsdarstellung zu

$$U[x', t'; x, t] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t' - t)]}} \exp\left\{ \frac{i m \omega \{(x^2 + x'^2) \cos[\omega(t' - t)] - 2x x'\}}{2\hbar \sin[\omega(t' - t)]} \right\}, \quad (7.3.19)$$

wobei wir (7.3.7), (7.3.8) und (7.3.18) verwendet haben. Dies stimmt in der Tat mit den Ergebnissen unserer früheren Rechnungen überein.

7.4 Funktionale Methoden

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der Frage, wie wir das Pfadintegral direkt berechnen können, ohne die mühsame Diskretisierung der Wirkung und die anschließende Bildung des Kontinuumslikes' durchführen zu müssen. Freilich werden wir uns auch hier auf **Gaußsche Pfadintegrale**, also im wesentlichen auf das freie Teilchen und den harmonischen Oszillator beschränken müssen.

Wir gehen dazu von der Kontinuumsform (7.1.14) des Pfadintegrals in der Hamilton-Formulierung aus:

$$U(t', x'; t, x) = \int_{(t,x)}^{(t',x')} Dx \int Dp \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x, p]\right). \quad (7.4.1)$$

Wir folgen der Rechnung in der gegitterten Version und führen zuerst das Pfadintegral bzgl. des kanonisch konjugierten Impulses p aus. Dieses Integral ist offenbar unabhängig vom Potential, denn es gilt

$$\begin{aligned} U(t', x'; t, x) &= \int_{(t,x)}^{(t',x')} Dx \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' V(x(t''))\right] \\ &\quad \times \int Dp \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \left(\dot{x}(t'') p(t'') - \frac{p^2(t'')}{2m}\right)\right]. \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

7. Pfadintegrale

In dem Pfadintegral bzgl. p in der zweiten Zeile haben wir \dot{x} als unabhängige von p unabhängige Variable zu sehen. Daher können wir die Integration formal bis auf eine von t und t' aber nicht von x , x' und dem Potential V abhängige multiplikative Konstante ausführen. Wie wir aus der Rechnung im Gitterformalismus wissen, ist diese Konstante für $\Delta t \rightarrow 0$ divergent, und erst zusammen mit der Ausführung auch des Pfadintegrals bzgl. x ergibt sich ein sinnvoller Limes. Daher lassen wir die besagte Konstante zunächst unbestimmt. Demnach gilt

$$U(t', x'; t, x) = N(t, t') \int_{(t, x)}^{(t', x')} Dx \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x]\right). \quad (7.4.3)$$

Um die unbestimmte Konstante $N(t, t')$ sinnvoll festzulegen, müssen wir das x -Pfadintegral für einen beliebigen Spezialfall ausrechnen, und dazu bietet sich das freie Teilchen an, für das wir den Propagator (2.11.25) bereits mehrfach berechnet haben.

7.4.1 Der Propagator des freien Teilchens

Der erste Schritt ist die Zurückführung auf ein Pfadintegral mit homogenen Randbedingungen durch Substitution im Pfadintegral auf die neuen Integrationsvariable $y(t) = x(t) - x_{\text{cl}}(t)$, wobei $x_{\text{cl}}(t)$ die klassische Trajektorie ist, welche die Randbedingungen $x_{\text{cl}}(t) = x$ und $x_{\text{cl}}(t') = x'$ erfüllt. Die klassische Trajektorie ist durch den stationären Punkt des Wirkungsfunktional, also die klassische Bewegungsgleichung gegeben. Für das freie Teilchen ist die Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2, \quad (7.4.4)$$

und die Euler-Lagrange-Gleichung lautet

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \ddot{x} \stackrel{!}{=} \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (7.4.5)$$

Die Lösung der Bewegungsgleichung, welche die Randbedingungen erfüllt, ist folglich

$$x_{\text{cl}}(t'') = x + \frac{x' - x}{t' - t} (t'' - t). \quad (7.4.6)$$

Wegen $Dy = Dx$ ergibt sich durch Entwicklung der Wirkung um x_{cl}

$$S[x_{\text{cl}} + y] = S[x_{\text{cl}}] + \int_t^{t'} dt'' \frac{m}{2} \dot{y}^2(t''), \quad (7.4.7)$$

wobei wir verwendet haben, daß $\delta S[x_{\text{cl}}]/\delta x = 0$ ist. Für die Wirkung der klassischen Trajektorie ergibt sich also

$$S[x_{\text{cl}}] = \frac{m}{2} \frac{(x' - x)^2}{t' - t} \quad (7.4.8)$$

und folglich für das Pfadintegral (7.4.3)

$$U(t', x'; t, x) = N(t', t) \exp\left(\frac{im(x' - x)^2}{2\hbar(t' - t)}\right) \int_{(t, 0)}^{(t', 0)} Dy \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \frac{m}{2} \dot{y}^2(t'')\right). \quad (7.4.9)$$

Das verbliebene Pfadintegral können wir nun formal lösen, indem wir es in der Form

$$\begin{aligned} F_0(t', t) &= N(t', t) \int_{(t,0)}^{(t',0)} \mathcal{D}y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \frac{m}{2} \dot{y}^2(t'')\right) \\ &= N(t', t) \int_{(t,0)}^{(t',0)} \mathcal{D}y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \frac{m}{2} y(t'')(-d_t^2)y(t'')\right) \end{aligned} \quad (7.4.10)$$

schreiben. Wir haben dabei im Wirkungsfunktional im Exponenten unter Verwendung der homogenen Randbedingungen partiell integriert. Wir fassen nun $\hat{\eta} = -d_t^2$ als linearen Operator auf, der auf dem Raum der Trajektorien mit den homogenen Randbedingungen definiert ist, den wir mit dem Skalarprodukt

$$(x_1, x_2) = \int_t^{t'} dt'' x_1(t'')x_2(t'') \quad (7.4.11)$$

zum Hilbertraum $L^2([t, t'], \mathbb{R})$ machen. Auf diesem Hilbertraum ist id_t bis auf Faktoren analog zum Impulsoperator in der Ortsdarstellung und folglich $-d_t^2$ selbstadjungiert. Freilich ist id_t selbst kein selbstadjungierter Operator, weil wir nur reellwertige $x(t)$ zulassen. Wir können dann (7.4.10) als Gauß-Integral lesen und einerseits durch Zeitgitterung tatsächlich auf ein vieldimensionales Gauß-Integral abbilden. Die entsprechende Rechnung haben wir für den harmonischen Oszillator schon oben durchgeführt. Hier wollen wir direkt eine **Funktionaldeterminante** für den kontinuierlichen Operator definieren. Da $-d_t^2$ ein positiv definit Operator ist, wie wir gleich noch nachweisen werden, müssen wir freilich im Exponenten von (7.4.10) $i \rightarrow i - 0^+$ setzen. Dann ergibt sich aus der gegitterten Form des Gauß-Integrals

$$F(t', t) = N(t', t) \left\{ \det \left[\frac{m}{2\pi i \hbar} (-d_t^2) \right] \right\}^{-1/2}. \quad (7.4.12)$$

Die Funktionaldeterminante ergibt sich nun als Produkt der Eigenwerte des entsprechenden Operators. Die Eigenwerte sind nun aber durch

$$-d_t^2 y = \omega^2 y \quad (7.4.13)$$

bestimmt. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist

$$y(t'') = A \cos(\omega t'') + B \sin(\omega t''). \quad (7.4.14)$$

Offenbar befriedigen genau die Funktionen

$$y_n(t'') = A \sin\left(\frac{n\pi(t'' - t)}{t' - t}\right) \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \quad (7.4.15)$$

die Randbedingungen $y_n(t) = y_n(t') = 0$. Die Eigenwerte des Operators unter der Determinante (7.4.12) sind also

$$\lambda = \frac{m}{2\pi i \hbar} \omega_n^2 \quad \text{mit } \omega_n = \frac{n\pi}{t' - t}. \quad (7.4.16)$$

Die Determinante ist also divergent wie zu erwarten, denn auch $N(t', t)$ ist im Kontinuumsmlimes divergent. Andererseits kennen wir von (2.11.25) die Lösung

$$F(t', t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)}} \quad (7.4.17)$$

und damit haben wir formal

$$N(t', t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)}} \sqrt{\det \left[\frac{m}{2\pi i \hbar} (-d_t^2) \right]}. \quad (7.4.18)$$

7.4.2 Propagator des harmonischen Oszillators

Wir können nun unser Resultat (7.4.18) verwenden, um abermals den Propagator für den harmonischen Oszillator direkt mit Kontinuumsmethoden zu berechnen. Dazu können wir gleich von (7.3.7) ausgehen, schreiben diese Formel aber mit Hilfe unseres universellen Faktors (7.4.18) in der Form

$$U(t', x'; t, x) = F(t', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right) \quad \text{mit} \quad F(t', t) = N(t', t) \int_{(t,0)}^{(t',0)} Dy \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[y]\right). \quad (7.4.19)$$

Nun ist das Pfadintegral ebenfalls ein Gauß-Integral. Der einzige Unterschied ist, daß in (7.4.12) $-d_t^2$ durch $-d_t^2 - \omega^2$ zu ersetzen ist. Die Eigenwerte des entsprechenden Operators unter der Determinante sind aber offensichtlich

$$\lambda_n = \frac{m}{2\pi i \hbar} (\omega_n^2 - \omega^2). \quad (7.4.20)$$

Mit (7.4.18) folgt damit aus (7.4.19)

$$F^2(t', t) = \frac{m}{2\pi i \hbar (t' - t)} \left[\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}\right) \right]^{-1}. \quad (7.4.21)$$

Mit $\alpha = \omega(t' - t)/\pi$ müssen wir also das unendliche Produkt

$$D(\alpha) = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2}\right) \quad (7.4.22)$$

bzw.

$$\ln D(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2}\right) \quad (7.4.23)$$

berechnen. Eine Methode ist die Anwendung von Summationsformeln mit Hilfe des Residuensatzes, die wir in Anhang C angeben. Das Resultat lautet im gegebenen Falle

$$D(\alpha) = \frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi} \quad (7.4.24)$$

und damit

$$F(t, t') = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t' - t)]}}. \quad (7.4.25)$$

Setzt man dies in (7.4.19) ein und beachtet (7.3.12), erhält man in der Tat wieder (7.3.19).

7.5 Die ζ -Funktionsmethode

Schließlich wollen wir noch eine Methode zur Berechnung der Propagatoren für das freie Teilchen und den harmonischen Oszillator besprechen, die auch in der Anwendung von Pfadintegralmethoden in der Quantenfeldtheorie nützlich ist, und zwar die sogenannte Methode der ζ -Funktions. Dabei geht man formal vom Pfadintegral in der Kontinuumschreibweise aus und berechnet den Propagator bis auf einen unbestimmten, i.a. divergenten Faktor, wobei man ähnlich wie oben zunächst das Funktionalintegral über die Impulse ausführt. Da die Teilchenbahnen im Impulsraum in keiner Weise restringiert

7.5. Die ζ -Funktionenmethode

werden, liefert dies formal bis auf einen indefiniten von den Zeit- und Ortskomponenten unabhängigen Faktor wieder das Ortsraumfadintegral mit der Wirkung im Lagrangeformalismus

$$U(t', x'; t, x) = \mathcal{N} \int_{(t,x)}^{(t',x')} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x]\right). \quad (7.5.1)$$

Dabei ist

$$S[x] = \int_t^{t'} dt'' \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right]. \quad (7.5.2)$$

Dabei ist $V(x) = 0$ für das freie Teilchen und $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ für den harmonischen Oszillator. Wie oben kann man die funktionale Integrationsvariable $y(t) = x(t) - x_{cl}(t)$ substituieren. Dabei ist x_{cl} die Lösung der klassischen Bewegungsgleichungen mit vorgegebenen Randbedingungen

$$\frac{\delta S}{\delta x} = 0, \quad x(t) = x, \quad x(t') = x'. \quad (7.5.3)$$

Da S in den betrachteten Fällen ein quadratisches Funktional von $x(t)$ ist, gilt

$$S[x] = S[x_{cl} + y] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2} \int_{t'}^t d\tau_1 \int_{t'}^t d\tau_2 y(\tau_1) y(\tau_2) \frac{\delta^2 S[x_{cl}]}{\delta x_{cl}(\tau_1) \delta x_{cl}(\tau_2)} = S[x_{cl}] + S[y]. \quad (7.5.4)$$

Die Funktionalintegration bzgl. y ist dabei über alle Trajektorien mit *homogenen* Randbedingungen $y(t') = y(t) = 0$ zu nehmen:

$$U(t', x'; t, x) = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right) \int_{(t,0)}^{(t',0)} \mathcal{D}y \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[y]\right) = F(t', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right). \quad (7.5.5)$$

Das verbliebene Pfadintegral ist wieder ein Gaußsches Funktionalintegral und damit eine Funktionaldeterminante. Für den harmonischen Oszillator (bzw. mit $\omega = 0$ auch für das freie Teilchen) ist

$$S[y] = \int_t^{t'} dt'' \frac{1}{2} y(t'') [-\ddot{y}(t'') - m\omega^2 y(t'')], \quad (7.5.6)$$

und dies ergibt, wieder bis auf einen indefiniten zeitunabhängigen Faktor

$$\begin{aligned} F(t', t) &= \int_{(t,0)}^{(t',0)} \mathcal{D}y \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[y]\right) \\ &= \mathcal{N}' [\text{Det}(-d_t^2 - \omega^2)]^{-1/2} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln[\tau^2(-d_t^2 - \omega^2)]\right\}. \end{aligned} \quad (7.5.7)$$

Dabei haben wir die indefinite multiplikative Konstante durch eine indefinite Zeitskala τ ausgedrückt. Die Spur berechnet man formal, indem man zunächst die Eigenwerte des Operators $-d_t^2 - \omega^2$ auf dem Funktionenraum der Trajektorien $y(t'')$ mit den homogenen Randbedingungen $y(t') = y(t) = 0$ bestimmt.

7.5.1 Freies Teilchen

Betrachten wir zuerst das **freie Teilchen**, also $\omega = 0$. Die Eigenwertaufgabe lautet dann

$$-\tau^2 \ddot{y}(t'') = \lambda y(t''). \quad (7.5.8)$$

Die Lösungen, die die Randbedingungen erfüllen, lauten

$$y_n(t'') = A \sin \left[\frac{\sqrt{\lambda_n}}{\tau} (t'' - t) \right], \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 \tau^2}{(t' - t)^2} n^2, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.5.9)$$

Die funktionale Spur ist damit definiert zu

$$\text{Tr} f(-\tau^2 d_t^2) = \sum_{n=1}^{\infty} f(\lambda_n). \quad (7.5.10)$$

Für $f(\lambda) = \ln \lambda$ in (7.5.7) divergiert freilich die Summe, und wir müssen den entsprechenden Ausdruck zunächst regularisieren. Dazu bietet sich die sogenannte ζ -Funktionenmethode an. Wir definieren dazu die Funktion

$$H(\alpha) = \frac{1}{\alpha} \text{Tr} [(-\tau^2 d_t^2)^{-\alpha}]. \quad (7.5.11)$$

Die Idee dieser Regularisierungsmethode ist es, die Funktion H als analytische Funktion von $\alpha \in \mathbb{C}$ aufzufassen und analytisch über den Bereich hinaus fortzusetzen, für den die Reihe (7.5.10) mit $f(\lambda) = \lambda^{-\alpha}/\alpha$ konvergiert. Die Laurent-Entwicklung von f um $\alpha = 0$ lautet nun

$$f(\lambda) = \frac{1}{\alpha} - \ln \lambda + \mathcal{O}(\alpha). \quad (7.5.12)$$

Damit wird formal

$$H(\alpha) = \frac{\mathcal{N}}{\alpha} - \text{Tr} [\ln(-\tau^2 d_t^2)] + \mathcal{O}(\alpha). \quad (7.5.13)$$

Dabei ist wieder \mathcal{N} ein irrelevanter indefiniter Faktor. Für (7.5.10) erhalten wir

$$H(\alpha) = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\pi \tau}{(t' - t)} \right)^{2\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2\alpha}} = \frac{\zeta(2\alpha)}{\alpha} \left[\frac{\pi \tau}{(t' - t)} \right]^{-2\alpha} = -\frac{1}{2\alpha} + \ln \left(\frac{2\tau}{t' - t} \right) + \mathcal{O}(\alpha). \quad (7.5.14)$$

Dabei ist ζ die **Riemannsche ζ -Funktion** [CH10], woher die Methode ihren Namen hat. Damit erhalten wir

$$\text{Tr} \ln(-\tau^2 d_t^2 - \omega^2) = -\ln \left(\frac{2\tau}{t' - t} \right) \quad (7.5.15)$$

und damit schließlich

$$\int_{(t,0)}^{(t',0)} \text{D}y \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[y] \right) = \sqrt{\frac{2\tau}{t' - t}}. \quad (7.5.16)$$

Bleibt schließlich noch die klassische Trajektorie (7.5.2) und die dazugehörige Wirkung zu bestimmen. Man rechnet sofort nach, daß die Bewegungsgleichung $\ddot{x} = 0$ mit den Randbedingungen $x(t') = x'$ und $x(t) = x$ durch

$$x_{\text{cl}}(t'') = \frac{x'(t'' - t) - x(t'' - t')}{t' - t} \quad (7.5.17)$$

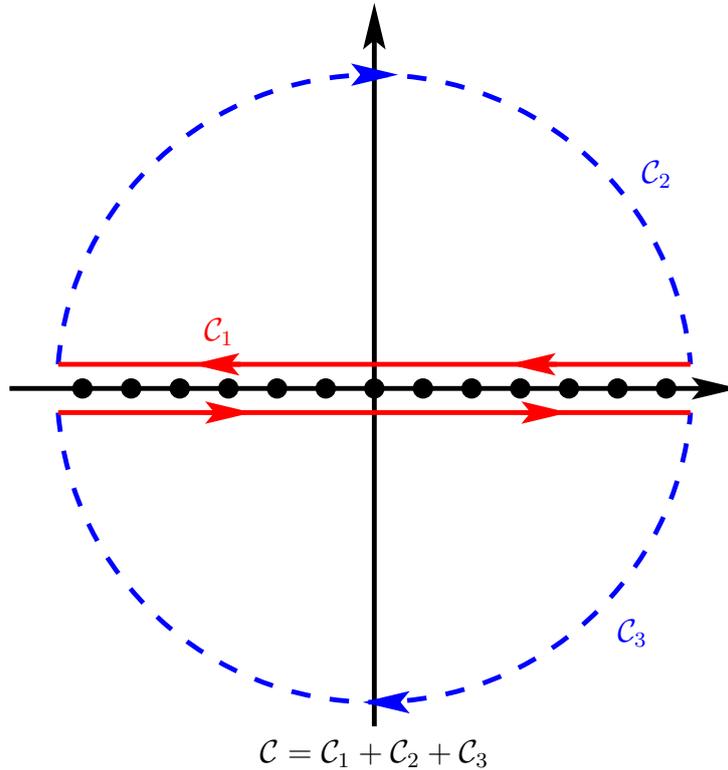


Abbildung 7.1: Kontur zur Integration der Funktion (7.5.26).

gelöst wird. Dies liefert schließlich die klassische Wirkung

$$S[x_{\text{cl}}] = \int_t^{t'} dt'' \frac{m}{2} \dot{x}^2(t'') = \frac{m}{2} \frac{(x' - x)^2}{t' - t}. \quad (7.5.18)$$

Damit erhalten wir schließlich mit (7.5.5) und (7.5.16)

$$U(t', x'; t, x) = \sqrt{\frac{2\tau}{t' - t}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(x' - x)^2}{t' - t}\right]. \quad (7.5.19)$$

Dabei haben wir den indefiniten Faktor \mathcal{N} in $\sqrt{\tau}$ subsumiert. Diesen unbestimmten Faktor ermittelt man nun leicht aus der Bedingung $U(t + 0^+, x'; t, x) = \delta(x - x')$. Integriert man dazu (7.5.19) über $x' \in \mathbb{R}$, wobei man $m \rightarrow m + i0^+$ betrachtet und verlangt dann, daß das Integral im Limes $t' \rightarrow t$ zu 1 wird, erhält man schließlich das bereits oben mehrfach hergeleitete Resultat

$$U(t', x'; t, x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t' - t)}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(x' - x)^2}{t' - t}\right]. \quad (7.5.20)$$

7.5.2 Harmonischer Oszillator

Auch für den harmonischen Oszillator können wir diese Methode anwenden. Dazu gehen wir von (7.5.7) aus und berechnen die entsprechenden die Eigenwerte von $-(d_\tau^2 + \omega^2)$ mit den Randbedingungen

7. Pfadintegrale

$x(t') = x(t) = 0$. Es ergeben sich die Eigenwerte

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{t' - t} \right)^2 - \omega^2. \quad (7.5.21)$$

Zur Abkürzung schreiben wir $A = \pi\tau/(t' - t)$ und $\tilde{\omega} = i\omega\tau$ und definieren

$$f(z, \tilde{\omega}) = \ln(\tilde{A}^2 z^2 + \tilde{\omega}^2). \quad (7.5.22)$$

Es ist klar, dass die Reihe $\sum_{n=1}^{\infty} f(n, \tilde{\omega})$ divergiert. Wir benötigen diese Reihe nur bis auf eine additive Konstante, und wir können einfach eine konvergente Reihe erzeugen, indem wir

$$\partial_{\tilde{\omega}} \sum_{n=1}^{\infty} f(n, \tilde{\omega}) = \sum_{n=1}^{\infty} g(n, \tilde{\omega}) \quad (7.5.23)$$

mit

$$g(z, \tilde{\omega}) = \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{A}^2 z^2 + \tilde{\omega}^2} \quad (7.5.24)$$

berechnen. Da weiter

$$\sum_{n=1}^{\infty} g(n, \tilde{\omega}) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(n, \tilde{\omega}) - \frac{1}{\tilde{\omega}}. \quad (7.5.25)$$

Um die Reihe zu berechnen, können wir wieder die in Anhang C beschriebene Methode verwenden, wobei wir $\tilde{\omega} > 0$ annehmen. Dann sind die Residuen der Funktion

$$F(z) = g(z, \tilde{\omega})\pi \cot(\pi z) \quad (7.5.26)$$

im Inneren der in Abb. 7.1 gezeigten Kontur offenbar bei $z = \pm i\tilde{\omega}/\tilde{A}$, und wir erhalten

$$\sum_{n=1}^{\infty} g(n, \tilde{\omega}) - \frac{1}{\tilde{\omega}} = \frac{\pi}{\tilde{A}} \coth\left(\frac{\tilde{\omega}\pi}{\tilde{A}}\right) - \frac{1}{\tilde{\omega}}. \quad (7.5.27)$$

Dies können wir nun wieder bzgl. $\tilde{\omega}$ integrieren und dann wieder $\tilde{\omega} = i\omega\tau$ und $A = \pi\tau/(t' - t)$ einsetzen. Die willkürliche additive Konstante denken wir uns dann wieder in $\ln \tau$ enthalten. Damit folgt

$$-2 \ln[F(t', t)] = \left[\sum_{n=1}^{\infty} f(n, i\omega\tau) \right]_{\text{reg}} = \ln \left[\frac{\sin[\omega(t' - t)]}{\omega\tau} \right]. \quad (7.5.28)$$

Schließlich benötigen wir gemäß (7.5.5) noch die Wirkung für die klassische Trajektorie, die die Randbedingungen $x(t') = x'$ und $x(t) = x$ erfüllt. Diese ergibt sich aus der klassischen Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} = -\omega^2 x \quad (7.5.29)$$

nach einiger Rechnung zu

$$S[x_{\text{cl}}] = \frac{m\omega \{(x^2 + x'^2) \cos[\omega(t' - t)] - 2xx'\}}{2 \sin[\omega(t' - t)]}. \quad (7.5.30)$$

Der noch unbestimmte konstante Faktor für den Propagator ergibt sich auf analoge Weise wie beim freien Teilchen durch Integration über x und die Randbedingung $U(t + 0^+, x'; t, x) = \delta(x' - x)$. Das Endergebnis lautet schließlich in Übereinstimmung mit (7.3.19)

$$U[x', t'; x, t] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t' - t)]}} \exp \left\{ \frac{i m \omega \{(x^2 + x'^2) \cos[\omega(t' - t)] - 2xx'\}}{2 \hbar \sin[\omega(t' - t)]} \right\}. \quad (7.5.31)$$

7.6 Die Zusammensetzungsregel für Pfadintegrale

Im folgenden leiten wir einige einfache allgemeine Eigenschaften von Pfadintegralen her. Als erstes bemerken wir, daß für den Zeitentwicklungsoperator die Zusammensetzungsregel

$$\mathbf{U}(t_3, t_1) = \mathbf{U}(t_3, t_2)\mathbf{U}(t_2, t_1) \quad \text{für } t_1 \leq t_2 \leq t_3 \quad (7.6.1)$$

gilt. Diese folgt unmittelbar aus

$$\mathbf{U}(t', t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t' - t)\right]. \quad (7.6.2)$$

Multiplikation von (7.6.1) von links mit $\langle x_3, 0 |$ und von rechts mit $|x_1, 0\rangle$ und Einschleiben einer Zerlegung der $\mathbb{1}$ mittels Orteigenzuständen, ergibt wegen (7.1.1)

$$U(x_3, t_3; x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 U(x_3, t_3; x_2, t_2)U(x_2, t_2; x_1, t_1). \quad (7.6.3)$$

Drücken wir die Zeitentwicklungskerne durch Pfadintegrale aus, erhalten wir daraus die **Zusammensetzungsregel für Pfadintegrale**

$$\int_{(t_1, x_1)}^{(t_3, x_3)} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{(t_1, x_1)}^{(t_2, x_2)} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right) \int_{(t_2, x_2)}^{(t_3, x_3)} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right), \quad (7.6.4)$$

die man auch direkt mittels der diskretisierten Version der Pfadintegralformel zeigen kann.

Eine eher intuitive Erklärung der Zusammensetzungsregel folgt wieder aus der Vorstellung, daß das Pfadintegral die kohäerente Überlagerung der Phasen für alle möglichen Ortsraumtrajektorien, die x_1 und x_3 zu den festgelegten Zeitpunkten t_1 und t_3 erreichen, ist. Diese Summe kann auch dadurch berechnet werden, daß zunächst das Teilchen zu der Zwischenzeit t_2 bei x_2 angelangt ist und von dort schließlich zur Zeit t_3 den Ort x_3 erreicht. Sämtliche möglichen Trajektorien erhält man schließlich, indem man auch über x_2 integriert.

Wir bemerken schließlich noch, daß wir auch die Übergangsmatrixelemente beliebiger **zeitgeordneter Produkte von Ortsoperatoren** über ein Ortsraumpfadintegral ausdrücken können. Dazu muß man nur die Kompositionsregel mehrfach anwenden und entsprechende Zeitentwicklungsoperatoren und Zerlegungen der $\mathbb{1}$ einschleiben (*Übung!*). Das Resultat lautet für $t_j \in (t, t')$ für $j \in \{1, \dots, k\}$

$$\langle x', t' | T_c \mathbf{x}(t_1) \mathbf{x}(t_2) \dots \mathbf{x}(t_k) | x, t \rangle = \int_{(t, x)}^{(t', x')} \mathcal{D}x x(t_1) x(t_2) \dots x(t_k) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right). \quad (7.6.5)$$

7.7 Herleitung der Schrödinger-Gleichung

In diesem Abschnitt wollen wir die Schrödinger-Gleichung für den Zeitentwicklungsoperator aus der Pfadintegraldarstellung (7.1.17) herleiten. Beginnen wir also wieder mit dem Ortsraumpfadintegral

$$U(t', x'; t, x) = \int_{(t, x)}^{(t', x')} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right). \quad (7.7.1)$$

Die Schrödinger-Gleichung erhalten wir, indem wir die Zeitableitung bzgl. t' berechnen. Aufgrund der Zusammensetzungsregel (7.6.3) gilt

7. Pfadintegrale

$$U(t' + \epsilon, x'; t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi U(t' + \epsilon, x'; t', \xi) U(t', \xi; x, t). \quad (7.7.2)$$

Dies entwickeln wir für kleine ϵ bis zur linearen Ordnung. Den ersten Summanden können wir dann als Pfadintegral mit nur einem diskreten Zeitschritt von t' nach $t' + \epsilon$ nähern. Daraus folgt

$$U(t', x'; t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x' - \xi)^2}{2\epsilon}\right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x') + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right] U(t', \xi; t, x). \quad (7.7.3)$$

Der Exponentialfaktor in diesem Integral oszilliert für $\epsilon \rightarrow 0$ sehr schnell, außer für $\xi \approx x'$. Der Hauptbeitrag zum Integral wird also von diesem Bereich herrühren. Substituieren wir also $\delta = x' - \xi$, können wir den Zeitentwicklungskern um $\delta = 0$ entwickeln:

$$U(t' + \epsilon, x'; t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\delta \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon}} \exp\left(\frac{im\delta^2}{2\hbar\epsilon}\right) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x') + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right] \\ \times \left[\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^k U(t', x'; t, x) \frac{(-\delta)^k}{k!} \right]. \quad (7.7.4)$$

Vertauschen wir Integration und Summation der Reihe, benötigen wir Integrale über eine Gaußfunktion, die mit einer beliebigen Potenz multipliziert sind. Diese gewinnt man am bequemsten aus der erzeugenden Funktion

$$f(\Lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} d\delta \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon}} \exp\left(\frac{im\delta^2}{2\hbar\epsilon} + \Lambda\delta\right). \quad (7.7.5)$$

Nach der üblichen Regularisierung mit einem kleinen Imaginärteil positiven Imaginärteil $m/\epsilon \rightarrow m/\epsilon + i0^+$ erhalten wir

$$f(\Lambda) = \hbar \exp\left(\frac{i\epsilon\Lambda^2}{2m}\right). \quad (7.7.6)$$

Daraus folgt

$$I_k := \int_{-\infty}^{\infty} d\delta \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon}} \delta^k \exp\left(\frac{im\delta^2}{2\hbar\epsilon}\right) = \frac{d^k f(\Lambda)}{d\Lambda^k} \Big|_{\Lambda=0}. \quad (7.7.7)$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ benötigen wir lediglich die folgenden Gleichungen

$$I_0 = 1, I_1 = 0, I_2 = \frac{i\hbar\epsilon}{m}, I_{2n} = \mathcal{O}(\epsilon^n), I_{2n+1} = 0 \quad \text{für } n \in \mathbb{N}. \quad (7.7.8)$$

Setzen wir dies in (7.7.4) ein, erhalten wir

$$U(t' + \epsilon, x'; t, x) = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x') + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right] \left(1 + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \partial_{x'}^2\right) U(t', x'; t, x). \quad (7.7.9)$$

Ziehen wir davon $U(t', x'; t, x)$ ab, multiplizieren mit $\frac{i\hbar}{\epsilon}$ und lassen schließlich $\epsilon \rightarrow 0$ streben, erhalten wir in der Tat die **Schrödingergleichung** für den Zeitentwicklungskern

$$i\hbar \partial_{t'} U(t', x'; t, x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{x'}^2 + V(x')\right] U(t', x'; t, x) \quad \text{für } t' > t. \quad (7.7.10)$$

Die Anfangsbedingung lautet selbstverständlich

$$U(t + 0, x'; t, x) = \delta(x' - x). \quad (7.7.11)$$

7.8 Potentialstreuung

Die Potentialstreuung ist besonders für die Pfadintegralformulierung geeignet. Die Resultate sind freilich schließlich die gleichen wie in der Operator- bzw. Wellenfunktionsformulierung (vgl. Kapitel 5). Wir betrachten wie dort die Streuung eines einzelnen Teilchens an einem vorgegebenen äußeren Potential, wobei wir davon ausgehen, daß das Potential hinreichend schnell im Unendlichen verschwindet, so daß Teilchen, die sich außerhalb der Reichweite R des Potentials befinden, als **asymptotisch frei** betrachtet werden können.

Im Heisenbergbild der Zeitentwicklung lauten die S -Matrixelemente

$$S_{fi} = \lim_{t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow \infty} \langle t_f, \vec{p}_f | \vec{p}_i, t_i \rangle, \quad (7.8.1)$$

wobei $|t_f, \vec{p}_f\rangle$ und $|\vec{p}_i, t_i\rangle$ diejenigen exakten Streulösungen sind, welche für $t \rightarrow \pm\infty$ in asymptotisch freien End- bzw. Anfangszustände mit Impulsen \vec{p}_f bzw. \vec{p}_i übergehen.

Bislang haben wir die Pfadintegralformulierung benutzt, um den Zeitentwicklungskern bzgl. der Ortsdarstellung zu berechnen. Diesen können wir nun aber auch für die Berechnung der S -Matrix verwenden, indem wir ihn in die Impulsdarstellung umrechnen. Mit (7.8.1) erhalten wir

$$S_{fi} = \lim_{t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow \infty} \int d^3\vec{x}_1 \int d^3\vec{x}_2 \underbrace{\langle t_f, \vec{p}_f | t_f, \vec{x}_1 \rangle}_{\varphi_{\vec{p}_f}^*(t_f, \vec{x}_1)} \underbrace{\langle t_f, \vec{x}_1 | t_i, \vec{x}_2 \rangle}_{U(t_1, \vec{x}_1; t_i, \vec{x}_2)} \underbrace{\langle t_i, \vec{x}_2 | t_i, \vec{p}_i \rangle}_{\varphi_{\vec{p}_i}(t_i, \vec{x}_2)}. \quad (7.8.2)$$

Die S -Matrixelemente können also in der Form

$$S_{fi} = \lim \int d^3\vec{x}_1 \int d^3\vec{x}_2 \varphi_{\vec{p}_f}^*(t_f, \vec{x}_1) U(t_f, \vec{x}_1; t_i, \vec{x}_2) \varphi_{\vec{p}_i}(t_i, \vec{x}_2) \quad (7.8.3)$$

geschrieben werden, wobei wir \lim als Abkürzung für den Limes $t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow \infty$ geschrieben haben. Die Wellenfunktionen $\varphi_{\vec{p}}$ können dabei durch die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung für ein freies Teilchen mit Impuls \vec{p} ersetzt werden¹:

$$\varphi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(-i\frac{\vec{p}^2}{2m}t + i\vec{p}\vec{x}\right). \quad (7.8.4)$$

Im folgenden wollen wir die störungstheoretische **Born-Reihe** mit Hilfe der Pfadintegralmethode herleiten. Der Ausgangspunkt ist wieder die Feynman-Kac-Formel für den Zeitentwicklungskern

$$U(t_f, \vec{x}_1; t_i, \vec{x}_2) = \int_{(t_i, \vec{x}_1)}^{(t_f, \vec{x}_2)} \mathcal{D}^3\vec{x} \exp\{iS[\vec{x}]\}. \quad (7.8.5)$$

Nun gilt

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[L_0(\vec{x}, \frac{d\vec{x}}{dt}) - V(x) \right] dt \quad \text{mit} \quad L_0\left(\vec{x}, \frac{d\vec{x}}{dt}\right) = S_0[x] + S_I[x] = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2. \quad (7.8.6)$$

¹Genau genommen müßten wir hier zunächst Wellenpakete, die im Impulsraum scharf um \vec{p} gepeakt sind verwenden und dann die entsprechenden Grenzwertbetrachtungen für ebene Wellen vornehmen. Dies haben wir aber schon in Kapitel 5 ausführlich erörtert, weshalb wir uns hier mit der folgenden mehr heuristischen Betrachtung begnügen.

7. Pfadintegrale

Dabei ist $S_0[x]$ das Wirkungsfunktional für freie Teilchen und $S_I[x]$ der Wechselwirkungsteil der vollen Wirkung. Wir entwickeln nun den Integranden des Pfadintegrals in Potenzen von S_I :

$$U(t_f, \vec{x}_f; t_i, \vec{x}_i) = \int_{(t_i, \vec{x}_i)}^{(t_f, \vec{x}_f)} \mathcal{D}^3 \vec{x} \exp\{iS_0[x]\} \times \left\{ 1 - i \int_{t_i}^{t_f} d\tau V[x(\tau)] + \frac{(-i)^2}{2!} \int_{t_i}^{t_f} d\tau_1 \int_{t_i}^{t_f} d\tau_2 V[x(\tau_1)]V[x(\tau_2)] + \dots \right\}. \quad (7.8.7)$$

Daraus ergibt sich, daß die „0te Näherung“ durch den Zeitentwicklungskern freier Teilchen gegeben ist. Durch dieselben Argumente wie oben bei der Berechnung des Pfadintegrals für Erwartungswerte zeitgeordneter Produkte von Operatoren finden wir für die Näherung erster Ordnung

$$U^{(1)}(t_f, \vec{x}_f; t_i, \vec{x}_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} d\tau_1 \int d^3 \vec{y} U_0(t_f, \vec{x}_f; \tau_1, \vec{y}_1) V(\vec{y}_1) U_0(\tau_1, \vec{y}_1; t_i, \vec{x}_i). \quad (7.8.8)$$

Bevor wir die nächsthöhere zweite Ordnung der Näherung betrachten, interpretieren wir zunächst dieses Resultat. Dazu betrachten wir den Integranden unter dem Integral in (7.8.8) zu einem vorgegebenen Zeitpunkt τ_1 . Um dies Interpretieren zu können, müssen wir die Formel entsprechend der Zeitordnung von rechts nach links lesen. Zunächst propagiert das Teilchen als freies Teilchen vom Anfangsort \vec{x}_i zur Zeit t_i zum Punkt \vec{y}_1 zur Zeit τ_1 , wo es vom Potential gestreut wird, von wo ab es sich wiederum als freies Teilchen bewegt, so daß es zur Zeit t_f zum Punkt \vec{x}_f gelangt (wo es ggf. vom Detektor registriert wird). Die Integrale über das Zeitintervall $[t_i, t_f]$ sowie über alle Punkte \vec{y}_1 ist wieder als kohärente Summe der Wahrscheinlichkeitsamplituden über alle möglichen Streuprozesse dieser Art betrachtet werden, was ja schon der Feynmansche Ausgangspunkt für die Entwicklung der Pfadintegralmethode ist. Dadurch ist auch die Bedeutung des Beitrags k -ter Ordnung der Störungsreihe klar: Dieser Term trägt der Möglichkeit Rechnung, daß das Teilchen nicht nur einmal sondern k -mal vom Potential bei allen möglichen Zwischenzeiten und -orten gestreut wird. Auch diese Beiträge sind entsprechend (7.8.7) kohärent zur Zeitentwicklungsamplitude aufzusummieren.

Wenden wir uns nun der zweiten Ordnung der Störungsentwicklung (7.8.7) zu. Dazu führen wir die Heavisidesche Sprungfunktion

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 0 & \text{für } \tau < 0, \\ 1 & \text{für } \tau \geq 0 \end{cases} \quad (7.8.9)$$

ein. Mit Hilfe dieser Funktion können wir den Term zweiter Ordnung in der Form

$$U^{(2)}(t_f, \vec{x}_1; t_i, \vec{x}_2) = \frac{(-i)^2}{2!} \int_{t_i}^{t_f} d\tau_1 \int_{t_i}^{t_f} d\tau_2 \times [\Theta(\tau_1 - \tau_2) U_0(t_f, \vec{x}_2; \tau_1, \vec{y}_1) V(\vec{y}_1) U_0(\tau_1, \vec{y}_1; \tau_2, \vec{y}_2) V(\vec{y}_2) U_0(\tau_2, \vec{y}_2; t_i, \vec{x}_2) + \Theta(\tau_2 - \tau_1) U_0(t_f, \vec{x}_2; \tau_2, \vec{y}_2) V(\vec{y}_2) U_0(\tau_2, \vec{y}_2; \tau_1, \vec{y}_1) V(\vec{y}_1) U_0(\tau_1, \vec{y}_1; t_i, \vec{x}_2)]. \quad (7.8.10)$$

Weiter führen wir den **retardierten Zeitentwicklungskern** durch

$$U_0^{(R)}(\tau_1, \vec{y}_1; \tau_2, \vec{y}_2) = \Theta(\tau_1 - \tau_2) U_0(\tau_1, \vec{y}_1; \tau_2, \vec{y}_2) \quad (7.8.11)$$

ein, so daß wir nach Vertauschen der Integrationsvariablen im zweiten Integral in (7.8.10) denselben Ausdruck wie im ersten Integral erhalten. Dieses Argument läßt sich auf den allgemeinen Term k -ter

7.8. Potentialstreuung

Ordnung in der Störungsreihe (7.8.7) anwenden, so daß wir schließlich

$$U^{(k)}(t_f, \vec{x}_f; t_i, \vec{x}_i) = (-i)^k \int d^4 y_1 \int d^4 y_2 \cdots \int d^4 y_k \quad (7.8.12)$$

$$\times U_0^{(R)}(t_f, \vec{x}_f; y_1) V(\vec{y}_1) U_0^{(R)}(\tau_1, \vec{y}_1; y_2) V(\vec{y}_2) \cdots V(\vec{y}_k) U_0^{(R)}(y_k; t_i, \vec{x}_i)$$

erhalten.

Dabei haben wir nunmehr eine vierdimensionale Schreibweise für die Raum-Zeit-Variablen (τ_k, \vec{y}_k) eingeführt. Bei den Integralen ist jede Zeitintegration über das Intervall $[\tau_i, \tau_f]$ und jede Integration über die Ortsvektoren über den ganzen \mathbb{R}^3 . Damit gelangen wir zur gleichen **Bornschen Reihe** für den Zeitentwicklungskern, den wir bereits von unserer Behandlung in Abschnitt 5.4 im Rahmen der Wellenmechanik gewonnen haben.

Nun können wir auch die **Feynman-Regeln** formulieren. Wir können sie direkt den Gleichungen (7.8.7) und (7.8.12) entnehmen. Sie reflektieren sozusagen die „Zeitevolution“ des Teilchens unter Einfluß des Potentials. Sie sind in einem Raum-Zeit-Diagramm zu lesen, wobei wir die Zeit von unten nach oben laufen lassen. Die horizontale Richtung im Diagramm steht dann für die räumlichen Koordinaten. Für jeden retardierten Zeitentwicklungskern $U^{(R)}(x_1; x_2)$ zeichnen wir eine Linie mit einem Pfeil, der vom Raumzeit-Punkt $x_2 = (t_2, \vec{x}_2)$ zum Raumzeit-Punkt $x_1 = (t_1, \vec{x}_1)$ weist. Dies entspricht der Richtung der Propagation des Teilchens. Jeder Wechselwirkungsbeitrag $-iV(\vec{x})$ wird durch einen „Sticker“ repräsentiert. Damit ergibt sich die anschauliche Bedeutung des Beitrages k -ter Ordnung der Bornreihe als einer Propagation praktisch freier Teilchen, die k -mal am Potential gestreut werden.

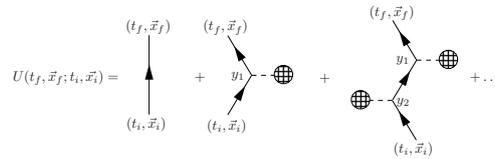


Abbildung 7.2: Diagrammatische Darstellung der Born-Reihe.

Aus dieser diagrammatischen Darstellungen können wir sofort auch die **Lippmann-Schwinger-Gleichung** ablesen:

$$U^{(R)}(x_1, x_2) = U_0^{(R)}(x_1, x_2) - i \int d^4 y U_0^{(R)}(x_1, y) V(y) U^{(R)}(y, x_2). \quad (7.8.13)$$

Aus (7.7.10) bzw. der entsprechenden Gleichung für den freien Propagator $U_0^{(R)}(x_1; x_2)$ erhalten wir unter Berücksichtigung der Θ -Funktion und ihrer Ableitung

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \Theta(t_1 - t_2) = \delta(t_1 - t_2) \quad (7.8.14)$$

die Gleichung

$$\left(i\partial_{t_1} + \frac{\Delta_1}{2m} \right) U_0^{(R)}(x_1; x_2) = i\delta^{(4)}(x_1 - x_2), \quad (7.8.15)$$

woraus folgt, daß $U_0^{(R)}$ die **retardierte Greensche Funktion** der freien Schrödinger-Gleichung ist, die sich durch die Randbedingung

$$U_0^{(R)}(x_1; x_2) \propto \Theta(t_1 - t_2), \quad (7.8.16)$$

7. Pfadintegrale

auszeichnet und die **Kausalstruktur** der Quantentheorie für die Bornsche Näherung ausdrückt. Der Zustand des Teilchens zur Zeit t wird allein durch Wechselwirkungsprozesse mit dem Potential zu früheren Zeiten bestimmt.

Verwenden wir (7.8.16) und (7.8.13), sehen wir, daß $U^{(R)}$ die volle retardierte Greensche Funktion der Schrödingergleichung für ein Teilchen unter Einfluß des Potentials V ist:

$$\left[i\partial_{t_1} + \frac{\Delta_1}{2m} - V(\vec{x}_1) \right] U^{(R)}(x_1; x_2) = i\delta^{(4)}(x_1 - x_2). \quad (7.8.17)$$

Diese Formulierung in der Ortsdarstellung ist nun zwar im obigen Sinne recht anschaulich. Sie ist aber für praktische Rechnungen aufgrund der verwickelten Zeitabhängigkeiten recht kompliziert. Es ist wesentlich einfacher, in der Impulsdarstellung zu arbeiten. Dazu müssen wir lediglich die Fourier-Darstellung des freien retardierten Propagators berechnen. Dazu gehen wir mit dem Ansatz

$$U_0(x_1; x_2) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \exp[i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] \tilde{U}_0(t_1; t_2; \vec{p}). \quad (7.8.18)$$

in Gleichung (7.8.15) ein. Dies liefert

$$\left(i\partial_{t_1} - \frac{\vec{p}^2}{2m} \right) U_0^{(R)}(t_1; t_2; \vec{p}) = i\delta(t_1 - t_2). \quad (7.8.19)$$

Damit erhalten wir die eindeutige Lösung für die Greensche Funktion der freien Schrödinger-Gleichung unter Vorgabe der Retardierungsbedingung (7.8.16) zu

$$U_0^{(R)}(t_1; t_2; \vec{p}) = \exp\left[-i\frac{\vec{p}^2}{2m}(t_1 - t_2)\right] \Theta(t_1 - t_2). \quad (7.8.20)$$

Diese Zeitabhängigkeit ist wesentlich einfacher zu handhaben als in der Ortsdarstellung. Setzen wir dieses Resultat in (7.8.8) für die erste Ordnung der Born-Reihe ein, erhalten wir nach einiger Rechnung als Näherung für das S -Matrixelement (7.8.3) zu

$$S_{fi}^{(1)} = \frac{-i}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\vec{p}_i - \vec{p}_f) \delta(E_f - E_i), \quad (7.8.21)$$

wobei E_f und E_i die kinetische Energie des asymptotisch frei aus- bzw. einlaufenden Teilchens

$$E_{f,i} = \frac{1}{2m} \vec{p}_{f,i}^2 \quad (7.8.22)$$

bezeichnen. Wir bemerken, daß die Grenzwerte $t_i \rightarrow -\infty$ und $t_f \rightarrow \infty$ nach Ausführung der Integrale zu nehmen waren, dann aber keine prinzipiellen Probleme mehr verursachten. Es ist klar, daß es sich um **schwache Grenzwerte** im Sinne der Distributionentheorie handelt. Die δ -Distribution in (7.8.21) garantiert die **Energieerhaltung** bei der Potentialstreuung. \tilde{V} bezeichnet die **Fourier-Transformierte** des Potentials:

$$\tilde{V}(\vec{p}) = \int d^3\vec{x} \exp[i\vec{p}\vec{x}] V(\vec{x}). \quad (7.8.23)$$

Jetzt wollen wir den **Wirkungsquerschnitt** für die Streuung am äußeren Potential berechnen. Dieser ist für einen Strom von Teilchen mit recht gut bestimmtem Impuls \vec{p}_i als das Verhältnis der Zahl der

7.8. Potentialstreuung

Teilchen, die in einen kleinen Impulsbereich um \vec{p}_f gestreut werden, zum einlaufenden Strom (d.h. Zahl der pro Zeit- und Flächeneinheit einlaufenden Teilchen).

Die Hauptschwierigkeit besteht dabei darin, daß das Streumatrixelement (7.8.21), das die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_f$ aufgrund der Streuung am Potential angibt, eine Distribution ist. Die entsprechende Übergangswahrscheinlichkeit sollte durch $|S_{fi}|^2$ gegeben sein. Allerdings enthält S_{fi} die δ -Distribution, die die Energieerhaltung widerspiegelt. Wir regularisieren daher das Matrixelement dadurch, daß wir in (7.8.3) zu einem endlichen aber großen Zeitintervall zurückgehen. In der ersten Ordnung der Störungstheorie ergibt dies

$$S_{fi}^{(1\text{reg})} = \frac{\tilde{V}(\vec{p}_f - \vec{p}_i) \{ \exp[-i(E_f - E_i)t_f] - \exp[-i(E_f - E_i)t_i] \}}{(2\pi)^3(E_f - E_i)}. \quad (7.8.24)$$

Nehmen wir davon das Betragsquadrat und dividieren durch $t_f - t_i$, erhalten wir nach einigen Umformungen

$$w_{fi}^{(1\text{reg})} = \frac{|\tilde{V}(\vec{p}_f - \vec{p}_i)|^2}{(2\pi)^5} \left(\frac{\sin[(E_f - E_i)(t_f - t_i)/2]}{(E_f - E_i)(t_f - t_i)/2} \right)^2 \frac{t_f - t_i}{2\pi}. \quad (7.8.25)$$

Dies ist die mittlere Übergangswahrscheinlichkeitsrate für das endliche Intervall $t_f - t_i$. Lassen wir dieses Intervall $t_f - t_i \rightarrow \infty$ werden, finden wir schließlich

$$w_{fi}^{(1)} = \frac{|\tilde{V}(\vec{p}_f - \vec{p}_i)|^2}{(2\pi)^5} \delta(E_f - E_i). \quad (7.8.26)$$

Wir erhalten wieder die energieerhaltende δ -Distribution. Da das Potential voraussetzungsgemäß nicht zeitabhängig ist, muß dies ja auch resultieren, da in diesem Fall die Energie beim Stoßprozeß erhalten ist.

Um nun den Wirkungsquerschnitt zu definieren, benötigen wir nur den Strom der einlaufenden Teilchen. Die Dichte der einlaufenden Teilchen ist durch $\rho(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2$, wobei ψ die asymptotisch freie Wellenfunktion für die einlaufenden Teilchen ist. Für die auf eine δ -Distribution im Impulsraum normierte ebene Welle ergibt dies $1/(2\pi)^3$ und folglich ist der einlaufende Strom $\vec{j}(t, \vec{x}) = \vec{p}_i / [(2\pi)^3 m]$. Dies ergibt sich auch aus dem Strom der Schrödingergleichung gemäß

$$\vec{j}(t, \vec{x}) = \frac{1}{2im} (\psi^* \nabla \psi - c.c.) = \frac{\vec{p}_i}{(2\pi)^3 m}. \quad (7.8.27)$$

Dividieren wir also die Übergangswahrscheinlichkeitsrate durch $|\vec{j}|$, ergibt sich schließlich der Streuquerschnitt in der ersten Ordnung der Störungstheorie (Bornsche Näherung) zu

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d^3\vec{p}_f} = \frac{m |\tilde{V}(\vec{p}_f - \vec{p}_i)|^2}{(2\pi)^2 |\vec{p}_i|} \delta(E_f - E_i). \quad (7.8.28)$$

Integrieren wir dieses Result über den Impulsbetrag, erhalten wir unter Verwendung der Gleichung

$$\delta(E_f - E_i) = \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - \frac{p_i^2}{2m}\right) = \frac{m}{p_i} \delta(p_f - p_i) \quad (7.8.29)$$

den Streuquerschnitt pro Raumwinkelelement zu

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} = \frac{m^2 |V(\vec{p}_f - \vec{p}_i)|^2}{(2\pi)^2 p_i^2} \quad \text{mit} \quad |\vec{p}_f| = |\vec{p}_i|. \quad (7.8.30)$$

7. Pfadintegrale

Kapitel 8

Vielteilchenquantentheorie

In diesem Kapitel wenden wir uns der Theorie von Systemen aus gleichartigen, d.h. ununterscheidbaren Teilchen zu. Während in der klassischen Physik Teilchen schon dadurch stets voneinander unterscheidbar bleiben, daß man sie durch ihre jeweiligen Anfangspositionen und -impulse kennzeichnen kann, ist es in der Quantentheorie unmöglich, auf Dauer Teilchen voneinander zu unterscheiden, es sei denn sie unterscheiden sich durch eine intrinsische Eigenschaft voneinander, d.h. z.B. durch ihre Masse, ihren Spin oder diverse Ladungsquantenzahlen.

8.1 Ein System von zwei ununterscheidbaren Teilchen

Wir betrachten zunächst zwei ununterscheidbare Teilchen mit Spin $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$. Zunächst ist eine Basis dieses Systems durch die Produktzustände

$$|\xi_1, \xi_2\rangle = |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle, \quad (8.1.1)$$

wobei wir mit $\xi_k = (\vec{x}_k, \sigma_k)$ bezeichnen, wobei \mathbf{x}_k Orts- und Spin-z-Komponente des k -ten Teilchens sind. Wir definieren nun den Permutationsoperator

$$\mathcal{P}_2 |\xi_1, \xi_2\rangle := |\xi_2, \xi_1\rangle. \quad (8.1.2)$$

Dieser Operator ergibt für identische Teilchen einen Sinn, weil die Einteilchenzustände in diesem Falle im gleichen Hilbertraum \mathcal{H}_1 liegen. Der Permutationsoperator wird nun auf den gesamten Produktraum $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ linear fortgesetzt. Da die Produktzustände (8.1.1) eine vollständige Basis von \mathcal{H}_2 bilden, bedeutet das

$$\mathcal{P}_2 |\Psi\rangle = \int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_2, \xi_1\rangle \langle \xi_1, \xi_2 | \Psi \rangle \quad \text{mit} \quad \int d\xi_1 := \sum_{\sigma_1=-s}^s \int d^3\vec{x}_1. \quad (8.1.3)$$

Es ist klar, daß \mathcal{P}_2 hermitesch ist und daß

$$\mathcal{P}_2^2 = \mathbb{1} \quad (8.1.4)$$

ist. Damit ist also \mathcal{P}_2 auch unitär.

Die Ununterscheidbarkeit der Teilchen impliziert weiter, daß **alle** Observablen \mathbf{A} im Zweiteilchenraum mit \mathcal{P}_2 kommutieren. Andernfalls wäre sonst der Operator

$$\mathbf{A}' = \mathcal{P}_2 \mathbf{A} \mathcal{P}_2 \quad (8.1.5)$$

von \mathbf{A} verschieden. Das kann aber nicht sein, weil \mathbf{A}' sich von \mathbf{A} nur dadurch unterscheidet, daß er sich auf ein System bezieht, bei denen lediglich die Teilchen untereinander vertauscht sind, und dann könnte man durch Messung von \mathbf{A} bzw. \mathbf{A}' die Teilchen doch voneinander unterscheiden.

Gehen wir wieder davon aus, daß wir eine irreduzible Darstellung der Observablenalgebra des Zweiteilchensystems betrachten, muß also im Hilbertraum für zwei ununterscheidbare Teilchen \mathcal{P}_2 diagonal sein, d.h. **alle** Vektoren müssen Eigenvektoren von \mathcal{P}_2 sein. Da die Eigenwerte von \mathcal{P}_2 wegen (8.1.4) nur ± 1 sein können, müssen aufgrund des Superpositionsprinzips also **alle** Vektoren entweder Eigenvektoren von \mathcal{P}_2 zum Eigenwert 1 oder -1 sein. Teilchen der ersten Art nennen wir **Bosonen** und der zweiten Art **Fermionen**. Es ist ein empirisches Faktum und läßt sich aus der relativistischen Quantentheorie unter recht schwachen Annahmen auch theoretisch begründen, daß **Teilchen mit ganzzahligem Spin Bosonen** und solche mit **halbzahligem Spin Fermionen** sind.

Der zur Beschreibung zweier ununterscheidbarer Teilchen geeignete Hilbertraum ist also nicht \mathcal{H}_2 , sondern nur einer der Teilräume \mathcal{H}_2^\pm zum Eigenwert ± 1 von \mathcal{P}_2 , je nachdem, ob es sich bei den Teilchen um Bosonen (oberes Vorzeichen) oder Fermionen (unteres Vorzeichen) handelt. Die geeigneten Basen sind durch die symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produkte der Einteilchenbasisvektoren mit sich selbst gegeben:

$$|\xi_1, \xi_2\rangle^\pm = \frac{1}{\sqrt{2!}}(|\xi_1, \xi_2\rangle \pm |\xi_2, \xi_1\rangle). \quad (8.1.6)$$

Um deren Vollständigkeit für die Räume \mathcal{H}_2^\pm zu zeigen, berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned} \pm \langle \xi_1, \xi_2 | \xi'_1, \xi'_2 \rangle^\pm &= 1/2! \langle \xi_1, \xi_2 \pm \xi_2, \xi_1 | \xi'_1, \xi'_2 \pm \xi'_2, \xi'_1 \rangle \\ &= \delta(\xi_1 - \xi'_1) \delta(\xi_2 - \xi'_2) \pm \delta(\xi_1 - \xi'_2) \delta(\xi_2 - \xi'_1). \end{aligned} \quad (8.1.7)$$

Dann folgt

$$\int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_1, \xi_2\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \xi_2 | \xi'_1, \xi'_2 \rangle^\pm = |\xi'_1, \xi'_2\rangle^\pm \pm |\xi'_2, \xi'_1\rangle^\pm = 2 |\xi'_1, \xi'_2\rangle^\pm \quad (8.1.8)$$

Wir haben also im Zweiteilchenraum die Vollständigkeitsrelation

$$\frac{1}{2!} \int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_1, \xi_2\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \xi_2 | = \mathbb{1}_2^\pm, \quad (8.1.9)$$

wobei wir den Identitätsoperator auf dem symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Zweiteilchenraum mit $\mathbb{1}_2^\pm$ bezeichnet haben.

8.2 Systeme von N ununterscheidbaren Teilchen und Fockraum

Die Argumente, die wir eben im Falle eines Systems aus zwei ununterscheidbaren Teilchen angewendet haben, können wir uns wörtlich wiederholt denken für N identische Teilchen. Freilich ist dann die Gruppe S_N der Permutationen von N Elementen größer, besteht nämlich aus $N! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot N$ Funktionen. Für $N \geq 3$ ist diese Gruppe auch nicht mehr Abels, und die Permutationsoperatoren \mathcal{P}_p auf dem N -fachen Produkt des Einteilchenraumes mit sich selbst \mathcal{H}_N sind daher nicht mehr simultan diagonalisierbar. Andererseits gilt nach wie vor unser physikalisches Argument, daß die Observablen unseres Systems allesamt mit *allen* Permutationsoperatoren vertauschen müssen und also nur solche Unterräume von \mathcal{H}_N zur Beschreibung von N ununterscheidbaren Teilchen geeignet sein können, in denen *alle* \mathcal{P}_p simultan diagonalisierbar sind und also das Bild dieser Darstellung abelsch sein muß. Die

Darstellungstheorie der symmetrischen Gruppe (vgl. z.B. [Smi61] Bd. III/1) besagt nun, daß es genau zwei abelsche Darstellungen gibt, nämlich die triviale, für die alle Permutationen durch den Einheitsoperator oder die alternierende, für die

$$\mathcal{P}_P^- = (-1)^{\sigma(P)} \quad \text{mit} \quad \sigma(P) = \begin{cases} 0 & \text{falls } P \text{ gerade Permutation} \\ 1 & \text{falls } P \text{ ungerade Permutation.} \end{cases} \quad (8.2.1)$$

Dabei heißt eine Permutation $P : \mathbb{N}_N = \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{N}_N$ gerade (ungerade), wenn man eine gerade (ungerade) Anzahl von Vertauschungen von Paaren, um das N -Tupel $(1, 2, \dots, N)$ in die durch die Permutation P vorgegebene Reihenfolge $(P(1), P(2), \dots, P(N))$ zu bringen.

Es ist dann weiter klar, daß die entsprechenden Bosonen- bzw. Fermionen- N -Teilchenräume von den vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produktzuständen einer beliebigen vollständigen Einteilchenbasis aufgespannt werden. Wir wählen zunächst wieder die Orts-Spin-Eigenbasis $\{|\vec{x}, \sigma\rangle\}$ als Einteilchenbasis. Dann haben wir¹

$$\begin{aligned} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in \mathbb{S}_N} (-1)^{\sigma(P)} |\xi_{P(1)} \otimes \dots \otimes \xi_{P(N)}\rangle \\ &:= \sqrt{N!} \mathcal{P}_N^\pm |\xi_{P(1)} \otimes \dots \otimes \xi_{P(N)}\rangle \end{aligned} \quad (8.2.2)$$

als eine vollständige orthonormierte Basis für den bosonischen bzw. fermionischen N -Teilchenraum \mathcal{H}_N^\pm definiert. Dabei ist n_k die Anzahl der in den Tensorprodukten vertretenen Einteilchenzustände ξ_k . Für Bosonen ist dabei $n_k \in \mathbb{N}_0$ und für Fermionen $n_k \in \{0, 1\}$ mit $\sum_k n_k = N$. Man rechnet leicht nach, daß der Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsoperator

$$\mathcal{P}_N^\pm = \frac{1}{N!} \sum_{P \in \mathbb{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \mathcal{P}_P \quad (8.2.3)$$

in vollständigen Produktraum \mathcal{H}_N hermitesch ist sowie die Projektionseigenschaft

$$(\mathcal{P}_N^\pm)^2 = \mathcal{P}_N^\pm \quad (8.2.4)$$

besitzt, d.h. er projiziert beliebigen Zustände in \mathcal{H}_N auf den vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Teilraum \mathcal{H}_N^\pm . Die Operatoren, die durch die Vertauschung von Einteilchenoperatoren in der Produktbasis

$$\mathcal{P}_P |\xi_1 \otimes \dots \otimes \xi_N\rangle = |\xi_{P(1)} \otimes \dots \otimes \xi_{P(N)}\rangle \quad (8.2.5)$$

vollständig definiert sind, sind unitär auf dem vollständigen Produktraum \mathcal{H}_N . Auf den Unterräumen für Bosonen und Fermionen \mathcal{H}_N^\pm realisieren diese Operatoren die beiden einzigen abelschen Darstellungen der symmetrischen Gruppe \mathbb{S}_N , denn offenbar gilt

$$\mathcal{P}_P |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm = (\pm 1)^{\sigma(P)} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm, \quad (8.2.6)$$

¹Es ist hierbei zu beachten, daß wir eine Basis mit verallgemeinerten Einteilchen-Eigenzuständen mit kontinuierlichem verwenden, die nur auf eine δ -Distribution normiert werden können, also $\langle \xi_1 | \xi_2 \rangle = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$, d.h. von den in den Produktzuständen in (8.2.2) auftretenden Einteilchenzustände dürfen keine zwei identisch sein. Würden wir mit einer echten Hilbertraumbasis mit auf 1 normierbaren Einteilchenzuständen arbeiten, könnten im bosonischen Fall beliebig viele gleiche Einteilchenzustände auftreten. Dann müssen wir noch einen zusätzlichen Normierungsfaktor $1/\prod_j \sqrt{n_j!}$ in (8.2.2) anbringen, wobei $n_j \in \mathbb{N}_0$ die Anzahl von Faktoren $|\xi_j\rangle$ in den Produktzuständen ist. Es muß natürlich $\sum_j n_j = N$ gelten, und die Formel mit dem zusätzlichen Normierungsfaktor gilt freilich auch für fermionische Zustände, weil dann $n_j \in \{0, 1\}$ und dann $n_j! = 1$ ist.

8. Vielteilchenquantentheorie

d.h. auf dem bosonischen (fermionischen) N -Teilchen-Hilbertraum \mathcal{H}_N^\pm handelt es sich um die triviale (alternierende) Darstellung der symmetrischen Gruppe.

Das Rechnen in diesen Räumen erweist sich jedoch als recht kompliziert. Zum Glück existiert ein Formalismus, die sog. **Feldquantisierung**, die Vielteilchenrechnungen erheblich vereinfacht. Um zu diesem Formalismus zu gelangen, müssen wir das Konzept einer festen Teilchenzahl verlassen. Wir betrachten stattdessen einen größeren Hilbertraum, in dem wir alle N simultan behandeln können, den sog. **Fockraum**. Wir postulieren dazu, daß es genau einen Zustand, das **Vakuum** $|\Omega\rangle$ gibt, der den Fall beschreibt, daß kein Teilchen vorhanden ist, d.h. der dazugehörige Hilbertraum ist eindimensional und addieren weiter orthogonal alle N -Teilchenräume auf:

$$\mathcal{H}_F^\pm = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^\pm. \quad (8.2.7)$$

In diesem Hilbertraum gilt für das Skalarprodukt der (anti-)symmetrisierten Produktzustände

$$\begin{aligned} {}^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \xi'_1, \dots, \xi'_{N'} \rangle^\pm &= \delta_{NN'} {}^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm \\ &= \delta_{NN'} \sum_{P \in S_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \prod_{k=1}^N \delta(\xi_k - \xi'_{P(k)}), \end{aligned} \quad (8.2.8)$$

und die Vollständigkeitsrelation für diese Basiszustände lautet

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N| = \mathbb{1}_{\text{Fock}}^\pm. \quad (8.2.9)$$

Das folgt unmittelbar aus der Vollständigkeitsrelation im vollen Produktraum \mathcal{H}_N :

$$\int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi_{j_1} \otimes \dots \otimes \xi_{j_N}\rangle \langle \xi_{j_1} \otimes \dots \otimes \xi_{j_N}| = \mathbb{1}_N. \quad (8.2.10)$$

In den bosonischen bzw. fermionischen Fockräumen \mathcal{H}_N^\pm ist $\mathbb{1}_N^\pm = \mathcal{P}_N^\pm = (\mathcal{P}_N^\pm)^2$, d.h. wir können (8.2.10) von links und von rechts mit \mathcal{P}_N^\pm multiplizieren und erhalten dann

$$\begin{aligned} \mathbb{1}_N^\pm &= \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N \mathcal{P}_N^\pm |\xi_{j_1} \otimes \dots \otimes \xi_{j_N}\rangle \langle \xi_{j_1} \otimes \dots \otimes \xi_{j_N}| \mathcal{P}_N^\pm \\ &= \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi_{j_1}, \dots, \xi_{j_N}\rangle^\pm \langle \xi_{j_1}, \dots, \xi_{j_N}|. \end{aligned} \quad (8.2.11)$$

Daraus entsteht $\mathbb{1}_{\text{Fock}}^\pm$ durch Summation über $N \in \mathbb{N}_0$ und damit (8.2.9).

Wir definieren nun **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren** im Fockraum, indem wir zunächst die Wirkung eines Erzeugungsoperators auf die N -Teilchenbasiszustände definieren:

$$\psi^\dagger(\xi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm := |\xi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm. \quad (8.2.12)$$

Der Erzeugungsoperator führt also den N -Teilchenbasiszustand in einen $N + 1$ -Teilchenbasiszustand über oder bildet im fermionischen Falle diesen Vektor auf 0 ab, wenn $|\xi\rangle$ schon in dem ursprünglichen (anti-)symmetrisierten Produktbasisvektor enthalten ist. Multiplizieren wir also die Vollständigkeitsrelation (8.2.9) mit dem Erzeugungsoperator, folgt sofort

$$\psi^\dagger(\xi) = |\xi\rangle^\pm \langle \Omega| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N|. \quad (8.2.13)$$

Durch hermitesche Adjunktion folgt, daß entsprechend

$$\psi(\xi) = |\Omega\rangle^\pm \langle \xi| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \cdots \int d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^{\pm\pm} \langle \xi, \xi_1, \dots, \xi_N| \quad (8.2.14)$$

ein Vernichtungsoperator ist, der den durch ξ gekennzeichneten Einteilchenzustand aus einem (anti-)symmetrisierten Basiszustand entfernt, sofern er enthalten war oder andernfalls den entsprechenden Vektor auf 0 abbildet. Insbesondere annulliert $\psi(\xi)$ für alle ξ den Vakuumzustand:

$$\psi(\xi)|\Omega\rangle = 0, \quad \langle \Omega|\psi^\dagger(\xi) = 0. \quad (8.2.15)$$

Mit Hilfe der Darstellungen (8.2.13) und (8.2.14) folgen unter Verwendung von (8.2.8) die folgenden Vertauschungsregeln:

$$[\psi(\xi_1), \psi(\xi_2)]_{\mp} = [\psi^\dagger(\xi_1), \psi^\dagger(\xi_2)]_{\mp} = 0, \quad [\psi(\xi_1), \psi^\dagger(\xi_2)]_{\mp} = \delta(\xi_1 - \xi_2). \quad (8.2.16)$$

Wir bemerken, daß wir es im bosonischen Falle formal mit einer Algebra zu tun haben, die den Leiteroperatoren für kontinuierlich viele durch ξ durchnummerierte harmonische Oszillatormoden entspricht (vgl. Kap. 3.6). Wie wir bei dessen Behandlung gesehen haben, ergeben sich allein aufgrund der Vertauschungsrelationen (8.2.16) bereits die (anti-)symmetrisierten Basiszustände. Sie entsprechen Besetzungszuständen für Oszillatormoden. Hier handelt es sich um Besetzungszustände für Teilchen. Es läßt sich auch leicht zeigen, daß im fermionischen Fall die Konstruktion des Fockraums allein aufgrund der Antikommutatorrelationen (8.2.16) möglich ist. Die Antikommutatorrelationen sorgen dabei automatisch für die Einhaltung des **Pauliprinzips**, wonach es keine Zustände gibt, in denen zwei oder mehr Teilchen ein und denselben Einteilchenzustand besetzen können. Freilich sorgen die (Anti-)Kommutatorrelationen auch für die korrekte (Anti-)Symmetrisierung der Fockraumbasiszustände.

Im folgenden wollen wir nun zeigen, daß wir die Quantenmechanik von Vielteilchensysteme identischer Bosonen oder Fermionen mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren formulieren können. In dem hier betrachteten nichtrelativistischen Fall hat das den Vorteil, daß es sich mit den Feldoperatoren i.a. einfacher rechnen läßt als im Hilbertraum fester Teilchenzahl mit (anti-)symmetrisierten Produktzuständen. Da die Teilchenzahl für nichtrelativistische Prozesse i.a. erhalten bleibt, sind diese Formalierungen der Vielteilchenquantenmechanik also vollständig äquivalent. Im relativistischen Falle stellt sich allerdings heraus, daß eine physikalisch befriedigende Beschreibung für Vielteilchensysteme fester Teilchenzahl problematisch ist und auch nicht der Erfahrung entspricht, denn bei Stoßprozessen mit relativistischen Energien können Teilchen-Antiteilchenpaare oder z.B. elektromagnetische Strahlen (im quantentheoretischen Bild also Photonen) erzeugt und/oder vernichtet werden.

8.3 Fockraumformulierung für Observablen

8.3.1 Die Teilchendichte

Betrachten wir zunächst den Operator für die **Teilchendichte**. Wir behaupten, daß die Teilchendichte für ein Teilchen mit Spinkomponente σ an der Position \vec{x} durch den Operator

$$\rho(\xi) = \psi^\dagger(\xi)\psi(\xi) \quad (8.3.1)$$

repräsentiert wird. Daß dies eine physikalisch sinnvolle Definition ist, ergibt sich durch Anwendung des Operators auf einen (anti-)symmetrisierten Basisfockzustand. Dazu berechnen wir zunächst den

Kommutator mit einem beliebigen Erzeugungsoperator:

$$\begin{aligned}
 [\varrho(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_- &= [\psi^\dagger(\xi)\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_- \\
 &= \psi^\dagger(\xi) [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_{\mp} \pm [\psi^\dagger(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_{\mp} \psi(\xi) \\
 &= \psi^\dagger(\xi) \delta(\xi - \xi_1).
 \end{aligned} \tag{8.3.2}$$

Nun können wir diese Vertauschungsrelation benutzen, um die Wirkung des Dichteoperators (8.3.1) auf den Basisfockzustand zu berechnen, indem wir den Fockzustand mittels Erzeugungsoperatoren darstellen:

$$\begin{aligned}
 \varrho(\xi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm &= \varrho(\xi) \psi^\dagger(\xi_1) \dots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \{ [\varrho(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)] + \psi^\dagger(\xi_1) \varrho(\xi) \} \psi^\dagger(\xi_2) \dots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \{ \psi^\dagger(\xi_1) \delta(\xi - \xi_1) + \psi^\dagger(\xi_1) \varrho(\xi) \} \psi^\dagger(\xi_2) \dots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \dots \\
 &= \psi^\dagger(\xi_1) \dots \psi^\dagger(\xi_N) \left\{ \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) + \varrho(\xi) \right\} |\Omega\rangle \\
 &= \psi^\dagger(\xi_1) \dots \psi^\dagger(\xi_N) \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) |\Omega\rangle \\
 &= \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm.
 \end{aligned} \tag{8.3.3}$$

Der Basisfockzustand ist also Eigenzustand des Operators (8.3.1) zum Eigenwert $\sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k)$. Das ist aber genau die Teilchendichte für die durch diesen Basisfockzustand repräsentierte physikalische Situation, daß N Teilchen mit wohlbestimmten Spin an wohlbestimmten Positionen sitzen.

Es ist weiter klar, daß der Operator für die Gesamtteilchenzahl durch Integration über den Raum und Summation über die Spinzustände des Teilchendichteoperators

$$\mathbf{N} = \int d\xi \varrho(\xi) \tag{8.3.4}$$

gegeben sein sollte. Integrieren wir die Beziehung (8.3.3) über ξ , finden wir in der Tat

$$\mathbf{N} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm = N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm, \tag{8.3.5}$$

d.h. der Basisfockzustand ist Eigenvektor von \mathbf{N} zum Eigenwert N , der Gesamtteilchenzahl dieses Zustands.

8.3.2 Einteilchenoperatoren

Betrachten wir nun Operatoren von Observablen im N -Teilchenraum, ist klar, daß diese mit allen Permutationsoperatoren \mathcal{P}_P ($P \in \mathcal{S}_N$) vertauschen müssen, weil sonst eben die Messung dieser Observablen eine Unterscheidbarkeit von Zuständen, die sich nur durch bestimmte Permutationen der Teilchen untereinander unterscheiden, erlauben würde, und das widerspricht wiederum der Ununterscheidbarkeit der Teilchen. Es ergibt also etwa keinen Sinn, nach dem Impuls eines bestimmten Teilchens zu fragen. Nur der Gesamtimpuls des Systems ist eine physikalisch sinnvolle Observable.

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

Sei nun also \mathbf{A} irgendeine auf ein Teilchen bezogene Observable, so können wir die Summe dieser Einteilchenobservable über alle Teilchen im System betrachten, also im N -Teilchenraum

$$\mathbf{A}_1^{(N)} = \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_k, \quad (8.3.6)$$

wobei wir zur Abkürzung

$$\mathbf{A}_k = \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{(k-1)\text{-mal}} \otimes \mathbf{A} \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{(N-k)\text{-mal}} \quad (8.3.7)$$

geschrieben haben.

Um eine Darstellung mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu erreichen, verwenden wir die auf den N -Teilchenraum eingeschränkte Vollständigkeitsrelation (8.2.9)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \frac{1}{(N!)^2} \int d\xi_1 \cdots \int d\xi_N \int d\xi'_1 \cdots \int d\xi'_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm \\ &\quad \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm \langle \xi'_1, \dots, \xi'_N |. \end{aligned} \quad (8.3.8)$$

Zur Berechnung des Matrixelements drücken wir die Bra- und Ketvektoren gemäß (8.2.2) mit Hilfe des (Anti-)Symmetrisierungsoperators durch Produktzustände aus. Dabei ist zu beachten, daß \mathcal{P}_N^\pm mit $\mathbf{A}_1^{(N)}$ vertauscht und die Projektionseigenschaft (8.2.4) besitzt:

$$\begin{aligned} &^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm = N! \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathcal{P}_N^\pm \mathbf{A}_1^{(N)} \mathcal{P}_N^\pm | \xi'_1 \otimes \cdots \otimes \xi'_N \rangle \\ &= N! \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} \mathcal{P}_N^\pm | \xi'_1 \otimes \cdots \otimes \xi'_N \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_{P(1)} \otimes \cdots \otimes \xi'_{P(N)} \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_k | \xi'_{P(1)} \otimes \cdots \otimes \xi'_{P(N)} \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \delta(\xi_1 - \xi'_{P(1)}) \cdots \delta(\xi_{k-1} - \xi'_{P(k-1)}) \langle \xi_k | \mathbf{A} | \xi'_{P(k)} \rangle \\ &\quad \times \delta(\xi_{k+1} - \xi'_{P(k+1)}) \cdots \delta(\xi_N - \xi'_{P(N)}) \end{aligned} \quad (8.3.9)$$

Im folgenden schreiben wir

$$A(\xi_j, \xi'_k) := \langle \xi_j | \mathbf{A} | \xi'_k \rangle \quad (8.3.10)$$

für das **Einteilchenmatrixelement**. Setzen wir (8.3.9) und (8.3.10) in (8.3.8) ein und integrieren in jedem Summanden der Summe über k über $\xi_1, \dots, \xi_{k-1}, \xi_{k+1}, \dots, \xi_N$, wobei wir die δ -Distributionen in (8.3.9) ausnutzen können, erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \int d\xi_k \int d\xi'_1 \cdots d\xi'_N A(\xi_k, \xi'_{P(k)}) \\ &\quad \times \left| \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(k-1)}, \xi_k, \xi'_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right\rangle^\pm \langle \xi'_1, \dots, \xi'_N |. \end{aligned} \quad (8.3.11)$$

8. Vielteilchenquantentheorie

In dem Bra-Vektor können wir nun die Argumente in die durch die Permutation vorgegebene Reihenfolge bringen. Da der Zustand vollständig (anti-)symmetrisiert ist, gilt

$$\pm \langle \xi'_1, \dots, \xi'_N | = (\pm 1)^{\sigma(P)} \pm \langle \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(N)} |. \quad (8.3.12)$$

In dem so umsortierten Bra- und auch im Ketvektor in (8.3.11) bringen wir nun noch das Argument $\xi'_{P(k)}$ bzw. ξ_k ganz nach vorne. Dazu müssen wir es mit den $k - 1$ davorstehenden Argumenten vertauschen. Dabei entsteht aufgrund der Antisymmetrie unter diesen Vertauschen jedesmal der Faktor $(\pm)^{k-1}$. Insgesamt erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P \in S_N} \sum_{k=1}^N \int d\xi_k \int d\xi'_1 \cdots d\xi'_N A(\xi_k, \xi'_{P(k)}) & \left| \xi_{P(k)}, \xi'_{P(1)}, \dots, \xi_{P(k-1)}, \xi_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right\rangle^{\pm} \\ & \pm \left\langle \xi'_{P(k)}, \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(k-1)}, \xi'_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right|. \end{aligned} \quad (8.3.13)$$

Nun können wir für jede Permutation die Integrationsvariablen umbenennen, ohne daß dies das Resultat ändert:

$$\begin{aligned} \xi_k &= \xi, \quad \xi'_{P(k)} = \xi'', \\ \xi'_{P(1)} &= \xi''_1, \dots, \quad \xi'_{P(k-1)} = \xi''_{k-1}, \quad \xi'_{P(k+1)} = \xi''_k, \dots, \quad \xi'_{P(N)} = \xi''_{N-1}. \end{aligned} \quad (8.3.14)$$

Daraus ersehen wir, daß in (8.3.13) jeder der Summanden sowohl bzgl. der Summe über die Permutationen als auch bzgl. der Summe über k stets den gleichen Beitrag liefert. Wir haben also einen Faktor $N! \cdot N$, was

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \frac{1}{(N-1)!} \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \\ &\quad \times \int d\xi''_1 \cdots d\xi''_{N-1} \left| \xi, \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right\rangle^{\pm\pm} \left\langle \xi'', \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right| \end{aligned} \quad (8.3.15)$$

ergibt. Nun wenden wir (8.2.12) und die entsprechende adjungierte Gleichung auf den Ket- und den Bravektor in (8.3.15) an:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \\ &\quad \times \underbrace{\psi^\dagger(\xi) \int d\xi''_1 \cdots d\xi''_{N-1} \frac{1}{(N-1)!} \left| \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right\rangle^{\pm\pm} \left\langle \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right|}_{\mathbb{1}_{N-1}^{\pm}} \psi(\xi''), \end{aligned} \quad (8.3.16)$$

wobei wir (8.2.9) für den $N - 1$ -Teilchenanteil des Fockraumes verwendet haben. Um nun $\mathbf{A}_1^{(\text{Fock})}$ zu erhalten, müssen wir nur noch die orthogonale Summe bzgl. N bilden

$$\mathbf{A}_1^{(\text{Fock})} = \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \psi^\dagger(\xi) \psi(\xi''). \quad (8.3.17)$$

Angesichts dieser einfachen Formel erscheint die eben durchgeführte Rechnung recht mühsam. In Abschnitt 8.3.5 werden wir die weitaus elegantere Methode der **Feldquantisierung** verwenden, um zum gleichen Resultat zu gelangen.

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

Betrachten wir aber noch einige Beispiele für Einteilchenoperatoren. Beginnen wir mit dem **Gesamtimpuls** des Vielteilchensystems. Im N -Teilchenraum ist offenbar

$$\vec{\mathbf{P}}^{(N)} = \sum_{k=1}^N \vec{\mathbf{p}}_k. \quad (8.3.18)$$

Der Gesamtimpuls ist also in dem obigen Sinne ein Einteilchenoperator. Das in (8.3.17) benötigte Einteilchenmatrixelement ist schnell berechnet:

$$\vec{p}(\xi, \xi'') = \langle \xi | \vec{\mathbf{p}} | \xi'' \rangle = -i \vec{\nabla}_x \langle \vec{x} | \vec{x}'' \rangle \delta_{\sigma\sigma''} = -i \vec{\nabla}_x \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'') \delta_{\sigma\sigma''}. \quad (8.3.19)$$

Dabei haben wir uns (2.4.4) bedient. Setzen wir dies in (8.3.17) ein und führen zunächst das Integral über \vec{x}'' und die Summe über σ'' aus, erhalten wir

$$\vec{\mathbf{P}}^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\xi) (-i \vec{\nabla}) \psi(\xi). \quad (8.3.20)$$

Angenommen wir betrachten Systeme von Teilchen, die nicht untereinander wechselwirken, so ist auch der Hamiltonoperator ein Einteilchenoperator:

$$\mathbf{H}_1^{(N)} = \sum_{k=1}^N \left[\frac{\vec{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{x}}_k) \right]. \quad (8.3.21)$$

Dabei ist V irgendein äußeres Potential (man denke z.B. an Elektronen, die sich in einem äußeren elektrostatischen Feld bewegen). Die Berechnung des Einteilchenmatrixelements bzgl. der Einteilchen-Orts-Spin-Basis berechnet sich wieder auf analoge Weise wie beim Impulsoperator. Das Ergebnis für die Einteilchengesamtenergie im Fockraum ist schließlich (*Übung!*)

$$\mathbf{H}_1^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\xi) \left[-\frac{1}{2m} \Delta + V(x) \right] \psi(\xi). \quad (8.3.22)$$

Ebenso zeigt man, daß der **Gesamtspinoperator** durch

$$\vec{\mathbf{S}}^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\vec{x}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma, \sigma'} \psi(\vec{x}, \sigma') \quad (8.3.23)$$

gegeben ist (*Übung!*).

8.3.3 Zweiteilchenoperatoren

Die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen wird i.a. durch ein **Potential** beschrieben, wobei wir der Einfachheit annehmen, die Kräfte seien Zentralkräfte und unabhängig von den Spinfreiheitsgraden der Teilchen. Für ein N -Teilchensystem lautet der entsprechende Operator

$$\mathbf{V}_2^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{j_1 \neq j_2} V(|\vec{\mathbf{x}}_{j_1} - \vec{\mathbf{x}}_{j_2}|). \quad (8.3.24)$$

Mit einer ähnlichen Rechnung wie oben für Einteilchenoperatoren zeigt man, daß die äquivalente Formulierung im Fockraum

$$\mathbf{V}_2^{(\text{Fock})} = \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \psi^\dagger(\xi_1) \psi^\dagger(\xi_2) \psi(\xi_2) \psi(\xi_1) \quad (8.3.25)$$

lautet (*Übung!*). Dabei ist für Fermionen auf die Reihenfolge der Erzeuger und Vernichter zu achten. Dieser Beitrag ist im Fall wechselwirkender Teilchen zu (8.3.22) zu addieren, um den Gesamthamiltonoperator zu erhalten.

8.3.4 Formulierung als Quantenfeldtheorie

Wir können nun am Beispiel nichtwechselwirkender Teilchen zeigen, daß die Vernichtungsoperatoren $\psi(\xi)$ der Schrödingergleichung genügen. Die obige Formulierung unserer Fockraumtheorie haben wir im **Schrödingerbild** vorgenommen. Deshalb sind die Operatoren $\psi(\xi)$ nicht zeitabhängig. Wir können aber den Operator berechnen, der gemäß unserem Postulat 4 (vgl. Abschnitt 2.2) die Zeitableitung des Feldoperators repräsentiert:

$$\dot{\psi}(\xi) = \frac{1}{i} [\psi(\xi), \mathbf{H}_1^{(\text{Fock})}]. \quad (8.3.26)$$

Zur Berechnung des Kommutators benötigen wir dazu für Bosonen und Fermionen etwas unterschiedliche Formeln. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für drei Operatoren \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} die Gleichungen

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}], \quad (8.3.27)$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = \{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}\mathbf{C} - \mathbf{B}\{\mathbf{A}, \mathbf{C}\}. \quad (8.3.28)$$

Offenbar müssen wir in (8.3.26) für den Hamiltonoperator (8.3.22) einsetzen². Wir können dabei das Integral aus dem Kommutator herausziehen. Dann entsteht der Kommutator

$$\begin{aligned} [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi') \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi')] &= [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi')]_{\mp} \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi') \pm \psi^\dagger(\xi') \underbrace{[\psi(\xi), \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi')]_{\mp}}_{\hat{H}_{\xi'} [\psi(\xi), \psi(\xi')]_{\mp}} \\ &\stackrel{(8.2.16)}{=} \delta(\xi - \xi') \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi') \end{aligned} \quad (8.3.29)$$

wobei wir mit \hat{H} den Einteilchenhamiltonoperator in der Ortsdarstellung bezeichnet haben, der klar vom entsprechenden Fockraumoperator $\mathbf{H}_1^{(\text{Fock})}$ unterschieden werden muß. Integration dieser Gleichung bzgl. ξ' liefert dann

$$i\dot{\psi}(\xi) = \hat{H}\psi(\xi) = \left[-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\xi). \quad (8.3.30)$$

In der Tat erfüllt also die kovariante Zeitableitung des Feldoperators die **Schrödingergleichung**. Gehen wir zum **Heisenbergbild** über, wird die Analogie vollkommen, denn im Heisenbergbild entspricht die kovariante Zeitableitung der gewöhnlichen Ableitung der Operatoren nach der Zeit. Das läßt sich auch leicht explizit nachprüfen. Denn wegen (2.10.5) und (2.11.1) gilt

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{H}_H^{(\text{Fock})}\mathbf{B} \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_H^{(\text{Fock})} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\mathbf{B}^\dagger. \quad (8.3.31)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung von links mit \mathbf{B}^\dagger erhalten wir (wieder wegen (2.10.1))

$$\mathbf{B}^\dagger \frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{H}^{(\text{Fock})} \quad (8.3.32)$$

bzw. durch erneutes Multiplizieren mit \mathbf{B} von links

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}. \quad (8.3.33)$$

²Freilich müssen wir die Integrationsvariable umbenennen, um nicht in Konflikte mit dem Argument ξ in (8.3.26) zu geraten! Nennen wir also die Integrationsvariable ξ' .

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

Da der Hamiltonoperator im Schrödingerbild $\mathbf{H}^{(\text{Fock})}$ nicht von der Zeit abhängt, ist

$$\mathbf{B} = \exp\left(it\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\right). \quad (8.3.34)$$

Also ist

$$\mathbf{H}_H^{(\text{Fock})} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{H}^{(\text{Fock})} \quad (8.3.35)$$

und der Feldoperator im Heisenbergbild

$$\psi_H(t, \xi) = \mathbf{B}\psi(\xi)\mathbf{B}^\dagger. \quad (8.3.36)$$

Ableiten dieses Ausdrucks nach der Zeit liefert unter Verwendung von (8.3.34) in der Tat sofort

$$\partial_t \psi_H(t, \xi) = -i\mathbf{B} \left[\psi(\xi), \mathbf{H}^{(\text{Fock})} \right] \mathbf{B}^\dagger = \frac{1}{i} \mathbf{B} \hat{H} \psi(\xi) \mathbf{B}^\dagger = \frac{1}{i} \hat{H} \psi_H(t, \xi). \quad (8.3.37)$$

Der **Feldoperator im Heisenbergbild** erfüllt also dieselbe Schrödingergleichung wie die Wellenfunktion für ein Teilchen. Historisch wurde der Fock-Raumformalismus daher auch als „**zweite Quantisierung**“ bezeichnet. Dabei verstand man als „erste Quantisierung“ den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik, indem man Ort und Impuls als Operatoren im Hilbertraum auffaßte und korrespondenzmäßig (d.h. über die Identifikation der Poissonklammeralgebra der klassischen Theorie mit der Kommutatoralgebra der Operatoren) die kanonischen Kommutatorrelationen festlegte. Die Fock-Raumformulierung der Vielteilchentheorie bezeichnete man dann als die „zweite Quantisierung“. In der Tat kann man die Kommutatorrelationen durch „kanonische Quantisierung“ aus der **Hamilton-Formulierung des Prinzips der kleinsten Wirkung** für klassische Feldtheorien gewinnen (wobei wieder die Poissonklammern der klassischen Theorie auf Kommutatoren in der Quantentheorie führen). Unser Zugang zur Fock-Raumformulierung zeigt aber, daß es sich nicht um eine neue Theorie handelt, sondern lediglich um eine alternative mathematische Formulierung der Quantentheorie eines Vielteilchensystems gleichartiger Teilchen, wobei als einziges neues Postulat das **Prinzip von der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen** hinzugetreten ist, welches uns auf die vollständig symmetrischen (antisymmetrischen) N -Teilchenräume für Bosonen (bzw. Fermionen) geführt hat.

Es ist weiter klar, daß wir den nunmehr hergeleiteten Fock-Raumformalismus auch mit irgendeiner anderen Einteilchenbasis hätten beginnen können, z.B. mit der Impuls-Spindarstellung. Das führt natürlich wieder auf dieselbe Theorie wie unsere Orts-Spindarstellung.

Im Fall **wechselwirkender Teilchen**, z.B. wenn der Hamiltonoperator eine Zweiteilchenwechselwirkung der Art (8.3.25) enthält, werden die operatorwertigen Bewegungsgleichungen nichtlinear, und man kann i.a. keine Lösungen für diese Gleichungen finden. Daher ist man bei wechselwirkenden Teilchen auf Näherungsverfahren wie die Störungstheorie angewiesen, die wir im nächsten Kapitel besprechen werden.

8.3.5 Kanonische Feldquantisierung

Man kann auf die quantentheoretische Formulierung der Vielteilchensysteme im **Fock-Raum** auch noch auf andere Weise gelangen, und zwar indem man in Analogie zur kanonischen Quantisierung von Punktteilchensystemen zunächst eine klassische Feldtheorie betrachtet und die Feldgleichungen aus dem **Hamiltonschen Prinzip der kleinsten Wirkung** herleitet und dann über die **Poisson-Klammern** der klassischen Theorie zu Kommutator- bzw. Antikommutatorregeln für bosonische bzw. fermionische Feldoperatoren übergeht. Die Rechtfertigung dieses eher heuristischen Verfahrens besteht darin, daß sich daraus die korrekten Kommutatorregeln für die Operatoren der Galileigruppe, formuliert

in der Fock-Raumdarstellung für das Vielteilchenproblem, ergeben. Freilich stimmen die über diese Methode gewonnenen Kommutatorregeln und damit die Konstruktion des Fock-Raums mit den oben hergeleiteten Resultaten überein. Als Beispiel betrachten wir nichtwechselwirkende Spin-1/2-Teilchen in einem vorgegebenen äußeren elektromagnetischen Feld wie in Abschnitt 6.11.

Um die kanonische Feldquantisierung durchführen zu können, benötigen wir zunächst die Formulierung einer klassischen Feldtheorie durch das Hamiltonsche Prinzip der kleinsten Wirkung. Wir suchen also zuerst eine Lagrangefunktion, die auf die **Pauli-Gleichung** (6.11.31) führt. Allgemein betrachten wir die Felder $\psi_\sigma(t, \vec{x})$ als kontinuierlich viele Freiheitsgrade, die durch \vec{x} und σ parametrisiert sind, wobei σ freilich nur die diskreten Werte $\pm 1/2$ annehmen kann. Entsprechend sollte sich die **Lagrange-Funktion** aus einer **Lagrange-Dichte** vermöge

$$L[\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*; t] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{L}(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*; t, \vec{x}) \quad (8.3.38)$$

ergeben. Dabei behandeln wir ψ und ψ^* als unabhängige Feldfreiheitsgrade, da die Spinorkomponenten der Felder komplexwertig sind und im Hamiltonschen Prinzip Real- und Imaginärteil als unabhängige reelle Feldfreiheitsgrade angesehen werden können. Dazu äquivalent ist es, die Spinorkomponenten und ihr konjugiert Komplexes als unabhängig voneinander anzunehmen.

Um die Bewegungsgleichungen herzuleiten, betrachten wir die **Wirkung**

$$A[\psi, \psi^*] = \int_{t_1}^{t_2} dt L[\psi, \psi^*, t] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{L}(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*; t, \vec{x}). \quad (8.3.39)$$

Wieder in Analogie zur kanonischen Mechanik der Punktteilchen, ergeben sich die Bewegungsgleichungen aus der Stationarität der Wirkung unter unabhängiger Variation der Spinorfeldkomponenten ψ und ψ^* unter der Einschränkung

$$\delta\psi_\sigma(t_1, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma(t_2, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma^*(t_1, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma^*(t_2, \vec{x}) = 0. \quad (8.3.40)$$

Führen wir die Variation aus, erhalten wir wegen

$$\delta\dot{\psi}_\sigma = \partial_t(\delta\psi_\sigma), \quad \delta\dot{\psi}_\sigma^* = \partial_t(\delta\psi_\sigma^*), \quad \delta\vec{\nabla}\psi_\sigma = \vec{\nabla}(\delta\psi_\sigma), \quad \delta\vec{\nabla}\psi_\sigma^* = \vec{\nabla}(\delta\psi_\sigma^*) \quad (8.3.41)$$

durch partielle Integration nach t bzw. \vec{x}

$$\begin{aligned} \delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left\{ \delta\psi_\sigma \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_\sigma)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\psi_\sigma)} \right] \right. \\ \left. + \delta\psi_\sigma^* \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_\sigma^*)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\psi_\sigma^*)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8.3.42)$$

Damit dies für unabhängige Variationen der ψ_σ und ψ_σ^* verschwindet, müssen die eckigen Klammern verschwinden. Dies liefert die **Euler-Lagrange-Gleichungen** für Felder

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_\sigma)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\psi_\sigma)} \right] &= 0, \\ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_\sigma^*)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\psi_\sigma^*)} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (8.3.43)$$

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

Da die Wirkung ein reelles Funktional sein muß, sind die ersten Gleichungen gerade das Konjugiert Komplexe der zweiten Gleichungen, und man muß nur einen Satz Gleichungen wirklich ausrechnen. Eine Lagrange-Dichte für die Pauligleichung ist offenbar durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i\psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} [(i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma^*] \cdot [(-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma] - q\Phi \psi_\sigma^* \psi_\sigma \\ & + \frac{1}{2} g_s \mu_B \psi_\sigma^* \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'} \end{aligned} \quad (8.3.44)$$

gegeben. Um zu zeigen, daß für diese Lagrange-Dichte aus den Euler-Lagrange-Gleichungen tatsächlich die Pauli-Gleichung resultiert, bilden wir die entsprechenden Ableitungen nach ψ_σ^* :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} &= i\partial_t \psi_\sigma + \frac{q\vec{A}}{2m} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma - q\Phi \psi_\sigma + \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma^*)} &= 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*)} = \frac{1}{2m} (-\vec{\nabla} + iq\vec{A})\psi_\sigma. \end{aligned} \quad (8.3.45)$$

Dies in (8.3.42) eingesetzt, liefert

$$i\partial_t \psi_\sigma + \frac{q\vec{A}}{2m} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma - q\Phi \psi_\sigma + \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'} - \frac{1}{2m} [-\Delta \psi_\sigma + iq\vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\psi_\sigma)] = 0. \quad (8.3.46)$$

Dies zusammengefaßt ergibt schließlich

$$i\partial_t \psi_\sigma = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{A})^2 \psi_\sigma + q\Phi \psi_\sigma - \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}. \quad (8.3.47)$$

Dies ist in der Tat die Pauli-Gleichung (6.11.31) in Komponentenschreibweise, d.h. die Lagrangedichte (8.3.44) repräsentiert tatsächlich die Feldtheorie für ein Spin-1/2-Feld, das der Pauli-Gleichung genügt. Um kanonisch quantisieren zu können, müssen wir allerdings zur **Hamiltonschen Formulierung** des Wirkungsprinzips übergehen. Auch hier geht man wieder analog zur Punktmechanik vor. Da wir es allerdings nun mit kontinuierlich vielen Freiheitsgraden zu tun haben, müssen wir zunächst **Funktionalableitungen** definieren. Betrachten wir dazu die Lagrangefunktion (8.3.38) und bilden die Variation nach ψ_σ mit $\delta \psi_\sigma^* = \delta \psi_\sigma = \delta \psi_\sigma^*$:

$$\delta L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \left[\delta \psi_\sigma \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} + \delta (\vec{\nabla} \psi_\sigma) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right]. \quad (8.3.48)$$

Da wir bei der Variation $\delta \vec{x} = \delta t = 0$ voraussetzen, gilt wieder $\delta (\vec{\nabla} \psi_\sigma) = \vec{\nabla} \delta \psi_\sigma$, so daß wir im zweiten Term partiell integrieren können, was zu

$$\delta L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \delta \psi_\sigma \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right] \quad (8.3.49)$$

führt. Daher definieren wir als die **Funktionalableitung** von L nach ψ_σ

$$\frac{\delta L}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)}. \quad (8.3.50)$$

Entsprechend folgt (*Übung!*)

$$\frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma(t, \vec{x})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma}. \quad (8.3.51)$$

Wieder analog zur klassischen Mechanik führen wir die **kanonisch konjugierten Feldimpulse**

$$\Pi_\sigma(t, \vec{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma} = i\psi_\sigma^*, \quad \Pi_\sigma^*(t, \vec{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma^*} = 0, \quad (8.3.52)$$

ein. Die Hamiltonfunktion folgt dann als **funktionale Legendretransformation**:

$$H[\psi, \psi^*, \Pi, \Pi^*] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} [\Pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma + \Pi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma^*] - L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \mathcal{H}(\Pi, \Pi^*, \psi, \psi^*, \vec{\nabla} \psi, \vec{\nabla} \psi^*). \quad (8.3.53)$$

Die **Hamilton-Dichte** ist also durch

$$\mathcal{H} = \Pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma + \Pi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma^* - \mathcal{L} \quad (8.3.54)$$

gegeben. Mit der Lagrangedichte (8.3.44) für die Pauli-Gleichung folgt

$$\Pi_\sigma = i\psi_\sigma^*, \quad (8.3.55)$$

und (*Übung*)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2mi} [(\vec{\nabla} + iq\vec{A})\Pi_\sigma] \cdot [(\vec{\nabla} - iq\vec{A})\psi_\sigma] + \frac{\Phi}{i} \Pi_\sigma \psi_\sigma - \frac{g_s \mu_B}{2i} \Pi_\sigma (\vec{B} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}) \psi_{\sigma'}. \quad (8.3.56)$$

Es ist leicht zu zeigen, daß die **Hamiltonschen kanonischen Feldgleichungen**

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_\sigma &= \frac{\delta H}{\delta \Pi_\sigma} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_\sigma} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla} \Pi_\sigma)}, \\ \dot{\Pi}_\sigma &= -\frac{\delta H}{\delta \psi_\sigma} = - \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_\sigma} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right] \end{aligned} \quad (8.3.57)$$

für ψ wieder auf die Pauli-Gleichung (8.3.47) und für Π auf die konjugiert komplexe Pauli-Gleichung führen (*Übung!*). Wie in der klassischen Mechanik ist also die Hamilton-Formulierung äquivalent zur Lagrange-Formulierung des Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung.

Im hier vorliegenden Falle folgt der Zusammenhang (8.3.55) zwischen kanonischen Feldimpulsen und Feldern nicht aus den Hamiltonschen kanonischen Feldgleichungen, weil die Lagrange-Dichte linear in $\dot{\psi}$ und entsprechend die Hamilton-Dichte linear in Π ist. Da allerdings die kanonische Feldgleichung für Π gerade die konjugiert komplexe Pauli-Gleichung für ψ^* erfüllt, können wir (8.3.55) als Nebenbedingung voraussetzen.

Wie in der klassischen Mechanik können wir vermöge

$$\{A, B\}_{\text{pb}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \left[\frac{\delta A}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} \frac{\delta B}{\delta \Pi_\sigma(t, \vec{x})} - \frac{\delta A}{\delta \Pi_\sigma(t, \vec{x})} \frac{\delta B}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} \right] \quad (8.3.58)$$

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

auch **Poisson-Klammern** für beliebige Funktionale der Felder und kanonischen Feldimpulse definieren. Dabei sind die Funktionale über ihre entsprechenden Dichten

$$A[\psi, \Pi] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{A}(\psi, \Pi, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\Pi, \dots) \quad (8.3.59)$$

definiert. Aus den Hamiltonschen kanonischen Gleichungen folgt dann für die Zeitableitung eines beliebigen Funktionals

$$\frac{d}{dt}A[\psi, \Pi] = \{A, H\}_{\text{pb}}. \quad (8.3.60)$$

Auch die Bewegungsgleichungen, die sich aus den Hamiltonschen Kanonischen Gleichungen (8.3.57) ergeben, können mit Poissonklammern ausgedrückt werden, denn wegen

$$\psi_{\sigma}(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \quad (8.3.61)$$

ist

$$\frac{\delta\psi_{\sigma}(t, \vec{x})}{\delta\psi_{\sigma'}(t, \vec{x}')} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (8.3.62)$$

Daraus folgen insbesondere die elementaren Poisson-Klammerbeziehungen

$$\begin{aligned} \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} &= \left\{ \Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} = 0, \\ \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \end{aligned} \quad (8.3.63)$$

Entsprechend der kanonischen Quantisierung in der Punktmechanik können nun die Poisson-Klammerrelationen für Funktionale der klassischen Felder als Kommutatorrelationen für **bosonische Feldoperatoren** uminterpretiert werden:

$$\begin{aligned} \left[\psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] &= \left[\Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] = 0, \\ \left[\psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] &= i\delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{Bosonen}). \end{aligned} \quad (8.3.64)$$

Für **fermionische Feldoperatoren** müssen wir hingegen **Antikommutatorrelationen** postulieren:

$$\begin{aligned} \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} &= \left\{ \Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} = 0, \\ \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} &= i\delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{Fermionen}). \end{aligned} \quad (8.3.65)$$

Es zeigt sich, daß dieses Vorgehen alle Beziehungen aus den vorherigen Abschnitten 8.3.2-8.3.4 reproduziert. Dabei ergibt sich die Zeitabhängigkeit der Feldoperatoren im **Heisenberg-Bild**. Für Zweiteilchenwechselwirkungen über ein Potential ist zum sich bei der kanonischen Quantisierung der Hamiltondichte (8.3.56) ergebenden Einteilchen-Hamilton-Operator noch der Zweiteilchenoperator (8.3.25) hinzuzufügen.

8.3.6 Das Noether-Theorem im Feldformalismus

Wir können nun, wieder analog wie in der Punktmechanik, die Bedeutung von **Symmetrien** für die Felder betrachten. Dabei liegt wieder eine Symmetrie vor, wenn die **Bewegungsgleichungen forminvariant** unter der entsprechenden Transformation sind. So ist die **Schrödinger-Gleichung** für ein freies

Teilchen forminvariant unter den **Galilei-Transformationen**. Für Felder bietet es sich an, die Analyse der Symmetrien in der Lagrange-Formulierung durchzuführen. Betrachten wir also zunächst die Wirkung für klassische Felder ψ^3 .

Es bietet sich nun an, bereits hier die relativistische Notation für die Raumkomponenten und die Zeit anzuwenden. Wir fassen diese Komponenten zusammen in einen **Vierervektor**, dessen Komponenten wir mit hochgestellten griechischen Indizes versehen. Sie laufen stets von 0 bis 3, d.h. wir setzen $x^0 := t$. Die hochgestellten Indizes sind nicht mit Potenzen zu verwechseln. Wir werden weiter unten bei der Behandlung der Lorentz-Transformationen sehen, warum diese Schreibweise nützlich ist. Unsere Vierervektoren sind wie folgt definiert

$$x = (x^\mu) = \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}. \quad (8.3.66)$$

Hat man irgendeine Funktion $f(x) = f(t, \vec{x})$ gegeben, so bezeichnen wir die Komponenten des **Vierervektorgradienten** mit einem unteren Index, d.h. es gilt

$$\partial_\mu f(x) := \frac{\partial}{\partial x^\mu} f(x). \quad (8.3.67)$$

Es ist also

$$[\partial_\mu f(x)] = \begin{pmatrix} \partial_t f(x) \\ \vec{\nabla} f(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_t f(x) \\ \partial_x f(x) \\ \partial_y f(x) \\ \partial_z f(x) \end{pmatrix}. \quad (8.3.68)$$

Über wiederholte griechische Indizes wird wieder stillschweigend summiert (**Einsteinsche Summationskonvention**).

Wir betrachten nun infinitesimale Transformationen der Form

$$\delta x^\mu = \delta \alpha_a T_a^\mu(x), \quad \delta \psi = \delta \alpha_a \Lambda_a(\psi, x). \quad (8.3.69)$$

Dabei sind die $\delta \alpha_a$ die „infinitesimalen“ Parameter der betrachteten Symmetriegruppe. Die Wirkung können wir nun in der Form

$$A[\psi] = \int_{\mathbb{R}^4} d^4x \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x) \quad (8.3.70)$$

schreiben. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich, wie in Abschnitt 8.3.5 gezeigt, aus der Stationarität dieses Funktionals unter beliebigen Variationen der Felder, wobei die Raumzeitkoordinaten x^μ nicht mitvariiert werden. Dieses **Hamiltonsche Wirkungsprinzip für Felder** führt auf die **Euler-Lagrange-Gleichungen** (8.3.43). In unserer Vierervektornotation können wir diese übersichtlicher zu

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi)} = 0 \quad (8.3.71)$$

zusammenfassen.

³Im folgenden wird für mehrkomponentige Felder, wie z.B. Spinorfeldern, stets stillschweigend über alle Feldkomponenten summiert. Für komplexe Felder sind auch wieder ψ und ψ^* als unabhängige Feldfreiheitsgrade anzusehen.

8.3. Fockraumformulierung für Observablen

Es ist klar, daß für eine vorgegebene Feldgleichung die Wirkung nicht eindeutig bestimmt ist. Fügen wir nämlich zur Lagrangedichte eine beliebige **Viererddivergenz**

$$\mathcal{L}'(\psi, \partial_\mu \psi, x) = \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x) + \partial_\mu \Omega^\mu(\psi, x) \quad (8.3.72)$$

hinzu, ergeben sich mit (8.3.71) identische Feldgleichungen. Dies ergibt sich sofort aus (*Übung!*)

$$\partial_\mu \Omega^\mu(\psi, x) = \frac{\partial}{\partial \psi} \Omega^\mu(\psi, x) \partial_\mu \psi + \partial_\mu^{(\text{expl})} \Omega^\mu(\psi, x) \quad (8.3.73)$$

durch Einsetzen der Lagrangedichte \mathcal{L}' in (8.3.71). Hier und im folgenden bezeichnet der Operator $\partial_\mu^{(\text{expl})}$ die Ableitung der betreffenden Funktion nach den Raumzeitkomponenten hinsichtlich der expliziten Abhängigkeit von diesen Variablen, d.h. die Abhängigkeit, die nicht implizit in den Feldern ψ und ihren Ableitungen $\partial_\mu \psi$ steckt.

Wir betrachten nun die Variation der Wirkung (8.3.70) unter der allgemeinen Transformation (8.3.69). Im Gegensatz zur Variation beim Hamiltonschen Prinzip haben wir hier zu berücksichtigen, daß wir nicht nur die Felder variieren wollen, sondern auch die Raumzeitargumente. Es gilt

$$\delta A[\psi] = \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x' \mathcal{L}(\psi', \partial'_\mu \psi', x') - \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x). \quad (8.3.74)$$

Wir müssen also zunächst das Vierervolumenelement transformieren, wobei wir nur bis zur ersten Ordnung in den δx entwickeln müssen. Offenbar ist

$$d^4 x' = \det \left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \right) d^4 x = d^4 x \det(\partial_\nu x'^\mu) \quad (8.3.75)$$

mit der **Jacobi-Matrix**

$$\partial_\nu x'^\mu = \partial_\nu (x^\mu + \delta x^\mu) = \delta^\mu_\nu + \partial_\nu (\delta x^\mu), \quad (8.3.76)$$

wobei

$$\delta^\mu_\nu := \begin{cases} 1 & \text{für } \mu = \nu \\ 0 & \text{für } \mu \neq \nu \end{cases} \quad (8.3.77)$$

wieder das **Kronecker-Symbol** bezeichnet, diesmal allerdings in unserer Vierervektorschreibweise mit einem hoch- und einem tiefgestellten Index. Die Entwicklung der Determinante der Jacobi-Matrix (8.3.76) nach Zeilen (oder auch Spalten) zeigt, daß Terme in erster Ordnung in δx^μ nur vom Produkt der Diagonalelemente herrühren können, so daß wir

$$\det(\partial_\nu \delta x^\mu) = 1 + \partial_\nu (\delta x^\nu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2) \quad (8.3.78)$$

erhalten. Es ist also

$$\delta d^4 x = d^4 x' - d^4 x = d^4 x \partial_\nu (\delta x^\nu). \quad (8.3.79)$$

Außerdem vertauscht auch die Ableitung der Felder nach Raumzeitkomponenten nicht mehr mit der Variation. Vielmehr gilt

$$\delta(\partial_\mu \psi) = \partial'_\mu \psi' - \partial_\mu \psi = (\partial'_\mu x^\nu) \partial_\nu (\psi + \delta \psi) - \partial_\mu \psi. \quad (8.3.80)$$

Hier tritt die inverse Jacobimatrix der Transformation auf. Wir müssen sie also zunächst invertieren. Die Inverse benötigen wir aber wieder nur bis zur ersten Ordnung in den $\delta \alpha_a$. Es ist

$$\partial'_\mu x^\nu = (\partial_\nu x^\mu)^{-1} = (\delta^\mu_\nu + \partial_\nu (\delta x^\mu))^{-1} = \delta^\nu_\mu - \partial_\nu (\delta x^\mu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2). \quad (8.3.81)$$

8. Vielteilchenquantentheorie

In der Tat gilt nämlich

$$[\delta^\mu{}_\nu + \partial_\nu(\delta x^\mu)][\delta^\nu{}_\rho - \partial_\rho(\delta x^\nu)] = \delta^\mu{}_\rho + \partial_\rho(\delta x^\mu) - \partial_\rho(\delta x^\mu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2) = \delta^\mu{}_\rho + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2). \quad (8.3.82)$$

Nun ist

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta(\partial_\mu \psi) + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L}. \quad (8.3.83)$$

Berechnen wir also die Variation der Wirkung (8.3.74), ergibt sich mit Hilfe der Beziehungen (8.3.79-8.3.83) als Bedingung dafür, daß eine Symmetrietransformation vorliegt,

$$\begin{aligned} \delta A &= \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \left[\delta \mathcal{L} + \mathcal{L} \partial_\mu \delta x^\mu \right] \\ &= \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\mu \delta \psi + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L} \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\nu \psi - \mathcal{L} \delta^\mu{}_\nu \right] \partial_\mu \delta x^\nu \right\} \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (8.3.84)$$

Damit dies für beliebige Felder ψ gilt, muß der Integrand bis auf eine totale Viererdivergenz der Form (8.3.73) verschwinden, d.h. es existiert ein Vierervektor $\Omega^\mu(\psi, x)$, so daß

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\mu \delta \psi + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L} - \Theta^\mu{}_\nu \partial_\mu \delta x^\nu + \partial_\mu \delta \Omega^\mu(\psi, x) = 0 \quad (8.3.85)$$

gilt. Dabei haben wir den **kanonischen Energie-Impulstensor**

$$\Theta^\mu{}_\nu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\nu \psi - \mathcal{L} \delta^\mu{}_\nu \quad (8.3.86)$$

eingeführt.

Falls also (8.3.85) für die Transformationen (8.3.69) erfüllt ist, sind diese Transformationen **Symmetrietransformationen**. Für Lösungen der Feldgleichungen (8.3.71) folgt nun durch Bilden der Viererdivergenz von (8.3.86) bzgl. μ , nach kurzer Rechnung (*Übung!*)

$$\partial_\mu \Theta^\mu{}_\nu = -\partial_\nu^{(\text{expl})} \mathcal{L} \quad (8.3.87)$$

und damit

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta \psi - \Theta^\mu{}_\nu \delta x^\nu + \delta \Omega^\mu \right] = 0. \quad (8.3.88)$$

Dies ist das **Noether-Theorem** für Felder: Setzt man (8.3.69) für $\delta \psi$ und δx^ν ein, ergibt sich für jede unabhängige Symmetrietransformation ein Vektorfeld

$$j_a^\mu(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \Lambda_a(\psi, x) + \frac{\partial \Omega_a^\mu}{\partial \psi} + \left(\partial_\nu^{(\text{expl})} \Omega_a^\mu - \Theta^\mu{}_\nu \right) T_a^\nu(x), \quad (8.3.89)$$

das der **Kontinuitätsgleichung**

$$\partial_\mu j_a^\mu = 0 \quad (8.3.90)$$

genügt. Dabei haben wir

$$\delta\Omega^\mu = \delta\alpha_a\Omega_a^\mu \quad (8.3.91)$$

gesetzt. Diesen Sachverhalt kennen wir aus der Elektrodynamikvorlesung im Zusammenhang mit der **Erhaltung der Ladung**. Man nennt j_a^μ daher die **Noether-Stromdichte** (oft auch etwas ungenau den **Noether-Strom**), der der durch α_a parametrisierten Symmetrietransformation zugeordnet ist.

Um zu sehen, daß mit (8.3.90) ein Erhaltungssatz verbunden ist, trennen wir diese Gleichung zunächst wieder in Zeit- und Ortsableitungen auf:

$$\partial_t j_a^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_a = 0. \quad (8.3.92)$$

Bringen wir die Dreierdivergenz auf die rechte Seite und integrieren über den ganzen Raum, so folgt aus dem **Gaußschen Integralsatz**

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} j_a^0(t, \vec{x}) = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = \int_{\partial\mathbb{R}^3} d^2\vec{A} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = 0. \quad (8.3.93)$$

Dabei sind wir davon ausgegangen, daß die Stromdichte \vec{j} im Unendlichen hinreichen schnell verschwindet, so daß das Flächenintegral über die im Unendlichen zu denkende Randfläche des gesamten Raumes ebenfalls verschwindet. Definieren wir die **Noether-Ladung** zu der durch α_a parametrisierten Symmetrietransformation durch

$$Q_a(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} j_a^0(t, \vec{x}), \quad (8.3.94)$$

so folgt wegen (8.3.93) in der Tat der Erhaltungssatz

$$\frac{d}{dt} Q_a(t) = 0. \quad (8.3.95)$$

In vollkommener Analogie zum Noether-Theorem der Punktmechanik ergibt sich also aus jeder Einparametersymmetrie eine Erhaltungsgröße, eben die dazugehörige Noether-Ladung. Der zeitlichen Komponente j_a^0 der Viererstromdichte kommt also die Rolle der entsprechenden **Ladungsdichte** zu.

Wir betrachten nun als Beispiel die Galilei-Symmetrie der Quantentheorie freier Spin-1/2-Teilchen. Die Lagrangedichte ergibt sich, wenn wir in (8.3.44) das äußeren elektromagnetische Feld 0 setzen:

$$\mathcal{L} = i\psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi_\sigma). \quad (8.3.96)$$

Translationen in Raum und Zeit

Die zeitlichen und räumlichen Translationen sind durch

$$x' = x - a, \quad \psi'(x') = \psi(x) \Rightarrow \delta x^\mu = -\delta a^\mu = -\delta^\mu_\nu \delta a^\nu = \text{const}, \quad \delta\psi(x) = 0 \quad (8.3.97)$$

gegeben. Hier ist also

$$T^\mu_\nu = -\delta^\mu_\nu, \quad \Lambda = 0. \quad (8.3.98)$$

Die Bedingung dafür, daß dies eine infinitesimale Symmetrietransformation ist, ist gemäß (8.3.85), daß \mathcal{L} nicht explizit von x^μ abhängt, was für (8.3.96) erfüllt ist. Es ergibt sich dann, daß $\Omega_a^\mu = 0$ gesetzt werden kann, und die dazugehörigen Noether-Ströme sind dann gemäß (8.3.89) durch den Energie-Impulstensor gegeben. Die dazugehörigen Erhaltungsgrößen sind dann (bis auf das Vorzeichen, daß sich

durch die Wahl der Vorzeichen in (6.6.1) bestimmt, wie wir weiter unten noch sehen werden) **Energie und Impuls** der Felder. In unserem Falle also

$$H = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta^0_0 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) (i\partial_t) \psi_\sigma(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi_\sigma(x),$$

$$p_j = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta^0_j = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) (-i\partial_j) \psi_\sigma(x). \quad (8.3.99)$$

Drehungen

Für infinitesimale Drehungen um die Drehachse \vec{n} haben wir mit den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}$ gemäß (6.11.8) und (6.11.11)

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \delta\phi \vec{n} \times \vec{x}, \quad \psi'(x') = \left(\mathbb{1} + i\delta\phi \frac{\vec{n} \cdot \hat{\sigma}}{2} \right) \psi(x), \quad (8.3.100)$$

d.h. in der Schreibweise (8.3.69)

$$\delta t = 0, \quad \delta x_j = -\delta\phi \epsilon_{jkl} n_k x_l, \quad \delta\psi = i\delta\phi \frac{\vec{n} \cdot \hat{\sigma}}{2} \psi. \quad (8.3.101)$$

Die Noether-Bedingung (8.3.85) ist wieder mit $\Omega_a^\mu = 0$ erfüllt, und folglich ergibt sich gemäß (8.3.89) für den **Gesamtdrehimpuls**, der die zur Rotationsinvarianz gehörige Erhaltungsgröße ist

$$J_k = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left[\Theta^0_j \epsilon_{jkl} x_l - \psi^\dagger \frac{\hat{\sigma}_k}{2} \psi \right] \Rightarrow \vec{J} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger \left[\vec{x} \times (-i\vec{\nabla}) + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right] \psi. \quad (8.3.102)$$

Boosts

Für die Boosts ist der Phasenfaktor in (6.10.19) zu berücksichtigen, d.h. es gilt

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \delta\vec{w}t, \quad \psi'(x') = [1 - im\delta\vec{w} \cdot \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\vec{w}^2)] \psi(x). \quad (8.3.103)$$

Da die Entwicklung nur bis zur ersten Ordnung in der infinitesimalen Boostgeschwindigkeit $\delta\vec{w}$ erfolgen muß, ist also

$$\delta\psi = -im\delta\vec{w} \cdot \vec{x} \psi, \quad \delta t = 0, \quad \delta\vec{x} = -\delta\vec{w}t. \quad (8.3.104)$$

Die Auswertung von (8.3.85) ergibt wieder, daß $\Omega_a^\mu = 0$ gesetzt werden kann, und (8.3.89) liefert als Erhaltungsgröße

$$\vec{K} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger [m\vec{x} - t(-i\vec{\nabla})] \psi. \quad (8.3.105)$$

Zur Quantisierung im Fock-Raumformalismus schreibt man nun in den Ausdrücken (8.3.99, 8.3.102, 8.3.105) für Erhaltungsgrößen für die Felder Feldoperatoren, und unter Verwendung der Kommutatorregeln (8.2.16), wobei in unserem Fall für Spin-1/2-Teilchen die fermionischen Antikommutatoren zu betrachten sind, läßt sich leicht zeigen (*Übung!*), daß die entsprechenden Operatoren \mathbf{H} , $\vec{\mathbf{p}}$, $\vec{\mathbf{J}}$ und $\vec{\mathbf{K}}$ wieder die Kommutatorregeln der Strahldarstellung der Galilei-Gruppe (6.6.33-6.6.41) erfüllen, wie wir sie im Einteilchenformalismus hergeleitet hatten.

Phaseninvarianz

Wir haben schon oft die Tatsache betont, daß Wellenfunktionen, die sich nur um Phasenfaktoren unterscheiden, denselben Zustand beschreiben. Demnach muß die Transformation

$$\psi'(x) = \exp(-i\alpha)\psi(x) \quad \text{mit} \quad \alpha = \text{const} \quad (8.3.106)$$

eine Symmetrietransformation der Feldgleichungen sein. In der Tat ist die Lagrangedichte (8.3.96) invariant unter dieser Transformation und folglich die Noether-Bedingung (8.3.85) für die entsprechende infinitesimale Transformation

$$\delta x = 0, \quad \delta \psi = -i\delta\alpha\psi \quad (8.3.107)$$

mit $\delta\Omega^\mu = 0$ erfüllt. Der dazugehörige Noether-Strom ist (*Übung!*)

$$j^0 = \psi^\dagger\psi, \quad \vec{j} = \frac{1}{2mi} [\psi^\dagger\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi^\dagger)\psi]. \quad (8.3.108)$$

Setzt man wieder die quantisierten Felder ein, ergibt sich als erhaltene Größe der Operator der Gesamtteilchenzahl (vgl. Abschnitt 8.3.1).

$$\mathbf{N} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger\psi. \quad (8.3.109)$$

Wir weisen zum Abschluß unserer Symmetriebetrachtungen im Feldformalismus nur darauf hin, daß diese Betrachtungen genauso auf den Fall wechselwirkender Teilchen anwendbar sind. Im einfachsten Fall haben wir es nur mit durch ein Zentralpotential beschriebenen Zweiteilchenwechselwirkungen zu tun. Dafür lautet die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = i\psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}\psi_\sigma^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi_\sigma) - \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \psi^\dagger(\xi_1) \psi^\dagger(\xi_2) \psi(\xi_2) \psi(\xi_1), \quad (8.3.110)$$

die wir gleich in quantisierter Form geschrieben haben, um die hier wichtige **Reihenfolge der Operatoren im Wechselwirkungsterm** zu betonen. Der Wechselwirkungsterm ergibt sich dabei aus dem entsprechenden Ausdruck für den Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators im Fock-Raumformalismus (8.3.25). Auch diese Lagrangedichte erweist sich als invariant (*Übung*) unter Galilei-Transformationen und beschreibt damit ein abgeschlossenes Vielteilchensystem. Da weiter auch diese Lagrangedichte unter der Phasentransformation invariant ist, bleibt auch für diesen Fall die Gesamtteilchenzahl erhalten, und falls man eine Situation beschreibt, die zur Zeit $t = 0$ einem System mit wohlbestimmter Teilchenzahl N entspricht, spielt sich die gesamte Dynamik im Teilraum mit dieser wohlbestimmten Teilchenzahl ab. In diesem Falle ist somit der Fockraumformalismus vollständig äquivalent zum Formalismus mit einer klassischen Wellenfunktion $\psi(t, \xi_1, \dots, \xi_N)$, die entsprechend der bosonischen (fermionischen) Natur der Teilchen vollständig symmetrisch (antisymmetrisch) unter Vertauschen der Orts-Spinargumente ξ_k ist. Daraus wird nochmals ersichtlich, daß für diesen Spezialfall einer die Teilchenzahl erhaltenden Wechselwirkung der Fock-Raumformalismus („zweite Quantisierung“) äquivalent ist zur Beschreibung mit einer bosonischen oder fermionischen Vielteilchenwellenfunktion zur festen Teilchenzahl N („erste Quantisierung“).

Freilich ist die Fock-Raumbeschreibung als Quantenfeldtheorie nicht nur in vielen Fällen rechentechnisch bequemer als die „erste Quantisierung“, sondern sie läßt sich auch auf allgemeinere Situationen anwenden, bei denen die Teilchenzahl nicht erhalten ist. Dies trifft insbesondere auf die relativistische Quantentheorie zu, wo bei Stößen Teilchenerzeugungs- und Vernichtungsprozesse möglich sind. Darauf kommen wir weiter unten noch ausführlich zu sprechen.

8.4 Fockräume freier Bosonen und Fermionen

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns ausführlich mit der Beschreibung von Vielteilchensystemen, die aus nichtwechselwirkenden Teilchen bestehen, die auch keinem äußeren Potential ausgesetzt sind. Dies dient nicht nur der Einübung der oben entwickelten quantenfeldtheoretischen Vielteilchenrechenstechnik im Fock-Raumformalismus sondern bildet auch eine wichtige Grundlage für das Studium wechselwirkender Vielteilchensysteme im Rahmen der **Störungstheorie**, womit wir uns im nächsten Kapitel beschäftigen wollen. Dies wird uns auf die ungemein schlagkräftige Methode der **Feynman-Diagramme** führen. Als eine erste Anwendung der Vielteilchenmethoden werden wir aber auch die **Thermodynamik idealer Quantengase** behandeln.

Wir betrachten zunächst wieder Bosonen und Fermionen zusammen. Wir arbeiten von nun an im **Heisenberg-Bild** und lassen im folgenden die Indizes H an den Operatoren und Zuständen weg, ebenso wie die Bezeichnung „Fock“ an den Operatoren. Fettgedruckte Symbole stehen im folgenden stets für Operatoren im Fockraum. Differentialoperatoren im Sinne der „ersten Quantisierung“ kennzeichnen wir mit einem Dach über dem Symbol.

Der Hamiltonoperator für freie Teilchen lautet gemäß (8.3.22)

$$\mathbf{H} = \int d\xi \psi^\dagger(t, \xi) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(t, \xi), \quad (8.4.1)$$

und die Bewegungsgleichung ist wegen (8.3.37) die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \xi) = \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(t, \xi). \quad (8.4.2)$$

Wie wir gleich sehen werden, empfiehlt es sich, die Teilchen zunächst in einem **endlichen Volumen** zu betrachten. Dazu wählen wir einen Würfel der Kantenlänge L . Da wir an Randeffekten nicht interessiert sind und schließlich an geeigneter Stelle unserer Rechnungen zum Limes $L \rightarrow \infty$ übergehen wollen, können wir die Randbedingungen bequem wählen. Besonders einfach sind periodische Randbedingungen

$$\psi(t, \vec{x} + L\vec{n}, \sigma) = \psi(t, \vec{x}) \quad \text{für alle } \vec{n} \in \mathbb{Z}^3. \quad (8.4.3)$$

Die Lösungen der Feldgleichungen (8.4.2) lassen sich nun nach den **ebenen Wellen**

$$u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}^3} \exp[-i[E(\vec{p})t - \vec{p} \cdot \vec{x}]] \chi_\sigma \quad (8.4.4)$$

entwickeln. Dabei ist χ_σ der Spaltenspinor bzgl. der Eigenbasis zu σ_z zu den Eigenwerten σ mit $\sigma \in \{-s, -s+1, \dots, s-1, s\}$.

Damit die periodische Randbedingung (8.4.3) erfüllt ist, muß offenbar

$$\vec{p} = \frac{2\pi}{L} \vec{n} \quad \text{mit } \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 \quad (8.4.5)$$

erfüllt sein. Die Normierung der Moden (8.4.4) ist so gewählt, daß

$$\int_V d^3x \left| u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}) \right|^2 = 1 \quad (8.4.6)$$

ist. Damit die Bewegungsgleichung (8.4.2) erfüllt ist, muß die **Dispersionsrelation**

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (8.4.7)$$

gelten. Damit ergibt sich für die Entwicklung der Feldoperatoren nach Impuls-Spin-Eigenmoden

$$\psi(t, \vec{x}, \sigma) = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma=-s}^s \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}). \quad (8.4.8)$$

Die Operatoren $\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma)$ sind durch die **Fourier-Koeffizienten**

$$\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) = \int_V d^3x u_{\vec{p}, \sigma}^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}, \sigma) \quad (8.4.9)$$

gegeben. Aus den (Anti-)Kommutatorrelationen (8.2.16), die im hier verwendeten **Heisenbergbild** für **gleiche Zeiten** in den Argumenten der (Anti-)Kommutatorklammer gelten, folgen die (Anti-)Kommutatorrelationen (*Übung!*):

$$[\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}(\vec{p}', \sigma')]_{\mp} = 0, \quad [\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}', \sigma')]_{\mp} = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'}^{(3)} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (8.4.10)$$

Dabei gilt das obere (untere) Vorzeichen wieder für Bosonen (Fermionen).

Wir zeigen nun noch, daß die $\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma)$ ($\mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma)$) Vernichter (Erzeuger) für Impuls-Spin-Einteilchenzustände sind. Dies folgt unmittelbar daraus, daß gemäß (8.3.20) bzw. (8.3.23) der Gesamtimpuls- und Gesamtspinoperator durch

$$\vec{\mathbf{P}} = \sum_{\sigma} \int_V d^3x \psi^\dagger(t, \vec{x}, \sigma) (-i\vec{\nabla}) \psi(t, \vec{x}, \sigma) = \sum_{\vec{p}, \sigma} \vec{p} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \quad (8.4.11)$$

$$\vec{\mathbf{S}} = \sum_{\sigma} \int_V d^3x \psi^\dagger(t, \vec{x}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \psi(t, \vec{x}, \sigma') = \sum_{\vec{p}, \sigma} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma') \quad (8.4.12)$$

gegeben sind. Für \mathbf{S}_z folgt wegen $\sigma_{z, \sigma\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'}$ insbesondere

$$\mathbf{S}_z = \sum_{\vec{p}, \sigma} \sigma \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma). \quad (8.4.13)$$

Die Einteilchenzustände

$$|\vec{p}, \sigma\rangle = \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) |\Omega\rangle \quad (8.4.14)$$

sind demnach simultane Eigenzustände zu $\vec{\mathbf{P}}$ und \mathbf{S}_z zu den Eigenwerten \vec{p} bzw. σ .

Die Gesamtenergie ist gemäß (8.4.1) durch

$$\mathbf{H} = \sum_{\vec{p}, \sigma} E(\vec{p}) \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) \quad (8.4.15)$$

gegeben. Der **Gesamtteilchenzahloperator** folgt aus (8.3.4) und Einsetzen von (8.3.1):

$$\mathbf{N} = \sum_{\vec{p}, \sigma} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma). \quad (8.4.16)$$

Der Operator, der die Anzahl der Teilchen mit einem bestimmten Spin und einem bestimmten Impuls repräsentiert, ist demnach durch

$$\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) = \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) \quad (8.4.17)$$

gegeben.

8.4.1 Erinnerung an die Statistische Thermodynamik

In diesem Kapitel fassen wir kurz die wesentlichen Grundlagen der statistischen Thermodynamik zusammen, wobei wir uns auf **Gleichgewichtszustände** und das **großkanonische Ensemble** beschränken. Wesentlich für die Thermodynamik ist der Begriff der **Entropie**, die wir hier über die **von Neumann-Entropie** des Statistischen Operators einführen. Ein tieferes Verständnis der Entropie liefert die **Informationstheorie**, die aus der statistischen Signaltheorie hervorgegangen ist, wo der informationstheoretische Entropiebegriff von **Shannon** eingeführt wurde. Dieses Konzept wurde dann von **Jaynes** auf die Quantentheorie angewandt. Einführungen zum informationstheoretischen Zugang zur statistischen Physik bieten [Jay57a, Jay57b, Kat67, Hob87, Hee08b]. Elementarere gute Darstellungen zur Thermodynamik und statistischen Physik sind [Som78, LL87, Cal85, Rei65, LMB04].

8.4.2 Die Entropie

Die Entropie wird nach **von Neumann** als Funktional des Statistischen Operators eines Systems durch

$$S[\mathbf{R}] = -k_B \langle \ln \mathbf{R} \rangle_{\mathbf{R}} = -k_B \text{Tr}[\mathbf{R} \ln \mathbf{R}] \quad (8.4.18)$$

definiert. Dabei bezeichnet

$$k_B = 1.3806504(24) \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.617343(15) \cdot 10^{-5} \text{ eV/K} \quad (8.4.19)$$

die **Boltzmann-Konstante**. Auf die Temperatureinheit **Kelvin** kommen wir gleich noch zurück.

Die Entropie ist ein **Maß für die fehlende Information** über den Systemzustand bei gegebenem Statistischen Operator. Wir wollen diese Interpretation als **Informationsmaß** in dieser Vorlesung nicht genauer begründen. Wir bemerken nur, daß für einen reinen Zustand $\mathbf{R}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$S[\mathbf{R}_\psi] = 0 \quad (8.4.20)$$

ist. Dabei verwenden wir bei der Spurbildung in der Entropieformel für den Fall, daß für einen normierten Vektor $|n\rangle$ das Matricelement $R_{nn} = \langle n | \mathbf{R} | n \rangle = 0$ ist

$$\lim_{R_{nn} \rightarrow 0^+} R_{nn} \ln R_{nn} = 0. \quad (8.4.21)$$

Zur Berechnung von (8.4.20) denken wir uns ein Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ mit $|1\rangle = |\psi\rangle$ gegeben. Dann ist $R_{\psi,11} = 1$ und $R_{\psi,nn} = 0$ für $n \geq 2$. Mit dem Grenzwert (8.4.21) erhalten wir dann

$$S[\mathbf{R}_\psi] = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} R_{\psi,nn} \ln R_{\psi,nn} = -k_B 1 \cdot \ln 1 = 0. \quad (8.4.22)$$

Allgemein können wir bei der Spurbildung als VONS die Eigenvektoren $|n\rangle$ des Statistischen Operators verwenden⁴

$$S[\mathbf{R}] = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} R_{nn} \ln R_{nn}. \quad (8.4.23)$$

Da \mathbf{R} gemäß Abschnitt 2.17 ein positiv semidefiniter selbstadjungierter Operator mit

$$\text{Tr} \mathbf{R} = \sum_{n=1}^{\infty} R_{nn} = 1 \quad \text{mit} \quad R_{nn} \geq 0 \quad (8.4.24)$$

⁴Wir schreiben im folgenden die Formeln für den Fall, daß der Statistische Operator ein rein diskretes Spektrum besitzt. Für den Fall, daß er auch kontinuierliche Eigenwerte besitzt, ist entsprechend zu integrieren.

ist, muß $0 \leq R_{nn} \leq 1$ sein. Dies ergibt sich auch daraus, daß R_{nn} die Wahrscheinlichkeit dafür ist, bei einer Messung eines geeigneten vollständigen Satzes kompatibler Observabler, für die $|n\rangle$ ein Eigensystem ist, das System im Zustand $|n\rangle$ vorzufinden. Jedenfalls folgt aus (8.4.24) wegen $\ln x < 0$ für $x < 1$, daß

$$S[\mathbf{R}] \geq 0 \quad (8.4.25)$$

ist.

Nach dem **Prinzip vom geringsten Vorurteil** müssen wir nun denjenigen Statistischen Operator wählen, der unter Berücksichtigung der vorliegenden Information die **maximale Entropie** ergibt.

8.4.3 Das großkanonische Ensemble

In dieser Vorlesung werden wir ausschließlich die **großkanonische Beschreibung** thermodynamischer Systeme verwenden, da diese für praktische Probleme am einfachsten zu handhaben ist und die wesentlichen Aspekte der Beschreibung **makroskopischer Systeme** abdeckt. Das paradigmatische Beispiel für diese Beschreibung ist ein Gas oder Plasma in einem Behälter. Dabei greift man sich ein sehr großes Teilvolumen dieses Behälters heraus, sodaß die darin enthaltenen Gasteilchen (also Atome, Moleküle oder Ionen) mit den übrigen Gasteilchen und mit den Behälterwänden Energie austauschen können. Zugleich liegt auch die Teilchenzahl in dem Teilvolumen nicht exakt fest, denn es können sich Teilchen aus dem Teilvolumen heraus- oder in es hineinbewegen.

Gemäß der von Neumann-Gleichung (2.18.3) repräsentiert ein Statistischer Operator genau dann einen **stationären Zustand**, wenn er eine Funktion der **Erhaltungsgrößen des Systems** ist (d.h. mit dem Hamilton-Operator kommutiert) und nicht explizit von der Zeit abhängt. Für das großkanonische Ensemble betrachtet man die **Energie und Teilchenzahl** als die wichtigen Erhaltungsgrößen. Allerdings betrachten wir ja nur ein Teilvolumen eines größeren Gesamtvolumens eines Gases, und da muß die Energie und Teilchenzahl nicht exakt erhalten sein. Im **Gleichgewichtszustand** dürfen wir aber erwarten, daß es keinen makroskopischen Energie- und Teilchenfluß geben wird, d.h. im Mittel über nicht zu kleine Zeiten wird die Gesamtenergie und Teilchenzahl der in dem betrachteten Volumen enthaltenen Teilchen konstant sein, und wir geben die **mittlere Energie und die mittlere Teilchenzahl** als bekannte Größen vor.

Nach dem Prinzip vom geringsten Vorurteil suchen wir also denjenigen Statistischen Operator \mathbf{R} , für den die Entropie (8.4.18) maximal wird, wobei die Einschränkungen

$$\text{Tr } \mathbf{R} \stackrel{!}{=} 1, \quad \langle \mathbf{H} \rangle = \text{Tr } \mathbf{H} \mathbf{R} \stackrel{!}{=} U, \quad \langle \mathbf{N} \rangle = \text{Tr } (\mathbf{N} \mathbf{R}) \stackrel{!}{=} N \quad (8.4.26)$$

erfüllt sein müssen. Eine solche Extremwertaufgabe mit Nebenbedingungen löst man bekanntlich mit Hilfe der Methode der **Lagrange-Parameter**, d.h. wir betrachten das Funktional

$$S'[\mathbf{R}] = S[\mathbf{R}] - k_B \langle (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N} \rangle = -k_B \text{Tr} [\mathbf{R} (\ln \mathbf{R} + (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N})] \quad (8.4.27)$$

Dabei sind Φ , β und α die Lagrangeparameter, die so zu bestimmen sind, daß die drei Zwangsbedingungen (8.4.26) erfüllt sind. Wir legen also \mathbf{R} dadurch fest, daß $S'[\mathbf{R}]$ maximal werden muß. Dazu variieren wir (8.4.27) nach \mathbf{R} , wobei wir uns dank der Lagrange-Parameter nicht mehr um die Nebenbedingungen zu kümmern brauchen:

$$\begin{aligned} \delta S'[\mathbf{R}] &= -k_B \text{Tr} [\delta \mathbf{R} (\ln \mathbf{R} + (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N} + \mathbb{1})] \\ &= -k_B \text{Tr} [\delta \mathbf{R} (\ln \mathbf{R} + \Phi \mathbb{1} + \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N})] \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (8.4.28)$$

Da $\delta \mathbf{R}$ beliebig ist, muß die Klammer verschwinden, und daraus folgt

$$\mathbf{R} = \exp(-\Phi \mathbb{1} - \beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N}). \quad (8.4.29)$$

Es gilt

$$\text{Tr } \mathbf{R} = \exp(-\Phi) \text{Tr}[\exp(-\beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N})] = \exp(-\Phi) Z(\beta, \alpha) \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \Phi = \ln Z. \quad (8.4.30)$$

Die Größe

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N})] \quad (8.4.31)$$

heißt **großkanonische Zustandssumme** und $\Phi = \ln Z$ **großkanonisches thermodynamisches Potential**. Es ist klar, daß die thermodynamischen Größen im allgemeinen noch von **äußeren Systemparametern** abhängen werden, die in den obigen Formalismus über den Hamiltonoperator und den Teilchenzahloperator oder auch durch Randbedingungen eingehen. Ein wichtiges Beispiel für den letzteren Fall ist das betrachtete **Volumen** V , das durch geeignete Randbedingungen an die Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung beschrieben wird. Darauf gehen wir im nächsten Kapitel konkret ein. Für die jetzt folgenden allgemeineren Betrachtungen, genügt es, einfach davon auszugehen, daß die thermodynamischen Größen auch vom Volumen abhängen.

Die großkanonische Zustandssumme (8.4.31) ist deshalb äußerst nützlich, weil wir bei ihrer Kenntnis sofort die mittlere Energie und die mittlere Teilchenzahl ausrechnen können. Da die Teilchenzahl voraussetzungsgemäß eine Erhaltungsgröße ist, muß $[\mathbf{N}, \mathbf{H}] = 0$ sein, und wir können die Ableitungen nach den Lagrangeparametern bilden, als wären \mathbf{H} und \mathbf{N} Zahlen, d.h. es ist

$$\frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta, \alpha, V) = -\text{Tr}[\mathbf{H} \exp(-\beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N})] = -Z(\beta, \alpha, V) \langle H \rangle = -Z(\beta, \alpha, V) U(\beta, \alpha, V). \quad (8.4.32)$$

Also ist

$$U(\beta, \alpha, V) = -\frac{1}{Z(\beta, \alpha, V)} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi(\beta, \alpha, V). \quad (8.4.33)$$

Genauso folgt

$$N(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \Phi(\beta, \alpha, V). \quad (8.4.34)$$

Wir geben schließlich noch die Entropie für den Gleichgewichtsoperator (8.4.29) an:

$$\begin{aligned} S(\beta, \alpha, V) &= -k_B \text{Tr}(\mathbf{R} \ln \mathbf{R}) = k_B (\Phi + \langle \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N} \rangle) \\ &= k_B [\Phi(\beta, \alpha, V) + \beta U(\beta, \alpha, V) + \alpha N(\beta, \alpha, V)]. \end{aligned} \quad (8.4.35)$$

8.4.4 Phänomenologische Thermodynamik

Um den Anschluß der großkanonischen Größen an die üblichen Größen der phänomenologischen Thermodynamik zu finden, gehen wir vom **ersten Hauptsatz der Thermodynamik** aus, demzufolge eine infinitesimale Zustandsänderung zur Änderung der inneren Energie

$$dU = T dS - p dV + \mu dN \quad (8.4.36)$$

führt, wobei T die Temperatur, p den Druck und μ das thermodynamische Potential des Systems bezeichnen. Dies lösen wir nach

$$dS = \frac{1}{T} (dU + p dV - \mu dN) \quad (8.4.37)$$

8.4. Fockräume freier Bosonen und Fermionen

auf. Die „natürlichen unabhängigen Variablen“ für die Entropie sind also U , V und N , und es gelten die thermodynamischen Beziehungen

$$\frac{\partial}{\partial U} S(U, V, N) = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial V} S(U, V, N) = \frac{p}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial N} S(U, V, N) = -\frac{\mu}{T}. \quad (8.4.38)$$

Vergleichen wir nun (8.4.37) mit (8.4.35). Dazu bilden wir das totale Differential dieser Gleichung, wobei wir zunächst β , α und V als unabhängige Variablen zu verwenden haben. Dann folgt unter Berücksichtigung von (8.4.33) und (8.4.35) nach einigen Zusammenfassungen

$$dS = k_B \left[\beta dU + \alpha dN + dV \frac{\partial}{\partial V} \Phi(\beta, \alpha, V) \right]. \quad (8.4.39)$$

Vergleichen wir (8.4.39) mit (8.4.37), erhalten wir die Beziehungen

$$k_B \beta = \frac{1}{T}, \quad k_B \alpha = -\frac{\mu}{T}, \quad k_B \frac{\partial}{\partial V} \Phi(\beta, \alpha, V) = \frac{p}{T}. \quad (8.4.40)$$

Eine typische Berechnung der **Zustandsgleichungen** eines Systems mit Hilfe des großkanonischen Formalismus besteht also darin, zunächst die Zustandssumme Z bzw. das kanonische Potential Φ als Funktion von β , α und V zu berechnen. Dadurch sind U , N und S gemäß (8.4.33-8.4.35) als Funktion dieser großkanonischen unabhängigen Variablen bestimmt. Über (8.4.40) gewinnen wir dann die phänomenologischen Größen.

Daraus folgen dann alle übrigen thermodynamisch interessanten Größen. Dies erkennen wir, indem wir uns an die physikalische Interpretation des ersten Hauptsatzes (8.4.36) erinnern. Demnach ändert sich die innere Energie durch Änderung der Entropie, des Volumens und der Teilchen entsprechend der drei Terme im totalen Differential (8.4.36). Der erste Term bedeutet dabei die Zu- bzw. Abfuhr von **Wärmeenergie** $\delta Q = T dS$ zum System bzw. aus dem System, der zweite die mechanische Arbeit $\delta W = -p dV$ und schließlich der dritte die Energieänderung aufgrund der Hinzufügung oder Entnahme von Teilchen in das System bzw. aus dem System. Dies entspricht auch **Transportgrößen** im Gleichgewichtslimes, nämlich dem Fluß von Wärme, mechanischer bzw. chemischer Energie. Dabei muß man sich allerdings die Zustandsänderungen so langsam ausgeführt vorstellen, daß das System sich stets im Gleichgewicht befindet, bzw. man führt die Zustandsänderung aus und wartet hinreichend lange, sodaß sich das Gleichgewicht für die neue Situation einstellt und betrachtet Änderung der betreffenden Energieanteile zur Gesamtenergieänderung erst nach dieser Einstellung des neuen Gleichgewichts.

Eine interessante Größe ist auch die **Wärmekapazität**, die die Energie angibt, die man pro Teilchen benötigt, um dem System unter bestimmten Nebenbedingungen Wärme zuzuführen. Gemäß (8.4.36) ist die innere Energie $U(S, V, N)$ das geeignete thermodynamische Potential, um die Wärmekapazität bei konstant gehaltenem Volumen und Teilchenzahl zu bestimmen:

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (8.4.41)$$

Dabei bedeuten die Indizes an den in Klammern eingeschlossenen partiellen Ableitungen die bei dieser Ableitung konstant zu haltenden Größen. Wir müssen also ggf. die natürlichen unabhängigen Variablen einer Zustandsgröße durch andere ersetzen, um weitere Größen zu erhalten.

8.4.5 Legendre-Transformationen thermodynamischer Potentiale

Oft sind aber auch noch andere thermodynamische Potentiale nützlich. Dazu stellen wir zunächst eine allgemeine thermodynamische Betrachtung an. In der Thermodynamik lassen sich die Größen in **Quantitätsgrößen (extensive Variablen)** und **Intensitätsgrößen (intensive Variablen)** unterscheiden. In unseren obigen Betrachtungen waren z.B. U , S und N extensive und T , p und μ intensive Größen. Halten wir die intensive Größen konstant und erhöhen die Teilchenzahl N um einen Faktor λ , müssen sich erfahrungsgemäß auch alle übrigen extensiven Größen um denselben Faktor λ ändern. Wir haben also das **Skalenverhalten**

$$U(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda U(S, V, N), \quad (8.4.42)$$

d.h. U als Funktion von extensiven Größen ist eine **homogene Funktion ersten Grades** dieser Größen. Differenzieren wir diese Gleichung nach λ und setzen anschließend $\lambda = 1$ erhalten wir

$$U = S \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} + V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} + N \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (8.4.43)$$

Der Vergleich mit (8.4.36) liefert andererseits die thermodynamischen Beziehungen

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} = T, \quad U = S \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} + V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} = -p, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V} = \mu, \quad (8.4.44)$$

und daher folgt aus (8.4.44)

$$U = TS - pV + \mu N. \quad (8.4.45)$$

Wir können nun weitere thermodynamische Potentiale mit Hilfe der **Legendre-Transformation** erhalten. Diese Methode hat zum Ziel, an andere natürliche unabhängige Variable angepaßte Größen zu erhalten. Führen wir z.B. die **Enthalpie** durch

$$H = U + pV, \quad (8.4.46)$$

so ergibt der erste Hauptsatz (8.4.36)

$$dH = dU + pdV + Vdp = TdS + Vdp + \mu dN. \quad (8.4.47)$$

Dies besagt, daß die natürlichen unabhängigen Variablen für die Enthalpie S , p und N sind. Es gelten die thermodynamischen Beziehungen

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_{p,N} = T, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_{S,N} = V, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,p} = \mu. \quad (8.4.48)$$

Aus der Enthalpie erhalten wir die **Wärmekapazität bei konstantem Druck** zu

$$C_{p,N} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{p,N}. \quad (8.4.49)$$

Gemäß (8.4.45) gilt noch die Beziehung

$$H = TS + \mu N. \quad (8.4.50)$$

Die **Helmholtzsche Freie Energie** ist hingegen durch

$$F = U - TS = -pV + \mu N \quad (8.4.51)$$

definiert. Mit dem ersten Hauptsatz (8.4.36) erhalten wir

$$dF = dU - TdS - SdT = -SdT - pdV + \mu dN. \quad (8.4.52)$$

Die natürlichen unabhängigen Variablen sind T , V und N , und es gelten die thermodynamischen Relationen

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = -S, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,N} = \mu. \quad (8.4.53)$$

Die **Gibbssche Energie** ist wiederum eine Legendretransformierte der freien Energie

$$G = F + pV = \mu N. \quad (8.4.54)$$

Mit (8.4.51) erhalten wir

$$dG = dF + pdV + Vdp = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad (8.4.55)$$

d.h. die natürlichen Variablen sind T , p und N . Die dazugehörigen thermodynamischen Relationen lauten

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,N} = -S, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} = V, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,p} = \mu. \quad (8.4.56)$$

Schließlich ergibt sich noch das großkanonische Potential mit etwas undefinierten unabhängigen Variablen als

$$\Omega = F - \mu N = -pV. \quad (8.4.57)$$

Verwenden wir wieder (8.4.52), erhalten wir

$$d\Omega = dF - \mu dN - Nd\mu = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (8.4.58)$$

Die unabhängigen Variablen sind hier T , V und μ , und es gelten die Relationen

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} = -S, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{S,\mu} = -p, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = -N. \quad (8.4.59)$$

Vergleichen wir dies mit unserer ursprünglichen Definition (8.4.30). Aus (8.4.35) und (8.4.40) folgt

$$U - \mu N + k_B T \Phi = TS, \quad (8.4.60)$$

und daher

$$-k_B T \Phi = U - TS - \mu N = F - \mu N \stackrel{(8.4.57)}{=} \Omega. \quad (8.4.61)$$

In den ursprünglichen statistischen Variablen geschrieben ist also wegen (8.4.57)

$$p = -\frac{\Omega}{V} = \frac{k_B T \Phi}{V} = \frac{\Phi(\beta, \alpha, V)}{\beta V}. \quad (8.4.62)$$

Das großkanonische Potential liefert also auch unmittelbar die **Zustandsgleichung des Systems**.

8.5 Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase

Der **großkanonische Statistische Operator** ist gemäß (8.4.29) durch

$$\mathbf{R} = \frac{1}{Z} \exp(-\Phi \mathbb{1} - \beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N}) \quad (8.5.1)$$

gegeben. Die **großkanonische Zustandssumme** ist durch

$$Z = \exp \Phi = \text{Tr} \exp(-\beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N}) \quad (8.5.2)$$

definiert, und die Parameter β und α hängen gemäß (8.4.40)

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad \alpha = -\frac{\mu}{k_B T} \quad (8.5.3)$$

mit der Temperatur T und dem chemischen Potential μ zusammen. Das großkanonische Potential Ω liefert wegen (8.4.62) den Druck zu

$$p = \frac{\Phi(\beta, \alpha, V)}{\beta V} \quad (8.5.4)$$

Nun wollen wir die Zustandssumme (8.5.2) für nichtwechselwirkende Teilchen konkret ausrechnen. Dazu benötigen wir nur eine geeignete vollständige Orthonormalbasis im Fockraum, um die Spur bilden zu können. Aufgrund der Gestalt (8.5.1) des statistischen Operators bieten sich dafür die symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produktzustände aus Einteilchen-Impulseigenvektoren an. Im Unterschied zu der Betrachtung mit Orts-Eigenzuständen in Abschnitt 8.2 haben wir es dabei in unserem endlichen Volumen mit periodischen Randbedingungen mit diskreten Einteilchen-Basisvektoren zu tun, und wir ändern daher die Notation etwas ab. Wir können nämlich nun (im Falle von Bosonen) Produktzustände mit mehr als einem Teilchen im gleichen Einteilchenzustand definieren. Daher verwenden wir nun die simultane Basis zu bestimmten Teilchenzahlen $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$, die mit der entsprechenden Basis der (anti-)symmetrisierten Produktzustände übereinstimmt, aber etwas einfacher zu zählen ist⁵:

$$|\{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)\}\rangle = \prod_{\vec{p}, \sigma} \frac{1}{\sqrt{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)!}} [\mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma)]^{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)} |\Omega\rangle. \quad (8.5.5)$$

Dabei denken wir uns im Falle von Fermionen irgendeine „Standardreihenfolge“ der Argumente \vec{p}, σ im Produkt der Erzeugungsoperatoren definiert, was das Vorzeichen der **Besetzungszustände** (8.5.5) festlegt. Für Bosonen ist die Reihenfolge ohnehin irrelevant, da die \mathbf{a}^\dagger in diesem Falle untereinander vertauschen. Es ist klar, daß diese Zustände simultane Eigenzustände der $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$ sind. Sie entsprechen demnach Zuständen mit wohldefinierter Besetzungszahl für die Einteilchenzustände zu wohldefiniertem Impuls- und Spin-z-Komponenten. Die möglichen Eigenwerte sind offenbar

$$\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \in \begin{cases} \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\} & \text{für Bosonen,} \\ \{0, 1\} & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (8.5.6)$$

Wegen (8.4.15) und (8.4.16) sind diese Zustände zugleich Energie- und Gesamtteilchenzahleigenzustände zu den Eigenwerten

$$E[\tilde{n}] = \sum_{\vec{p}, \sigma} E(\vec{p}) \tilde{n}(\vec{p}, \sigma), \quad N[\tilde{n}] = \sum_{\vec{p}, \sigma} \tilde{n}(\vec{p}, \sigma). \quad (8.5.7)$$

⁵Die $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$ sind selbstadjungierte untereinander vertauschbare Operatoren und repräsentieren somit zueinander kompatible Observable.

8.5. Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase

Jetzt können wir die Zustandssumme (8.5.2) problemlos berechnen. Wie wir gleich sehen werden, empfiehlt es sich aber, statt des konstanten Parameters α eine Funktion $\alpha(\vec{p}, \sigma)$ einzuführen. Dann ist

$$\begin{aligned} & \left\langle \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \left| \exp[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)] \right| \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \right\rangle \\ &= \exp \left[- \sum_{\vec{p}, \sigma} \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)] \right] \\ &= \prod_{\vec{p}, \sigma} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)]] . \end{aligned} \quad (8.5.8)$$

Für jedes (\vec{p}, σ) ist über den dazugehörigen Besetzungszahlenwert gemäß (8.5.6) zu summieren. Für Bosonen ist dies jeweils eine geometrische Reihe, für Fermionen eine endliche Summe:

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr} \exp \left[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \right] &= \prod_{\vec{p}, \sigma} \sum_{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)]] \\ &= \begin{cases} \prod_{\vec{p}, \sigma} \frac{1}{1 - \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]} , \\ \prod_{\vec{p}, \sigma} \{1 + \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\} . \end{cases} \end{aligned} \quad (8.5.9)$$

Dabei ist zu beachten, daß für Bosonen $\alpha > 0$ (d.h. $\mu < 0$) sein muß, damit die Summe über $n(\vec{p}, \sigma)$ konvergiert. Der vom Einteilchengrundzustand $\vec{p} = 0$ herrührende Beitrag divergiert (für $\alpha \rightarrow 0$). Wir werden unten sehen, daß diese Einschränkung wichtige physikalische Konsequenzen hat. Für das großkanonische Potential haben wir also

$$\Phi = \ln Z = \begin{cases} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \ln \{1 - \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\} , \\ + \sum_{\vec{p}, \sigma} \ln \{1 + \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\} . \end{cases} \quad (8.5.10)$$

Als nächstes berechnen wir die **mittlere Besetzungszahl** des Einteilchenzustandes im großkanonischen Zustand (8.5.1). Es gilt

$$\begin{aligned} & \left\langle \tilde{n}(\vec{p}', \sigma') \left| \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \exp \left[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \right] \right| \tilde{n}(\vec{p}', \sigma') \right\rangle = \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \\ & \quad \times \prod_{\vec{p}', \sigma'} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}', \sigma') [\beta E(\vec{p}') + \alpha(\vec{p}', \sigma')]] . \end{aligned} \quad (8.5.11)$$

Demnach erhalten wir die mittlere Besetzungszahl durch logarithmische Ableitung von (8.5.9) nach $\alpha(\vec{p}, \sigma)$:

$$\tilde{N}(\vec{p}, \sigma) = \langle \mathbf{N} \rangle_{T, \mu} = - \left[\frac{\partial}{\partial \alpha(\vec{p}, \sigma)} \ln Z \right]_{\alpha(\vec{p}, \sigma) = \alpha} = \begin{cases} \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] - 1} & \text{für Bosonen,} \\ \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] + 1} & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (8.5.12)$$

Durch logarithmische Ableitung der Zustandssumme (8.5.9) nach β bzw. α ergibt sich die mittlere Energie und Gesamtteilchenzahl

$$U = \langle \mathbf{H} \rangle_{T,\mu} = (2s+1) \sum_{\vec{p}} \frac{E(\vec{p})}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}, \quad (8.5.13)$$

$$N = \langle \mathbf{N} \rangle_{T,\mu} = (2s+1) \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}. \quad (8.5.14)$$

Im Limes $V \rightarrow \infty$ (d.h. $L \rightarrow \infty$), werden gemäß (8.4.5) die Abstände zwischen den Energieniveaus (bzw. den diskreten Impulsen) immer kleiner, und wir können die Summen durch Integrale ersetzen. Dazu stellen wir fest, daß wegen (8.4.5) in jeden kleinen Impulsbereich $d^3 p$ gerade $V d^3 p / (2\pi)^3$ Zustände fallen, d.h. wir müssen überall die Ersetzung

$$\sum_{\vec{p},\sigma} \rightarrow (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \quad (8.5.15)$$

vornehmen. Dann wird die mittlere Besetzungszahl (8.5.12) zu einer **Impulsverteilungsdichte** für

$$n[E(\vec{p}); \beta, \alpha] = \frac{2s+1}{V} \tilde{N}(\vec{p}, \sigma) =: \begin{cases} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha] \\ n_F[E(\vec{p}); \beta, \alpha] \end{cases} = \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}. \quad (8.5.16)$$

Dies ist die **Bose-Einstein-** bzw. **Fermi-Dirac-Verteilung**.

Bei **Bosonen** ist allerdings bei der Ersetzung (8.5.15) die bereits oben erwähnte Einschränkung $\alpha > 0$ (d.h. gemäß (8.5.3) $\mu < 0$) zu berücksichtigen. Haben wir eine **mittlere Gesamtteilchenzahl** (8.5.14) vorgegeben, können wir für endliches Volumen diese Teilchenzahl durch Wahl eines hinreichend kleinen α stets erreichen, denn es ist $E(\vec{p} = 0) = 0$, und folglich divergiert die Besetzungszahl (8.5.12) für Bosonen für den **Einteilchengrundzustand** für $\alpha \rightarrow 0$. Für sehr kleine Temperaturen erwarten wir also, daß im Falle eines Bosegases eine **makroskopische Anzahl** von Teilchen den Einteilchengrundzustand bei $\vec{p} = 0$ besetzen wird bis sich bei $T = 0$ alle Teilchen im Grundzustand befinden. Dies bezeichnet man als **Bose-Einstein-Kondensation**. Es ist dabei zu betonen, daß es sich um eine Kondensation im Impulsraum, nicht im Ortsraum handelt.

Im Limes $V \rightarrow \infty$ geht das Bose-Einstein-Kondensat bei einer sorglosen Anwendung der Ersetzungsregel (8.5.15) bei der Berechnung der **mittleren Teilchendichte** verloren, denn für $\alpha \rightarrow 0$ erhalten wir durch Übergang zu Kugelkoordinaten im Impulsraum

$$d\rho_B = (2s+1)n_B[E(\vec{p}); \beta, 0] \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = \frac{4\pi P^2}{\exp[\beta E(\vec{p})] - 1} \frac{dP}{(2\pi)^3}. \quad (8.5.17)$$

Dabei haben wir $P = |\vec{p}|$ geschrieben, um Verwechslungen mit der Bezeichnung p für den Druck zu vermeiden. Wegen

$$\exp[\beta E(\vec{p})] \underset{\vec{p} \rightarrow 0}{\cong} 1 + \beta E(\vec{p}) = 1 + \beta \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (8.5.18)$$

liefert der Integrationsbereich für kleine P auch nur einen sehr kleinen Beitrag zur Gesamtdichte ρ_B . Übersteigt also die Gesamtdichte des Gases den kritischen Wert

$$\rho_{B,\text{krit}} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{2s+1}{\exp[\beta E(\vec{p})] - 1}, \quad (8.5.19)$$

8.5. Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase

so muß entsprechend *vor dem Grenzübergang* $V \rightarrow \infty$ die Dichte der Teilchen im Kondensat

$$\rho_{B,\text{kond}} = \rho_B - \rho_{B,\text{krit}} \quad (8.5.20)$$

gesetzt werden. Dann ist mit $V \rightarrow \infty$ der Grenzübergang $\alpha \rightarrow 0$ gemäß (8.5.16) so zu führen, daß

$$\rho_{B,\text{kond}} = \frac{N_{B,\text{kond}}}{V} = \frac{2s+1}{V(\exp \alpha - 1)} = \text{const} \quad (8.5.21)$$

bleibt.

Für das Bosegas lautet also der korrekte Grenzübergang für $V \rightarrow \infty$

$$\rho_B = \frac{N_B}{V} = \begin{cases} (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha] & \text{falls } \rho_B < \rho_{B,\text{krit}}, \\ \rho_{B,\text{kond}} + (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha = 0] & \text{falls } \rho_B \geq \rho_{B,\text{krit}}. \end{cases} \quad (8.5.22)$$

Für das Fermigas treten diese Komplikationen nicht auf, denn wir können $\alpha \in \mathbb{R}$ (d.h. auch $\mu \in \mathbb{R}$) wählen und so jede beliebige Teilchenzahl für alle $T \geq 0$ erhalten, d.h. es gilt stets

$$\rho_F = (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_F[E(\vec{p}); \beta, \alpha]. \quad (8.5.23)$$

Zur mittleren Energie tragen im Fall des Bosegases die Kondensatteilchen freilich nichts bei, denn es ist $E(\vec{p} = 0) = 0$. Es gilt dann also für die Energie sowohl für Bose- als auch für Fermigase

$$U = (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} E(\vec{p}) n_{B/F}[E(\vec{p}); \beta, \alpha]. \quad (8.5.24)$$

Schließlich berechnen wir noch die **Entropie** des Gases. Definitionsgemäß ist

$$S = -k_B \text{Tr}(\mathbf{R} \ln \mathbf{R}) = k_B \langle \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N} + \Phi \mathbb{1} \rangle_{T,\mu} = k_B (\Phi + \beta U + \alpha N). \quad (8.5.25)$$

Im Falle des Bosegases müssen wir wieder den Fall, daß ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt, besonders berücksichtigen. Gemäß (8.5.9) ist der Beitrag des Kondensats

$$\frac{\Phi_{\text{cond}}}{V} = -\frac{1}{V} \ln[1 - \exp(-\alpha)] = \frac{\alpha}{V} - \frac{1}{V} \ln[\exp(\alpha) - 1]. \quad (8.5.26)$$

Gemäß (8.5.22) ist der Grenzwert $V \rightarrow \infty$ so zu führen, daß $\exp \alpha - 1 \sim 1/V$ ist, und das bedeutet, daß (8.5.26) im Limes verschwindet. Wir können also das großkanonische Potential sowohl für Bose- als auch für Fermigase durch die naive Ersetzung (8.5.15) berechnen, d.h. es gilt

$$\Phi = \mp (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \ln \left[1 \mp \exp \left(-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m} - \alpha \right) \right]. \quad (8.5.27)$$

Diese Form ist allerdings für die folgenden Rechnungen etwas unbequem. Drücken wir aber das Integral in Kugelkoordinaten aus und integrieren einmal partiell, erhalten wir nach einigen Umformungen (*Übung!*)

$$\Phi = \frac{(2s+1)V\beta}{6\pi^2 m} \int_0^\infty dP P^4 n_{B/F}[E(\vec{p}), \beta, \alpha]. \quad (8.5.28)$$

Der Vergleich mit (8.5.24) ergibt die exakte Beziehung

$$\Phi = \frac{2}{3}\beta U \stackrel{(8.5.4)}{\Rightarrow} pV = \frac{2}{3}U. \quad (8.5.29)$$

Daraus folgt für die Entropie

$$S = k_B \left(\frac{5}{3}\beta U + \alpha N \right). \quad (8.5.30)$$

Wir können (8.5.28) noch etwas vereinfachen, indem wir $x = \beta E = \beta P^2/(2m)$ als Integrationsvariable einführen:

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x+\alpha) \mp 1} \\ &=: \pm \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} (\pm 1) \text{Li}_{5/2}[\pm \exp(-\alpha)]. \end{aligned} \quad (8.5.31)$$

Dabei ist die **Polylogarithmusfunktion** für $|z| < 1$ und $j \geq 0$ durch die Reihe

$$\text{Li}_j(z) := \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^j} \quad (8.5.32)$$

definiert. Für $z = 1$ haben wir die **Riemannsche Zeta-Funktion**

$$\zeta(j) = \text{Li}_j(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^j} \quad (8.5.33)$$

vor uns. Die Reihendarstellungen (8.5.32) und (8.5.33) werden wir im nächsten Abschnitt aus (8.5.31) herleiten.

8.5.1 Der klassische Grenzfall

Ein Blick auf (8.5.9-8.5.11) lehrt, daß sich die **Quantennatur der Teilchen** für die thermodynamischen Größen nur hinsichtlich der Bose- oder Fermistatistik der Teilchen auswirkt. Wir können also erwarten, daß wir den klassischen Grenzfall für das Verhalten des Gases erhalten, wenn wir im Nenner der Bose- bzw. Fermiverteilung den Term ∓ 1 vernachlässigen können. Dies ist der Fall für $\alpha \gg 1$ (also $\beta\mu \ll -1$), d.h. gemäß (8.5.16) für kleine Dichten. Dann gehen in der Tat sowohl die Bose- als auch die Fermiverteilung in die **klassische Boltzmannverteilung**

$$n_{\text{Boltz}}(E(\vec{p}), \beta, \alpha) = (2s+1) \exp[-\alpha - \beta E(\vec{p})] \quad (8.5.34)$$

über. Dann können wir zunächst die innere Energie und mittlere Teilchenzahl berechnen, indem wir in (8.5.13) und (8.5.14) den Term ∓ 1 im Nenner vernachlässigen:

$$U = V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{\vec{p}^2}{2m} n_{\text{Boltz}}(E(\vec{p}); \beta, \alpha) = (2s+1)V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \frac{3\gamma}{2\beta}, \quad (8.5.35)$$

$$N = V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_{\text{Boltz}}[E(\vec{p}); \beta, \alpha] = (2s+1)V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \gamma \quad \text{mit} \quad \gamma = \exp(-\alpha). \quad (8.5.36)$$

Daraus folgt unmittelbar die **kalorische Zustandsgleichung**

$$U = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (8.5.37)$$

Mit (8.5.28) ergibt sich folglich auch die **Gasgleichung**

$$pV = N k_B T. \quad (8.5.38)$$

Lösen wir (8.5.36) nach μ auf, folgt gemäß (8.5.30) die **Sackur-Tetrode-Formel** für die Entropie

$$\begin{aligned} S &= \frac{5}{2} k_B N - k_B N \ln \gamma = \frac{5}{2} N k_B - k_B N \ln \left[\left(\frac{2\pi\beta}{m} \right)^{3/2} \frac{N}{(2s+1)V} \right] \\ &= \frac{5}{2} k_B N + k_B N \ln \left[\frac{(2s+1)V}{N} \left(\frac{mU}{3\pi N} \right)^{3/2} \right]. \end{aligned} \quad (8.5.39)$$

Die Berechnung der Entropie im Rahmen der klassischen Statistischen Physik erweist sich als problematisch. Es tritt das **Gibbssche Paradoxon** auf, das sich darin äußert, daß die Entropie nicht extensive Terme enthält. Eine Größe heißt dabei **extensiv**, wenn sie sich durch eine Skalierung mit V bei festgehaltener Temperatur und chemischem Potential $\propto V$ verhält. Dies ist gemäß (8.5.36) und (8.5.37) offenbar der Fall für die innere Energie und die mittlere Teilchenzahl. Damit ist aber auch die Entropie aufgrund von (8.5.39) extensiv. Es zeigt sich, daß die entscheidende Eigenschaft der Quantentheorie, die zur Lösung dieses Paradoxons führt, die **Ununterscheidbarkeit der Teilchen** ist (eine ausführliche Diskussion des Gibbsschen Paradoxons findet sich z.B. in [Som78]).

Wir können nun die obigen Resultate mitsamt einer systematischen Entwicklung nach Potenzen der Fugazität $\gamma = \exp(-\alpha) = \exp(\mu\beta)$ auch erhalten, indem wir von (8.5.31) ausgehen.

Der klassische Grenzfall liegt nach unseren obigen Überlegungen vor, wenn $\alpha \gg 1$, also $\gamma \ll 1$ ist. Berechnen wir dazu das Integral

$$I_B(j, \gamma) = \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{\exp(x)/\gamma - 1}. \quad (8.5.40)$$

Erweitern wir den Integranden mit $\gamma \exp(-x)$, erhalten wir für $\gamma < 1$ unter Verwendung der Summenformel für die geometrische Reihe

$$\frac{1}{\exp(x)/\gamma - 1} = \frac{\gamma \exp(-x)}{1 - \gamma \exp(-x)} = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma^k \exp(-kx). \quad (8.5.41)$$

Setzen wir dies in (8.5.40) ein, können wir Integration und Summation vertauschen und erhalten unter Verwendung der Eulerschen Definition der Γ -Funktion (s. [CH10]) und (8.5.32)

$$I_B(j, \gamma) = \Gamma(j) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma^k}{k^j} = \Gamma(j) \text{Li}_j(\gamma). \quad (8.5.42)$$

Die Reihe konvergiert offenbar für $j > 0$ im Konvergenzbereich $|\gamma| < 1$. Für $\gamma = 1$ (also $\alpha \rightarrow 0$) konvergiert sie, falls $j > 1$ ist. Den oben auf elementarere Weise behandelten klassischen Grenzfall erhalten wir daraus, indem wir in (8.5.42) nur den führenden Term $k = 1$ mitnehmen und

$$\Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi} \quad \text{für } n \in \mathbb{N}_0 \quad (8.5.43)$$

berücksichtigen.

Es ist klar, daß wir für die entsprechenden Fermionischen Integrale

$$I_F(j, \gamma) = \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{\exp(x)/\gamma + 1} = - \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{-\exp(x)/\gamma - 1} = -I_B(j, -\gamma) = -\Gamma(j) \sum_{k=1}^\infty \frac{(-\gamma)^k}{k^j} \quad (8.5.44)$$

schreiben können.

8.5.2 Das entartete Fermi-Gas

Wir behandeln nun den Fall, daß die klassische Näherung als Boltzmann-Gas ungültig wird, also die Quantennatur der Teilchen, d.h. für Fermionen das **Pauli-Prinzip** wichtig werden. Dies ist stets dann der Fall, wenn $\exp(-\alpha) = \exp(\beta\mu)$ nicht mehr klein gegen 1 ist. Dies ist für niedrige Temperaturen, d.h. $\beta \rightarrow \infty$, und nicht zu kleine $\mu > 0$ der Fall. Demnach empfiehlt sich hier eine Entwicklung der thermodynamischen Größen nach Potenzen von $k_B T / \mu = 1/(\beta\mu)$. Es ist daher bequemer statt mit dem großkanonischen Parameter $\alpha = -\beta\mu$ mit dem chemischen Potential μ selbst zu rechnen.

Für $T = 0$ geht die Fermiverteilung in

$$n_{F0}(E; \mu) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} n_F(E; \beta, \mu) = (2s + 1)\Theta(\mu - E) \quad (8.5.45)$$

über. Die Gasteilchen füllen also in diesem Fall alle Einteilchenenergiezustände zu Energien $E < \mu$ mit jeweils $(2s + 1)$ Teilchen auf. Im folgenden bezeichnen wir das chemische Potential bei $T = 0$ mit μ_0 . Es ist dabei wie bei endlichen Temperaturen durch die mittlere Gesamtteilchenzahl N bestimmt

$$N = \frac{(2s + 1)V}{(2\pi)^3} \int_{K(\sqrt{2m\mu_0})} d^3 p = \frac{(2s + 1)V}{2\pi^2} \frac{(2m\mu_0)^{3/2}}{3}. \quad (8.5.46)$$

Dabei haben wir verwendet, daß wegen der Dispersionsrelation $E(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2m)$, aufgrund der Verteilung (8.5.45) der Integrationsbereich eine Kugel im Impulsraum vom Radius $\sqrt{2m\mu_0}$ ist. Der Fall $T = 0$ entspricht demnach dem **Grundzustand** eines Systems von N Fermionen: Aufgrund des **Pauli-Prinzips** haben in jedem Einteilchenniveau nur $(2s + 1)$ Teilchen (entsprechend der möglichen Spineinstellungen) Platz. Daraus folgt wieder unmittelbar die Verteilung (8.5.45).

Die mittlere Energie bei $T = 0$ ist

$$U_0 = \frac{(2s + 1)V}{(2\pi)^3} \int_{K(\sqrt{2m\mu_0})} d^3 p \frac{p^2}{2m} = \frac{(2s + 1)V}{20m\pi^2} (2m\mu_0)^{5/2} = \frac{3}{5} N \mu_0. \quad (8.5.47)$$

Das großkanonische Potentials ist gemäß (8.5.28)

$$\Phi_0 = \frac{2}{3} \beta U = \frac{2}{5} N \beta \mu_0, \quad (8.5.48)$$

und für die Entropie folgt aus (8.5.30)

$$S_0 = 0, \quad (8.5.49)$$

was wiederum zeigt, daß der Grundzustand des Gases ein reiner Zustand ist.

Zur Berechnung der Korrekturen bei endlichen Temperaturen bemerken wir, daß die thermodynamischen Größen durch Integrale der Form

$$F[f] = \frac{(2s + 1)V}{2\pi^2} \int_0^\infty dP P^2 f(P) n_F[E(\vec{p}); \beta, \mu] \quad (8.5.50)$$

gegeben sind. Substituieren wir $x = \beta[P^2/(2m) - \mu]$, geht dies in die Form

$$F[f] = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \sqrt{x + \beta\mu} f\left(\sqrt{\frac{2m(x + \beta\mu)}{\beta}}\right) \frac{1}{1 + \exp x} \quad (8.5.51)$$

über. Durch partielle Integration wird daraus

$$F[f] = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} \times \int_{-\beta\mu}^x dx' \left[\sqrt{x' + \beta\mu} f\left(\sqrt{\frac{2m(x' + \beta\mu)}{\beta}}\right) \right]. \quad (8.5.52)$$

Beginnen wir mit der Berechnung der mittleren Teilchenzahl. Gemäß (8.5.14) und der Ersetzungsregel (8.5.15) finden wir durch Einsetzen in (8.5.52)

$$N = \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} (x + \mu\beta)^{3/2}. \quad (8.5.53)$$

Der erste Faktor im Integranden ist eine gerade Funktion von x , die für $|x| \rightarrow \infty$ exponentiell gedämpft ist, während der zweite Faktor für große $\beta\mu$ langsam veränderlich ist. Wir können also den zweiten Faktor nach Potenzen von $1/(\beta\mu)$ entwickeln,

$$(x + \beta\mu)^{3/2} = (\beta\mu)^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{x}{\beta\mu} + \frac{3}{8} \frac{x^2}{\mu^2\beta^2} + \dots\right), \quad (8.5.54)$$

und für das dann entstehende Integral die untere Integrationsgrenze $\beta\mu \rightarrow -\infty$ setzen.

Die Anwendung der Formeln

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} = - \frac{1}{1 + \exp x} \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1, \quad (8.5.55)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} = \frac{\pi^2}{3} \quad (8.5.56)$$

in (8.5.53) eingesetzt ergibt schließlich⁶

$$N = \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} (2m\mu)^{3/2} \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B}{\mu}\right)^2 T^2 + \mathcal{O}[(\beta\mu)^{-4}]\right]. \quad (8.5.57)$$

Zur Berechnung der inneren Energie setzen wir in (8.5.52) $f(P) = P^2/(2m) = (x + \beta\mu)/\beta$, erhalten wir das Integral

$$U = \frac{(2s+1)V}{10\pi^2\beta} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx (x + \beta\mu)^{5/2} \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2}. \quad (8.5.58)$$

Das Integral berechnen wir wieder näherungsweise, indem wir die Reihenentwicklung

$$(x + \beta\mu)^{5/2} = (\beta\mu)^{5/2} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{x}{\beta\mu} + \frac{15}{8} \frac{x^2}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(\beta\mu)^3}\right)\right] \quad (8.5.59)$$

⁶Gl. (8.5.56) wird im Anhang E bewiesen.

einsetzen und die untere Integrationsgrenze nach $-\infty$ ausdehnen. Verwenden wir wieder (8.5.56), erhalten wir

$$U = F \left[\frac{p^2}{2m} \right] = \frac{(2s+1)V}{20m\pi^2} (2m\mu)^{5/2} \left[1 + \frac{5}{8} \left(\frac{\pi k_B}{\mu} \right)^2 T^2 + \mathcal{O}[(\beta\mu)^{-4}] \right]. \quad (8.5.60)$$

Ein wichtiges Resultat für das freie Elektronengasmodell für Metalle ist die spezifische Wärme. Zuzufolge (8.4.41) müssen wir dazu U bei festgehaltenem N und V nach der Temperatur ableiten. Dazu benötigen wir zunächst die entsprechende Ableitung von μ nach T . Aus $N, V = \text{const}$ folgt mit der Kettenregel durch Ableitung von (8.5.57) nach T

$$0 = \frac{3}{2} \sqrt{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} + \frac{\pi^2 k_B^2}{4\sqrt{\mu}} T + \mathcal{O}(T^2) \Rightarrow \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{6\mu} + \mathcal{O}(T^2). \quad (8.5.61)$$

Wieder mit der Kettenregel erhalten wir für die spezifische Wärme

$$c_{V,N} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{(2s+1)}{12\pi^2} (2m\mu)^{3/2} \pi^2 \frac{k_B^2 T}{\mu N} + \mathcal{O}(T^2) = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{2\mu} + \mathcal{O}(T^2). \quad (8.5.62)$$

Dies ist eine direkte Konsequenz des Quantencharakters der Elektronen, die sich in diesem Falle bei niedrigen Temperaturen dadurch bemerkbar macht, daß die Elektronen zur spezifischen Wärme des Metalls bei niedrigen Temperaturen kaum beitragen.

Wir müssen noch die Güte der obigen Näherung abschätzen. Ableiten von (8.5.31) nach α ergibt für den Fall von Fermionen

$$N = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x + \alpha)}, \quad (8.5.63)$$

so daß die Größe

$$Q = \frac{4\pi^2 N}{(2s+1)V} \left(\frac{\beta}{2m} \right)^{3/2} = \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x + \alpha)} \quad (8.5.64)$$

ein Maß für das Quantenverhalten des Gases darstellt, denn der klassische Limes ergibt sich für $\alpha \rightarrow \infty$, und dann ist Q klein, während es im Quantenlimes $\alpha \rightarrow -\infty$ groß wird. Für den Fall der Leitungselektronen in Metallen, die sich in erster Näherung als ideales Fermigas behandeln lassen, ergibt sich die Temperatur, wo das Verhalten des Gases klassisch wird (also bei $Q \approx 1$) zu $\Theta \approx 10^5 \text{ K} \approx 8.6 \text{ eV}$. Demnach ist das **Elektronengas**, welches eine grobe Näherung für das Verhalten der **Leitungselektronen in Metallen** darstellt, bei Raumtemperaturen ($T_{\text{Raum}} \simeq 293 \text{ K}$) entartet. Dies erklärt, warum die Leitungselektronen zur spezifischen Wärme von Metallen bei Raumtemperatur kaum beitragen. Die Erklärung dieses Effekts geht auf Sommerfeld zurück: Drude hatte nämlich aus der Idee, daß die Leitungselektronen in Metallen näherungsweise als ideales Boltzmann-Gas behandelt werden können, eine recht gute Erklärung für die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit und der Wärmeleitfähigkeit (Wiedemann-Franz'sches Gesetz) von Metallen gefunden. Allerdings ergab sein Modell einen viel zu hohen Beitrag seines klassischen Elektronengases zur spezifischen Wärme. Wie Sommerfeld dann gezeigt hat, ist dies auf die Gasentartung bei Raumtemperatur zurückzuführen.

8.5.3 Das entartete Bose-Gas

Wir betrachten nun das entartete Bose-Gas genauer. Wir diskutieren wieder die Eigenschaften des Gases bei fester mittlerer Teilchenzahl. Aus (8.4.34) folgt mit (8.5.31) durch gliedweises Differenzieren der

Reihe (8.5.32)

$$N(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \Phi(\beta, \alpha, V) = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \text{Li}_{3/2}[\exp(-\alpha)]. \quad (8.5.65)$$

Wie wir oben diskutiert haben, gilt diese Formel allerdings nur für Temperaturen oberhalb des Wertes, bei dem **Bose-Einstein-Kondensation** eintritt. Für das Bosegas muß ja $\alpha \geq 0$ sein, und $\text{Li}_{3/2}(\gamma)$ ist eine monoton wachsende Funktion, nimmt also ihr Maximum für $\gamma = 1$ an. Es ist daher bequem als **kritische Temperatur** $T_c = 1/(k_B\beta_c)$ diejenige Temperatur zu definieren, für die

$$N = V\rho_{B,\text{krit}} = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta_c}\right)^{3/2} \underbrace{\text{Li}_{3/2}(1)}_{\zeta(3/2)} \quad (8.5.66)$$

wird. Für noch tiefere Temperaturen (also $\beta > \beta_c$) muß sich dann eine **makroskopisch relevante Anzahl** von Teilchen im Grundzustand bei $\vec{p} = 0$ aufhalten. Diese Zahl ist demnach

$$N_{\text{BEC}} = \begin{cases} N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \right] & \text{für } T < T_c, \\ 0 & \text{für } T > T_c. \end{cases} \quad (8.5.67)$$

Entsprechend ist für $T < T_c$ die Teilchenzahl in angeregten Zuständen

$$N^* = N \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^3} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \zeta(3/2). \quad (8.5.68)$$

Die innere Energie und damit durch (8.5.29) gegeben, und der Druck ergibt sich dann durch Differentiation von (8.5.31) zu

$$U = \frac{3}{2}pV = -\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi(\beta, \alpha, V) = \begin{cases} \frac{3\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)} N^* k_B T = \frac{3\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)T_c^{3/2}} N k_B T^{5/2} & \text{für } T < T_c, \\ \frac{3\text{Li}_{5/2}[\exp(-\alpha)]}{2\text{Li}_{3/2}[\exp(-\alpha)]} N k_B T & \text{für } T \geq T_c. \end{cases} \quad (8.5.69)$$

Der klassische Limes ergibt sich daraus für $\alpha \rightarrow \infty$ also $\mu\beta \rightarrow -\infty$. Die Reihenentwicklung (8.5.32) liefert in der Tat wieder (8.5.37), wie es sein muß.

Die Entropie finden wir dann aus (8.5.30). Für $T < T_c$ ergibt sich

$$S = \frac{5\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)} k_B N \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad \text{für } T < T_c, \quad (8.5.70)$$

und für die spezifische Wärme gemäß (8.4.41)

$$c_V = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{15\zeta(5/2)}{4\zeta(3/2)} k_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad \text{für } T < T_c. \quad (8.5.71)$$

Für $T \rightarrow 0$ verschwinden also sowohl die Entropie als auch die spezifische Wärme. Wie wir gesehen haben, liegt das beim Bosegas daran, daß nur der Anteil der Teilchen außerhalb des Bose-Einstein-Kondensats, also diejenigen Teilchen, die „angeregte Zustände“ besetzen, zur inneren Energie, beitragen.

Aus dieser Betrachtung der idealen Gase ergeben sich einige wichtige allgemeine Folgerungen für die Behandlung von Vielteilchensystemen bei niedrigen Temperaturen bzw. im Grenzfall $T = 0$: Die wesentlichen kollektiven Eigenschaften des Vielteilchensystems (wie z.B. die spezifische Wärme) werden durch die dann dünn besetzten **angeregten Einteilchenzustände** bestimmt. Wir können also vermuten, daß wir auch bei wechselwirkenden Systemen mit **effektiven Theorien für nichtwechselwirkende Elementaranregungen** eine gute näherungsweise Beschreibung des Systems erreichen können. Formal verhalten sich diese Elementaranregungen wieder wie freie (oder allenfalls schwach wechselwirkende) Teilchen, die man daher auch als **Quasiteilchen** bezeichnet. Diese Quasiteilchen können durch die Wechselwirkung allerdings evtl. von den eigentlichen Teilchen drastisch verschiedene Eigenschaften besitzen. Die Eigenschaften von **Supraleitern** ergeben sich z.B. daraus, daß eine effektive Anziehung zwischen den Valenzelektronen im Metall besteht. Diese kommt durch die Wechselwirkung mit aus ihrer Gleichgewichtslage gebrachten Metallgitterionen zustande, die aufgrund der Wärmebewegung bei endlichen Temperaturen **kollektive Schwingungen** um diese Gleichgewichtslage ausführen. Diese Gitterschwingungen selbst entsprechen näherungsweise quantenmechanisch harmonischen Oszillatoren, die wiederum im **Quasiteilchenbild** beschrieben werden können. Diese Quasiteilchen heißen **Phononen**, da die Gitterschwingungen Schallwellen im Metall entsprechen. Bei niedrigen Energien vermitteln die Phononen die oben erwähnte anziehende effektive Wechselwirkung zwischen den Valenzelektronen, und dies führt zu einer Instabilität des fermionischen Systems nahe der Fermikante: Die Elektronen nahe der Fermikante neigen dazu, Paare mit entgegengesetztem Impuls und Spin zu bilden, die **Cooper-Paare**. Als gerade Anzahl von Fermionen verhalten sich diese Cooper-Paare wie Bosonen, können also wieder als bosonische (!) Quasiteilchen interpretiert werden. Dieser nach ihren Entdeckern dieses Mechanismus Bardeen, Cooper und Shrieffer als **BCS-Zustand** bezeichnete Zustand des Elektronengases ist nun durch eine **Energielücke** von den niedrigsten Anregungen getrennt. Dies bedeutet, daß kleine Störungen, wie ein nicht zu großes elektrisches Feld, keine Quasiteilchen anregen kann. Das bedeutet aber, daß die Cooperpaare aufgrund des schwachen elektrischen Feldes sich verlustfrei bewegen können. Makroskopisch gesehen ergibt sich also ein **widerstandsfreier Stromfluß**, d.h. der elektrische Widerstand eines Elektronengases im BCS-Zustand verschwindet. Ähnlich induzieren (nicht zu starke) Magnetfelder Ströme, die aufgrund der fehlenden Dissipation ohne weitere äußere Einwirkungen erhalten bleiben. Nach der Lenzschen Regel sind diese Ströme der sie bewirkenden Änderung des Zustandes (also des von außen angelegten Magnetfeldes) entgegengerichtet. Das führt dazu, daß sich im Inneren des Supraleiters kein Magnetfeld befindet. Er ist daher ein idealer **Diamagnet (Meißner-Ochsenfeld-Effekt)**.

Werden die äußeren Störungen (z.B. elektromagnetische Felder oder höhere Temperaturen) größer, kann die Energielücke zwischen dem BCS-Grundzustand überwunden werden. Auch ab einer bestimmten Temperatur lösen sich die Cooper-Paare auf, und das System verhält sich wieder wie ein gewöhnliches Fermionengas. Dies ist ein typisches Beispiel für einen **Phasenübergang**, wie schon das oben besprochene Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation in Bosegasen. Auch hier tritt bei einer bestimmten kritischen Temperatur eine Phasenänderung auf. Dies ist mit einem **Ordnungsparameter** verbunden. In dem Fall kann als Ordnungsparameter das chemische Potential dienen. Es ist 0, wenn ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt und wird < 0 , wenn keine Kondensation eintritt.

Anhang A

Gaußintegrale

Die Gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung spielt sowohl in der mathematischen Statistik als auch der Physik eine wichtige Rolle. Daher werden häufig Integrale über Gaußverteilungen benötigt. In diesem Anhang leiten wir einige der wichtigsten damit zusammenhängenden Formeln her.

A.1 Das eindimensionale Gaußintegral

Wir beginnen mit der Berechnung des Integrals

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2). \quad (\text{A.1.1})$$

Es läßt sich mit folgendem Trick geschlossen auswerten. Dazu schreiben wir

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) = \int_{\mathbb{R}^2} d^2x \exp(-\vec{x}^2). \quad (\text{A.1.2})$$

Substituieren wir darin Polarkoordinaten $\vec{x} = r(\cos \varphi, \sin \varphi)$, $d^2x = r dr d\varphi$, erhalten wir

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr r \exp(-r^2) = -2\pi \frac{1}{2} \exp(-r^2) \Big|_{r=0}^{\infty} = \pi. \quad (\text{A.1.3})$$

Da $I > 0$, folgt also

$$I = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.1.4})$$

Dieses Resultat können wir nun verwenden, um auch das allgemeinere Integral

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2 + bx), \quad a, b \in \mathbb{C} \quad (\text{A.1.5})$$

zu berechnen. Damit das Integral konvergiert, muß offenbar $\text{Re } a > 0$ sein. Mit einer quadratischen Ergänzung folgt zunächst

$$I(a, b) = \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-a\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2\right]. \quad (\text{A.1.6})$$

A. Gaußintegrale

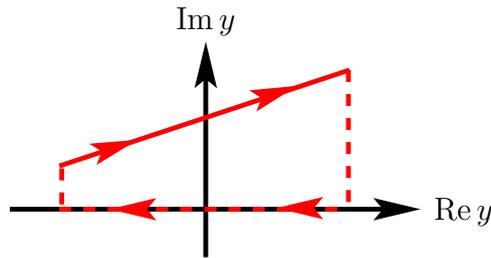


Abbildung A.1: Zur Auswertung des Integrals (A.1.6).

Nun substituieren wir $y = \sqrt{a}[x - b/(2a)]$. Dabei wählen wir von den beiden komplexen Wurzeln diejenige, für die

$$a = |a| \exp(i\varphi), \quad \sqrt{a} = \sqrt{|a|} \exp(i\varphi/2), \quad \varphi \in (-\pi/2, \pi/2) \quad (\text{A.1.7})$$

liegt, für die also der Realteil der Wurzel positiv ist. Die Integration erfolgt dann in der komplexen y -Ebene entlang einer Geraden, die mit der reellen Achse den Winkel $\varphi/2 \in (-\pi/4, \pi/4)$ einschließt und durch $y_0 = b/(2\sqrt{a})$ verläuft (vgl. Abb. A.1). Ergänzen wir die Kontur mit den gestrichelt eingezeichneten Strecken zu einer geschlossenen Kurve, ergibt das Integral 0, denn der Integrand ist eine ganze Funktion. Da die vertikalen Teile im Unendlichen nichts zum Integral beitragen, schließen wir, daß die ursprüngliche Integrationskontur zur Integration entlang der reellen y -Achse deformiert werden darf, ohne daß sich das Integral ändert. Damit ist

$$I(a, b) = \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) = \sqrt{\frac{\pi}{|a|}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} - \frac{i\varphi}{2}\right) \quad (\text{A.1.8})$$

Die Gaußverteilung schreibt man am bequemsten in der Form

$$P(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{mit } \sigma > 0, \quad x_0 \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.1.9})$$

Mit (A.1.8) erhält man nach einigen einfachen Umformungen, daß diese Funktion normiert ist, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = 1. \quad (\text{A.1.10})$$

Den Erwartungswert der Verteilung erhält man aus

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (x-x_0)P(x) = \langle x \rangle - x_0 = 0 \Rightarrow \langle x \rangle = x_0. \quad (\text{A.1.11})$$

Um die Standardabweichung zu berechnen, gehen wir von der erzeugenden Funktion

$$F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-z(x-x_0)^2] = I(z, 0) = \sqrt{\frac{\pi}{z}} \quad (\text{A.1.12})$$

aus. Durch Ableiten nach z folgt

$$F'(z) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx (x-x_0)^2 \exp[-z(x-x_0)^2] = -\frac{1}{2z} \sqrt{\frac{\pi}{z}}. \quad (\text{A.1.13})$$

Daraus ergibt sich

$$\Delta x^2 = \langle (x - x_0)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0)^2 P(x) = \sigma^2. \quad (\text{A.1.14})$$

Die Gaußverteilung (A.1.9) beschreibt also eine Zufallsgröße x mit Mittelwert x_0 und Standardabweichung $\Delta x = \sigma$.

A.2 Mehrdimensionale Gaußintegrale

Mehrdimensionale Gaußintegrale können leicht auf den eben behandelten eindimensionalen Fall zurückgeführt werden. Sei dazu $\hat{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$), für die die Bilinearform $\vec{x}^t \hat{A} \vec{x}$ positiv definit ist. Dann fragen wir nach dem Integral

$$I(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \exp(-\vec{x}^t \hat{A} \vec{x}). \quad (\text{A.2.1})$$

Aufgrund des Satzes von der **Hauptachsentransformation** können wir stets eine unitäre Matrix \hat{U} mit Determinante 1 finden (also $U \in \text{SU}(n)$), sodaß

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n). \quad (\text{A.2.2})$$

Wegen der oben vorausgesetzten Selbstadjungiertheit und positiven Definitheit von \hat{A} sind die Eigenwerte positiv reell ($\lambda_k > 0$). Substituieren wir nun

$$\vec{y} = \hat{U} \vec{x}, \quad d^n y = \det \hat{U} d^n x, \quad (\text{A.2.3})$$

erhalten wir

$$I(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n y \exp\left(-\sum_{k=1}^n \lambda_k x_k^2\right). \quad (\text{A.2.4})$$

Dabei haben wir verwendet, daß man für jedes y_k den Integrationsweg in der komplexen Ebene beliebig deformieren können, weil die Exponentialfunktion überall analytisch ist. Mit (A.2.4) ist aber das mehrdimensionale Gaußintegral auf das Produkt von einzelnen Gaußintegralen zurückgeführt. Verwenden wir (A.1.6) mit $b = 0$, erhalten wir also

$$I(\hat{A}) = \sqrt{\frac{\pi^n}{\prod_{k=1}^n \lambda_k}} \quad (\text{A.2.5})$$

Nun ist aber

$$\prod_{k=1}^n \lambda_k = \det \hat{A}' = \det \hat{A}, \quad (\text{A.2.6})$$

d.h. wir erhalten das Resultat

$$I(\hat{A}) = \sqrt{\frac{\pi^n}{\det \hat{A}}}. \quad (\text{A.2.7})$$

A. Gaußintegrale

Anhang B

Die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

Es seien \mathbf{A} und \mathbf{B} beliebige Operatoren. Dann gilt

$$\exp(\mathbf{A})\mathbf{B}\exp(-\mathbf{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_n, \quad (\text{B.0.1})$$

wobei der „Multikommutator“ rekursiv durch

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}]_0 = \mathbf{B}, \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_n = [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_{n-1}] \quad (\text{B.0.2})$$

definiert ist.

Zum **Beweis** betrachten wir die Funktion

$$\mathbf{F}(z) = \exp(z\mathbf{A})\mathbf{B}\exp(-z\mathbf{A}) \quad (\text{B.0.3})$$

und entwickeln diese Funktion nach Potenzen von z . Offenbar gilt

$$\mathbf{F}'(z) = \mathbf{A}\mathbf{F}(z) - \mathbf{F}(z)\mathbf{A} = [\mathbf{A}, \mathbf{F}(z)], \quad (\text{B.0.4})$$

und weiter durch Iteration

$$\mathbf{F}^{(n)}(z) = [\mathbf{A}, \mathbf{F}(z)]_n. \quad (\text{B.0.5})$$

Die Potenzreihenentwicklung lautet wegen $\mathbf{F}(0) = \mathbf{B}$ also

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_n, \quad (\text{B.0.6})$$

und für $z = 1$ folgt die Behauptung. QED.

Als Anwendung der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel (BCHF) beweisen wir noch folgenden Satz:

Seien \mathbf{A} und \mathbf{B} Operatoren, für die

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = [[\mathbf{A}, \mathbf{B}], \mathbf{B}] = 0 \quad (\text{B.0.7})$$

gilt, so ist

$$\exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \exp \mathbf{A} \exp \mathbf{B} \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\right). \quad (\text{B.0.8})$$

B. Die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

Zum Beweis wenden wir die BCHF (B.0.1) wie folgt an. Zunächst definieren wir

$$\mathbf{F}(z) = \exp[z(\mathbf{A} + \mathbf{B})]. \quad (\text{B.0.9})$$

Wegen der Annahmen (B.0.7) bricht die BCHF bereits nach einem Term ab:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(z)\mathbf{A}\mathbf{F}^{-1}(z) &= \mathbf{A} + z[\mathbf{A} + \mathbf{B}, \mathbf{A}] = \mathbf{A} - z[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \\ \Rightarrow \mathbf{F}(z)\mathbf{A} &= \mathbf{A}\mathbf{F}(z) - z[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{F}(z). \end{aligned} \quad (\text{B.0.10})$$

Ableiten nach z liefert hingegen mit Hilfe dieser Gleichung

$$\mathbf{F}'(z) = \mathbf{F}(z)(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \mathbf{A}\mathbf{F}(z) + \mathbf{F}(z)\mathbf{B} - z[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{F}(z). \quad (\text{B.0.11})$$

Offenbar wird diese Differentialgleichung durch

$$\mathbf{F}(z) = \exp(z\mathbf{A}) \exp(z\mathbf{B}) \exp\left(-\frac{z^2}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\right) \quad (\text{B.0.12})$$

gelöst, und für $z = 1$ folgt (B.0.8). QED.

Anhang C

Berechnung unendlicher Reihen und Produkte

In diesem Abschnitt wollen wir einige Reihen und Produkte berechnen, die wir im Haupttext benötigen.

C.1 Zu Abschnitt 7.4.2

Im folgenden wollen wir die in (7.4.23) angegebene Reihe

$$d(\alpha) = \ln D(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left(1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \right) \quad (\text{C.1.1})$$

bzw. deren Ableitung

$$d'(\alpha) = 2\alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha^2 - n^2} = \alpha \sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{1}{\alpha^2 - n^2} \quad (\text{C.1.2})$$

berechnen. Dabei muß offensichtlich $\alpha \notin \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ gelten. Im folgenden nehmen wir auch an, daß $\alpha \neq 0$ ist. Nun besitzt die Funktion

$$f(z) = \pi \cot(\pi z) - \frac{1}{z} \quad (\text{C.1.3})$$

für genau die Stellen $z \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ einfache Pole mit Residuum 1 und für eine konvergente Reihe können wir offenbar

$$\sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \phi(n) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_1} dz f(z) \phi(z) \quad (\text{C.1.4})$$

schreiben, vorausgesetzt ϕ besitzt nicht in unmittelbarer Umgebung der reellen z -Achse Singularitäten. Die Kontur \mathcal{C}_1 ist in Abb. C.1 angegeben.

Nehmen wir weiterhin an, daß ϕ in der ganzen komplexen Ebene im Unendlichen schneller als wie $1/z$ verschwindet, wie es für die Reihe (C.1.2) mit $\phi(z) = \alpha/(\alpha^2 - z^2)$ der Fall ist, können wir die Kontur wie in Abb. C.1 mit Hilfe der gestrichelten Ergänzungskonturen \mathcal{C}_2 und \mathcal{C}_3 schließen. Dann können wir den Residuensatz auf die rechte Seite von (C.1.4) anwenden.

Für den Fall (C.1.2) besitzt ϕ die einfachen Polstellen $z_{1,2} = \pm\alpha$. Da $f\phi$ eine gerade Funktion ist, folgt daraus mittels des Residuensatzes unmittelbar, daß

$$d'(\alpha) = f(\alpha) = \pi \cot(\pi\alpha) - \frac{1}{\alpha} \quad (\text{C.1.5})$$

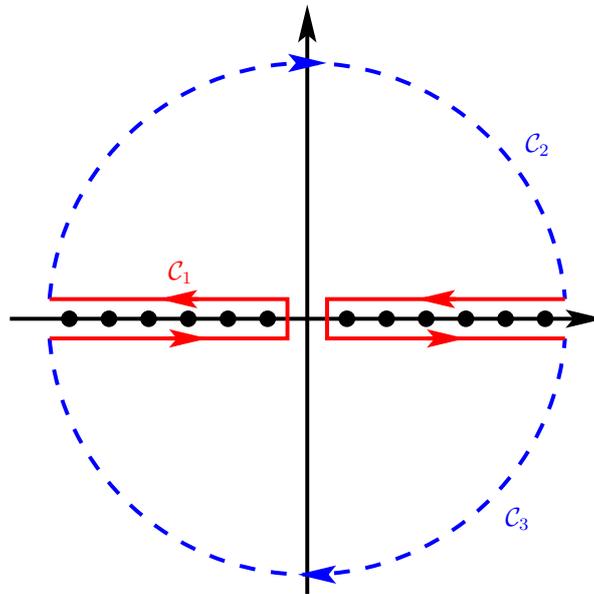


Abbildung C.1: Integrationskontur in der komplexen z -Ebene für (C.1.4).

Integration nach α ergibt unter Berücksichtigung, daß $d(0) = 0$ ist, schließlich

$$d(\alpha) = \ln \left[\frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi} \right], \quad (\text{C.1.6})$$

was schließlich (7.4.24) bestätigt.

Anhang D

Die konfluente hypergeometrische Funktion

Die konfluente hypergeometrische Funktion ist für einige Anwendungen sehr nützlich. In der Quantentheorie benötigt man sie u.a. zwingend für die Behandlung des Streuproblems am Coulomb-Potential (Rutherford-Streuung). Wir folgen in der Behandlung dieser wichtigen Funktion [Str13] und [WW08].

D.1 Definition über eine verallgemeinerte Potenzreihe

Wir betrachten die **konfluente hypergeometrische Differentialgleichung** für eine komplexe Funktion $w : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$

$$zw'' + (\gamma - z)w' - \alpha w = 0. \quad (\text{D.1.1})$$

Diese ist von der Fuchsschen Klasse, und wir machen daher den verallgemeinerten Potenzreihenansatz

$$w(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^{\lambda+j}. \quad (\text{D.1.2})$$

Einsetzen in die Differentialgleichung (D.1.1) liefert

$$a_0 \lambda(\lambda - 1 + \gamma) z^\lambda + \sum_{j=1}^{\infty} [(\lambda + j)(\lambda + j - 1 + \gamma) a_j - (\lambda + j - 1 - \alpha) a_{j-1}] z^{\lambda+j-1} = 0. \quad (\text{D.1.3})$$

Durch Koeffizientenvergleich folgt mit der Annahme $a_0 \neq 0$ zunächst vom 1. Term die Index-Gleichung

$$\lambda(\lambda - 1 + \gamma) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = 1 - \gamma. \quad (\text{D.1.4})$$

Wir betrachten zunächst die in $z = 0$ reguläre Lösung für $\lambda = \lambda_1 = 0$. Dann folgt aus dem Koeffizientenvergleich für $j \geq 1$ die Rekursionsformel für die Koeffizienten

$$a_{j+1} = \frac{j + \alpha}{(j + 1)(j + \gamma)} a_j. \quad (\text{D.1.5})$$

Der Potenzreihenansatz liefert also Lösungen für alle Parameter ausgenommen $-\gamma \in \mathbb{N}_0$. Wir setzen also im folgenden $-\gamma \notin \mathbb{N}_0$ voraus. Weiter ist klar, dass die Potenzreihe genau dann bei einem endlichen

D. Die konfluente hypergeometrische Funktion

Term abbricht, wenn $-\alpha \in \mathbb{N}_0$. Dann ist die Lösung ein Polynom $|\alpha|$ -ten Grades. Für a_0 ergibt die die **konfluente hypergeometrische Funktion**

$$F(\alpha, \gamma, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_j}{(\gamma)_j j!}, \quad (\text{D.1.6})$$

wobei wir das **Pochhammer-Symbol**

$$(\alpha)_j := \alpha(\alpha + 1) \cdots (\alpha + j - 1), \quad (\alpha)_0 := 1 \quad (\text{D.1.7})$$

eingeführt haben. Es lässt sich mit Hilfe der Γ -Funktion wegen

$$\Gamma(\alpha + j) = (\alpha + j - 1)\Gamma(\alpha + j - 1) = (\alpha + j - 1)(\alpha + j - 2)\Gamma(\alpha + j - 2) = \dots = (\alpha)_j \Gamma(\alpha) \quad (\text{D.1.8})$$

in der Form

$$(\alpha)_j = \frac{\Gamma(\alpha + j)}{\Gamma(\alpha)} \quad (\text{D.1.9})$$

schreiben.

Die zweite Lösung für $\lambda = \lambda_2 = 1 - \gamma$ kann man mit dem Ansatz

$$w(z) = z^{1-\gamma} v(z) \quad (\text{D.1.10})$$

erhalten. Setzt man dies nämlich in (D.1.1) ein, erhält man für v die Differentialgleichung

$$z v'' + (2 - \gamma - z) v' - (\alpha + 1 - \gamma) v = 0. \quad (\text{D.1.11})$$

Das ist aber wieder eine konfluente hypergeometrische Differentialgleichung mit $\gamma' = 2 - \gamma$ und $\alpha' = \alpha + 1 - \gamma$. Die Lösung mit dem gewünschten asymptotischen Verhalten für w für $z \rightarrow 0$ entspricht also der dort regulären Lösung für v also

$$w(z) = z^{1-\gamma} F(\alpha + 1 - \gamma, 2 - \gamma, z). \quad (\text{D.1.12})$$

D.2 Integraldarstellung

Für die Anwendungen ist neben dem aus der eben hergeleiteten Potenzreihendarstellung folgenden Verhalten der konfluenten hypergeometrischen Funktion bei $z = 0$ auch das Verhalten für $z \rightarrow \infty$ wichtig. Um die entsprechende asymptotische Entwicklung herzuleiten, ist eine Integraldarstellung dieser Funktion nützlich. Dazu machen wir einen Ansatz in Form einer verallgemeinerten Laplace-Transformation

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dy \exp(yz) f(y), \quad (\text{D.2.1})$$

wobei der Integrationsweg C in der komplexen y -Ebene im folgenden noch geeignet gewählt wird. Setzt man (D.2.1) in die Differentialgleichung (D.1.1) ein, folgt

$$\int_C dy f(y) [zy^2 + (\gamma - z)y - \alpha] \exp(yz) = 0. \quad (\text{D.2.2})$$

D.2. Integraldarstellung

Dies können wir umformen, indem wir z in der Klammer durch ∂_y ersetzen und partiell integrieren. Dies liefert die

$$\int_C dy \frac{d}{dy} [y(y-1)f(y)\exp(yz)] + \int_C dy \exp(yz) \{(\gamma y - \alpha)f(y) - \frac{d}{dy} [y(y-1)f(y)]\} = 0. \quad (\text{D.2.3})$$

Wählen wir also den Integrationsweg C so, dass

$$y(y-1)f(y)\exp(yz)|_{y \in \partial C} = 0 \quad (\text{D.2.4})$$

folgt für f die Differentialgleichung

$$y(y-1)f'(y) + (2y-1-\gamma y + \alpha)f(y) = 0, \quad (\text{D.2.5})$$

die sich durch Trennen der Variablen zu

$$f(y) = f_0(y-1)^{\gamma-1-\alpha} y^{\alpha-1} \quad (\text{D.2.6})$$

lösen läßt. Wir setzen die Integrationkonstante $f_0 = 1$ und erhalten eine Lösung für w zu

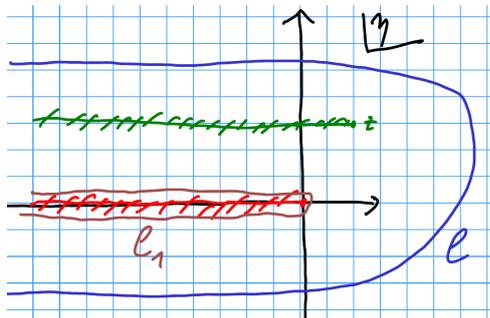
$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dy (y-1)^{\gamma-1-\alpha} y^{\alpha-1} \exp(yz). \quad (\text{D.2.7})$$

Wie oben finden wir eine andere Lösung durch die Substitution $\alpha \rightarrow \alpha' = \alpha + 1 - \gamma$ und $\gamma \rightarrow \gamma' = 2 - \gamma$ und Multiplizieren mit $z^{1-\gamma}$:

$$w(z) = \frac{z^{1-\gamma}}{2\pi i} \int_C dy (y-1)^{1-\alpha} y^{\alpha-\gamma} \exp(yz). \quad (\text{D.2.8})$$

Substituieren wir hierin $\eta = yz$, ergibt sich

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C d\eta (\eta-z)^{-\alpha} \eta^{\alpha-\gamma} \exp \eta. \quad (\text{D.2.9})$$



Dabei führen wir den Integrationsweg C wie in der nebenstehenden Abbildung. Es ist wichtig, dass die wesentlichen Singularitäten bei $\eta = z$ und $\eta = 0$ umlaufen werden, wobei wir die Verzweigungsschnitte wie eingezeichnet legen und Potenzen entsprechend dem Hauptwert des Logarithmus, also z.B. $\eta^{\alpha-\gamma} = \exp[(\alpha-\gamma)\ln \eta]$ mit $\ln \eta \in \mathbb{R}$ für $\eta > 0$ definieren. Man macht sich auch leicht klar, dass aufgrund der Wahl des Integrationsweges mit $\text{Re } \eta \rightarrow -\infty$ für die beiden Enden auch die Bedingung (D.2.6) erfüllt.

Wir zeigen als erstes, daß (D.2.9) in der Tat die konfluente hypergeometrische Funktion liefert. Dazu machen wir die Schleife um die Schnitte in der η -Ebene so groß, dass $|z/\eta| \leq \rho < 1$ für alle $\eta \in C$. Dann dürfen wir die Binomialreihe für $(\eta-z)^{-\alpha}$ im Integranden in (D.2.9) verwenden:

$$(\eta-z)^{-\alpha} = \eta^{-\alpha} \left(1 - \frac{z}{\eta}\right)^{-\alpha} = \eta^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \binom{-\alpha}{j} \left(\frac{-z}{\eta}\right)^j \quad (\text{D.2.10})$$

D. Die konfluente hypergeometrische Funktion

mit den Binomialkoeffizienten

$$\binom{-\alpha}{j} = \frac{(-\alpha)(-\alpha-1)\cdots(-\alpha-j+1)}{j!} = \frac{(-1)^j (\alpha)_j}{j!}. \quad (\text{D.2.11})$$

Setzt man (D.2.10) in (D.2.9) ein, und vertauscht Summation und Integration, folgt

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j (\alpha)_j}{j!} \int_C d\eta \exp \eta \eta^{-\alpha-j}. \quad (\text{D.2.12})$$

Im Integral können wir dabei den Integrationsweg auf den Weg C_1 zusammenziehen.

Wir bemerken nun, dass diese Art Integral über die Γ -Funktion ausgedrückt werden kann. Dazu betrachten wir

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} dy \exp y y^{-z} \quad (\text{D.2.13})$$

für $z \in (0, 1)$. Dann ergibt sich aus der oben spezifizierten Definition der Potenzfunktion y^{-z} über den Hauptwert der Logarithmusfunktion

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^0 dy \exp y |y|^{-z} [\exp(i\pi z) - \exp(-i\pi z)] \\ &= \frac{\sin(\pi z)}{\pi} \int_0^{\infty} dy \exp(-y) y^{-z} \\ &= \frac{\sin(\pi z)}{\pi} \Gamma(1-z) = \frac{1}{\Gamma(z)}. \end{aligned} \quad (\text{D.2.14})$$

Dabei haben wir bekannte Eigenschaften der Γ -Funktion verwendet [CH10]. Da $1/\Gamma(z)$ eine ganze Funktion ist, gilt

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} dy \exp y y^{-z} = \frac{1}{\Gamma(z)} \quad (\text{D.2.15})$$

für alle $z \in \mathbb{C}$. Verwenden wir diese Formel in (D.2.12), folgt

$$w(z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_j}{j! \Gamma(\gamma+j)} z^j = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_j}{j! \Gamma(\gamma)(\gamma)_j} z^j. \quad (\text{D.2.16})$$

Der Vergleich mit (D.1.6) liefert, dass in der Tat

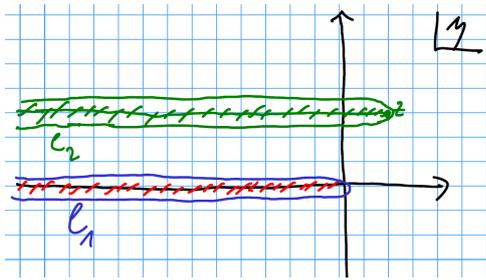
$$F(\alpha, \gamma, z) = \Gamma(\gamma) w(z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_j}{(\gamma)_j j!} z^j \quad (\text{D.2.17})$$

ist, d.h. es gilt mit (D.2.9) die Integraldarstellung

$$F(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(z)}{2\pi i} \int_C d\eta (\eta-z)^{-\alpha} \eta^{\alpha-\gamma} \exp \eta. \quad (\text{D.2.18})$$

D.3 Asymptotik für $|z| \rightarrow \infty$

D.3. Asymptotik für $|z| \rightarrow \infty$



Offensichtlich können wir nun die obige Kontur C im Integral (D.2.18) in die beiden Konturen C_1 und C_2 in der nebenstehenden Abbildung deformieren. Definieren wir also die beiden Funktionen

$$\Phi_k(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_k} d\eta \exp \eta \eta^{\alpha-\gamma} (\eta-z)^{-\alpha}, \quad k \in \{1, 2\}, \quad (\text{D.3.1})$$

so gilt

$$F(\alpha, \gamma, z) = \Phi_1(\alpha, \gamma, z) + \Phi_2(\alpha, \gamma, z). \quad (\text{D.3.2})$$

Substituieren wir $\eta' = \eta - z$ im Integral für Φ_2 , wird

$$\begin{aligned} \Phi_2(\alpha, \gamma, z) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_1} d\eta' \exp(\eta' + z) (\eta' + z)^{\alpha-\gamma} \eta'^{-\alpha} \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \exp z \int_{C_1} d\eta \exp \eta [\eta - (-z)]^{\alpha-\gamma} \eta^{-\alpha} \\ &= \Phi_1(\gamma - \alpha, \gamma, -z) \exp z. \end{aligned} \quad (\text{D.3.3})$$

Wir wollen nun eine **asymptotische Entwicklung** für Φ_2 für $|z| \rightarrow \infty$ bestimmen. Dazu betrachten wir das Restglied r_N der allgemeinen Binomialreihe, das durch

$$(1-u)^{-\alpha} \sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} (-u)^n + r_N(u) \quad (\text{D.3.4})$$

definiert ist. Wegen

$$r_N(u)(1-u)^\alpha = 1 - (1-u)^\alpha \sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} (-u)^n \quad (\text{D.3.5})$$

folgt nach einiger Rechnung

$$\frac{d}{du} [r_N(u)(1-u)^\alpha] = (1-u)^{\alpha-1} \frac{(\alpha)_{N+1}}{N!} u^N. \quad (\text{D.3.6})$$

Damit folgt

$$r_N(u) = \frac{(\alpha)_{N+1}}{N!} (1-u)^{-\alpha} \int_0^u dv v^N (1-v)^{\alpha-1}. \quad (\text{D.3.7})$$

Dabei verstehen wir das Integral entlang einer komplexen Kontur in der v -Ebene so geführt, dass die Singularität bei $v = 1$ umgangen wird.

Wegen der (D.3.1) können wir mit dieser Definition von r_N

$$\Phi_1(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_1} d\eta \exp \eta \eta^{\alpha-\gamma} (-z)^{-\alpha} \left[\sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} \left(-\frac{\eta}{z}\right)^n + r_N\left(\frac{\eta}{z}\right) \right] \quad (\text{D.3.8})$$

schreiben.

D. Die konfluente hypergeometrische Funktion

Für das Integral der Summe können wir wieder die Kummersche Darstellung der Γ -Funktion (D.2.15) verwenden. Dies liefert

$$\Phi_1(\alpha, \gamma, z) = \Gamma(\gamma)(-z)^{-\alpha} \left[\sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} \frac{(-z)^{-n}}{\Gamma(\gamma - \alpha - n)} + R_N(\alpha, \gamma, z) \right] \quad (\text{D.3.9})$$

mit

$$R_N(\alpha, \gamma, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} d\eta \exp \eta \eta^{\alpha-\gamma} r_N \left(\frac{\eta}{z} \right) \frac{(\alpha)_{N+1}}{N!}. \quad (\text{D.3.10})$$

Um zu zeigen, dass die Summe in (D.3.9) die asymptotische Entwicklung von Φ_1 für $|z| \rightarrow \infty$ ist, müssen wir nun noch zeigen, dass

$$|R_N(\alpha, \gamma, z)| = \mathcal{O}(|z|^{-(N+1)}) \quad (\text{D.3.11})$$

ist. Dazu betrachten wir zunächst $r_N(\eta/z)$. Mit (D.3.7) folgt

$$\left| r_N \left(\frac{\eta}{z} \right) \right| = \frac{|(\alpha)_{N+1}|}{N!} \left| \left(1 - \frac{\eta}{z} \right)^{-\alpha} \right| \left| \int_0^{\eta/z} dv v^N (1-v)^{\alpha-1} \right| \quad (\text{D.3.12})$$

Um dies abzuschätzen, beachten wir, dass

$$r_N(u) \underset{u \rightarrow 0}{\cong} (-1)^N \binom{-\alpha}{N+1} u^{N+1} \quad (\text{D.3.13})$$

gilt, so dass wir im Integral (D.3.10) die Kontur C_1 zu $\eta \pm i0^+$ mit $\eta \in \mathbb{R}_{\leq 0}$ deformieren können, wenn nur N so groß ist, dass $\text{Re}(\alpha - \gamma + N + 1) > 0$ ist. Daher schätzen wir zur Verwendung in (D.3.12) nun $1 - \eta/z = 1 + |\eta|/z$ ab. Dazu setzen wir $|\eta|/z = |\eta|\rho \exp(-i\varphi)$ und nehmen an, dass $\varphi = \arg z \in (-\pi + \beta, \pi - \beta)$ mit $0 < \beta < \pi$ ist. Nun ist offenbar

$$\left| 1 + \frac{|\eta|}{z} \right|^2 = [1 + |\eta|\rho \exp(-i\varphi)][1 + |\eta|\rho \exp(i\varphi)] = 1 + 2t\rho \cos \varphi + |\eta|^2 \rho^2. \quad (\text{D.3.14})$$

Damit gilt einerseits für $|\varphi| \leq \pi/2$, also $0 \leq \cos \varphi \leq 1$ und $\rho < 1$, also $|z| > 1$

$$\left| 1 + \frac{|\eta|}{z} \right| \leq 1 + \left| \frac{\eta}{z} \right|. \quad (\text{D.3.15})$$

Weiter ist

$$\left| 1 + \frac{|\eta|}{z} \right|^2 - \sin^2 \varphi = (|\eta|\rho + \cos \varphi)^2 \geq 0 \quad (\text{D.3.16})$$

und damit

$$\left| 1 + \frac{|\eta|}{z} \right| \geq |\sin \beta|. \quad (\text{D.3.17})$$

Folglich ist

$$\left| 1 + \frac{|\eta|}{z} \right|^2 \leq \left| \frac{\eta}{z} \right| \frac{1}{|\sin \beta|}. \quad (\text{D.3.18})$$

D.3. Asymptotik für $|z| \rightarrow \infty$

Dies verwenden wir nun zunächst in (D.3.7) um $r_N(\eta/z)$ abzuschätzen.

$$\begin{aligned} |r_N(\tau/z)| &\leq \text{const}(1 + |\eta/z|)^{|\alpha|} \int_0^{|\eta/z|} dv v^N |1 + v|^{|\alpha|} \\ &\leq \text{const} \left(1 + \left| \frac{\eta}{z} \right| \right)^{2|\alpha|} \left| \frac{\eta}{z} \right|^{N+1}. \end{aligned} \quad (\text{D.3.19})$$

Setzt man dies in das Integral (D.3.10) für R_N ein und deformiert den Integrationsweg C_1 auf die Integration entlang der Ufer des Verzweigungsschnitts $\eta \pm i0^+$, $\eta \in \mathbb{R}_{\leq 0}$ folgt schließlich (D.3.11).

Damit folgt die asymptotische Entwicklung für die konfluente hypergeometrische Funktion aus (D.3.9) und (D.3.2,D.3.3):

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma, z) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} \left[\sum_{n=0}^{N_1} \frac{(\alpha)_n (\alpha - \gamma + 1)_n}{n!} (-z)^{-n} + \mathcal{O}(|z|^{-N_1-1}) \right] \\ &\quad + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} \exp z z^{\alpha-\gamma} \left[\sum_{n=0}^{N_2} \frac{(\gamma - \alpha)_n (1 - \alpha)_n}{n!} z^{-n} + \mathcal{O}(|z|^{-N_2-1}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.3.20})$$

Meist benötigt man den Fall $N_1 = N_2 = 1$, d.h.

$$F(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} [1 + \mathcal{O}(1/|z|)] + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} \exp z z^{\alpha-\gamma} [1 + \mathcal{O}(1/|z|)]. \quad (\text{D.3.21})$$

D. Die konfluente hypergeometrische Funktion

Anhang E

Einige Integrale mit Bose- und Fermiverteilungen

In diesem Abschnitt wollen wir einige häufig gebrauchte Integrale im Zusammenhang mit Bose- und Fermiverteilungen berechnen sowie Formeln für die Summation über fermionische und bosonische Matsubara-Frequenzen des Imaginärzeitformalismus der thermischen Feldtheorie bereitstellen.

E.1 Integrale zum idealen Gas

Wir beginnen mit der Berechnung des für die Behandlung des idealen Fermigas benötigten Integrals (8.5.56).

Wir betrachten dazu allgemeiner das fermionische Integral

$$I_F(n) = \int_0^\infty dx x^n \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2}. \quad (\text{E.1.1})$$

Wir führen es zunächst in eine Reihe über, indem wir den Bruch mit $\exp(-2x)$ erweitern

$$I_F(n) = \int_0^\infty dx x^n \frac{\exp(-x)}{[1 + \exp(-x)]^2}. \quad (\text{E.1.2})$$

Um dies in eine Reihe zu entwickeln, betrachten wir zunächst die geometrische Reihe

$$g(q) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k q^k = \frac{1}{q+1}. \quad (\text{E.1.3})$$

Durch Differentiation ergibt sich daraus

$$g'(q) = -\frac{1}{(1+q)^2} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k k q^{k-1} = -\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) q^k. \quad (\text{E.1.4})$$

Verwenden wir diese Formel in (E.1.2) mit $q = \exp(-x)$, erhalten wir

$$I_F(n) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) \int_0^\infty x^n \exp[-(k+1)x]. \quad (\text{E.1.5})$$

Das Integral unter der Summe läßt sich bequem mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$G(z) = \int_0^\infty dx \exp(-xz) = \frac{1}{z} \quad (\text{E.1.6})$$

berechnen. Es folgt durch Ableiten unter dem Integral

$$\int_0^{\infty} x^n \exp(-zx) = (-1)^n G^{(n)}(z) = \frac{n!}{z^{n+1}}. \quad (\text{E.1.7})$$

Dies in (E.1.5) mit $z = k + 1$ angewandt ergibt

$$I_F(n) = n! \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} \quad \text{für } n \in \{2, 3, \dots\}. \quad (\text{E.1.8})$$

Die Reihe selbst läßt sich mit Hilfe von Fourier-Reihen lösen. Dazu betrachten wir die Fourierreihe für die Funktion $f(x) = x^n$ im Intervall $x \in [-\pi, \pi]$. Es gilt

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_k \exp(ikx) \quad \text{mit} \quad \tilde{f}_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \exp(-ikx). \quad (\text{E.1.9})$$

Um die Koeffizienten zu berechnen, verwenden wir wieder eine erzeugende Funktion:

$$G(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \exp(-izx) = \frac{\sin(\pi z)}{\pi z}. \quad (\text{E.1.10})$$

Daraus folgt

$$G^{(n)}(z) = \frac{(-i)^n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx x^n \exp(-izx). \quad (\text{E.1.11})$$

Wir erhalten die Koeffizienten in (E.1.9) durch

$$\tilde{f}_k = i^n G^{(n)}(k) \quad \text{für } k \neq 0. \quad (\text{E.1.12})$$

Für $k = 0$ folgt

$$\tilde{f}_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx x^n = \begin{cases} 0 & \text{falls } n \text{ ungerade,} \\ \frac{\pi^n}{n+1} & \text{falls } n \text{ gerade.} \end{cases} \quad (\text{E.1.13})$$

Es ist klar, daß für gerade (ungerade) n durch Zusammenfassen der Reihenglieder mit entgegengesetztem Vorzeichen reine Cosinus- bzw. Sinusreihen entstehen. Wir geben nun einige dieser Reihenentwicklungen an, die im *offenen* Intervall $(-\pi, \pi)$ gelten.

$$x = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin(kx), \quad (\text{E.1.14})$$

$$x^2 = \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \cos(kx), \quad (\text{E.1.15})$$

$$x^3 = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \left(\pi^2 - \frac{6}{k^2} \right) \sin(kx), \quad (\text{E.1.16})$$

$$x^4 = \frac{\pi^4}{5} + 8 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \left(\pi^2 - \frac{6}{k^2} \right) \cos(kx). \quad (\text{E.1.17})$$

E.1. Integrale zum idealen Gas

Nun können wir die Reihen in (E.1.8) auswerten. Um etwa (8.5.56) zu beweisen, müssen wir gemäß (E.1.8) in (E.1.15) $x = 0$ setzen. Das liefert

$$0 = \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^2} = \frac{\pi^2}{12}. \quad (\text{E.1.18})$$

Damit haben wir $I(2) = \pi^2/6$. In (8.5.56) integrieren wir aber über die ganze reelle Achse, und da der Integrand in dem Fall symmetrisch ist, verdoppelt dies das Resultat.

E. Einige Integrale mit Bose- und Fermiverteilungen

Literaturverzeichnis

- [A⁺08] C. Amsler, et al., Review of Particle Physics, Phys. Lett. B **667**, 1 (2008).
URL <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2008.07.018>
- [Bal98] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong (1998).
- [Bar64] V. Bargmann, Note on Wigner's Theorem on Symmetry Operations, Journ. Math. Phys. **5**, 862 (1964).
URL <https://doi.org/10.1063/1.1704188>
- [Boh35] N. Bohr, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, Physical Review **48**, 696 (1935).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.48.696>
- [Cal85] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2. Aufl., John Wiley&Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore (1985).
- [CH10] W. Cassing, H. v. Hees, *Mathematische Methoden für Physiker*, Universität Gießen (2010).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/publ/maphy.pdf>
- [EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>
- [Fey48] R. P. Feynman, Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.20.367>
- [FH03] B. Friedrich, D. Herschbach, Stern and Gerlach: How a Bad Cigar Helped to Reorient Atomic Physics, Physics Today **12/2003**, 53 (2003).
URL https://scitation.aip.org/journals/doc/PHTOAD-ft/vol_56/iss_12/53_1.shtml
- [Fic79] E. Fick, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*, 4. Aufl., Aula-Verlag, Wiesbaden (1979).
- [FK06] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 3, 2. Aufl., Springer Verlag (2006).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9000-9>
- [FK07] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 1, 6. Aufl., Springer Verlag (2007).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9207-2>

- [FK08] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 2, 3. Aufl., Springer Verlag (2008).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9222-5>
- [GP90] A. Galindo, P. Pascual, *Quantum Mechanics*, Springer Verlag, Heidelberg (1990), 2 Vols.
- [Hee98] H. van Hees, *Prinzipien der Quantentheorie* (1998).
URL <https://theorie.physik.uni-giessen.de/~hees/publ/quant.pdf>
- [Hee08a] H. van Hees, *Klassische Mechanik* (2008).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/faq-pdf/mech.pdf>
- [Hee08b] H. van Hees, *Statistische Physik* (2008).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/faq-pdf/stat.pdf>
- [Hob87] A. Hobson, *Concepts in Statistical Mechanics*, 2. Aufl., Gordon and Breach Science Publishers (1987).
- [Jay57a] E. Jaynes, Information Theory and Statistical Mechanics, *Phys. Rev.* **106**, 620 (1957).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.106.620>
- [Jay57b] E. Jaynes, Information Theory and Statistical Mechanics. II, *Phys. Rev.* **108**, 171 (1957).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.171>
- [Kat67] A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics*, W. H. Freeman and Company, San Francisco and London (1967).
- [KW71] D. M. Kaplan, F. Y. Wu, On the Eigenvalues of Orbital Angular Momentum, *Chin. Jour. Phys.* **9**, 31 (1971).
URL <https://psroc.phys.ntu.edu.tw/cjp/issues.php?vol=9&num=1>
- [LL77] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1977).
- [LL87] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Bd. 5, Statistische Physik*, 8. Aufl., Akademie-Verlag, Berlin (1987).
- [LMB04] M. LeBellac, F. Mortessagne, G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne, Madrid, Cape Town (2004).
- [LS50] B. A. Lippmann, J. Schwinger, Variational Principles for Scattering Processes. I, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950).
URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev7.9.469>
- [Mes99] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications, New York (1999).
- [N⁺10] K. Nakamura, et al., Review of particle physics, *J. Phys. G* **37**, 075021 (2010).
URL <https://doi.org/10.1088/0954-3899/37/7A/075021>
- [Pau26] W. Pauli, Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik, *Z. f. Physik A* **36**, 336 (1926).
- [PBCBGC05] G. Potel, F. Barranco, S. Cruz-Barrios, J. Gómez-Camacho, Quantum mechanical description of Stern-Gerlach experiments, *Phys. Rev. A* **71** (2005).
URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.052106>

- [Rei65] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw Hill Book Company, New York (1965).
- [RT67] L. S. Rodberg, R. M. Thaler, *Introduction to the quantum theory of scattering*, Academic Press, London (1967).
- [Smi61] W. I. Smirnow, *Lehrgang der höheren Mathematik*, 3. Aufl., VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1961).
- [Som78] A. Sommerfeld, *Vorlesungen über Theoretische Physik V, Thermodynamik und Statistik*, Verlag Harri Deutsch (1978).
- [Str13] N. Straumann, *Quantenmechanik*, 2. Aufl., Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg (2013).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-642-32175-7>
- [WW08] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, 2. Aufl., Merchant Books (2008).