

Anmerkungen zur Quantenmechanik

Norbert Dragon

Der Artikel hat zur Zeit noch nicht seine endgültige Form, die jeweils neueste Fassung befindet sich im Internet bei <http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon>. Für Hinweise auf Unverständliches oder Falsches, insbesondere auch auf Tippfehler, bin ich dankbar.

Dieser Text wurde mit dem Textsatzsystem $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, genauer mit $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$ und der KOMA-Script-Klasse scrbook, am 22. Juni 2005 erstellt.

Überblick

Von Feynman stammt die Einschätzung, man müsse gerechterweise zugeben, daß niemand Quantenmechanik verstehe. Die folgende Darstellung ist als Widerlegung dieser Koketterie gedacht: von der Grundgleichung für die Wahrscheinlichkeit von Meßergebnissen ausgehend wird die Quantenmechanik entwickelt, ohne daß ein größeres Rätsel bleibt als die Frage, warum diese Grundgleichung gilt. Sie wird zwar als Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik bezeichnet, gehört aber zu jeder Auffassung von Quantenmechanik, egal ob man sie so oder anders deutet.

Daß, wie die Grundgleichung besagt, die Wahrscheinlichkeit für ein Meßergebnis quadratisch von der Amplitude abhängt, die den Zustand charakterisiert und die sich mit der Zeit ändert, ist nicht ohne Beispiel in der Theoretischen Physik: ebenso hängen Energiedichten und -ströme in der Elektrodynamik quadratisch von Feldern ab. Unbegreiflich, das heißt, nicht durch Einfacheres erklärbar, bleibt an der Quantenmechanik nur, warum bei kleiner werdenden Energiedichten die Auswirkungen im Einzelfall nicht kleiner sondern seltener werden, warum also, wie beim photoelektrischen Effekt, die Auswirkungen sich wie Teilchen verhalten.

Darüber hinaus bleibt mir kein grundsätzliches Unbegreifen. Die Bellsche Ungleichung zeigt, daß die Ergebnisse von Messungen, die wie Spinnmessungen in verschiedene Richtungen nicht gemeinsam erfolgen können, nicht als reale Eigenschaften einzelner Teilchen vor der Messung festliegen. Unsere Untersuchung des Meßprozesses zeigt, daß Zustandsreduktion bei Kenntnis eines Ergebnisses der Übergang zu bedingten Amplituden ist, nicht anders als Wahrscheinlichkeiten bei Kenntnis von Ergebnissen durch bedingte Wahrscheinlichkeiten ersetzt werden.

Ebenso wird geklärt, daß die Anteile eines Zustandes, die zu verschiedenen Meßergebnissen geführt haben, nicht kohärent sind: wenn am Doppelspalt unterscheidbar ist, durch welchen der beiden Spalte das Teilchen geflogen ist, dann interferieren die Teilstrahlen nicht. Für die Dekohärenz ist nicht wichtig, ob ein Beobachter zusieht, sondern ob er zusehen kann.

Der Text ist als Ergänzung, Wiederholung und Kommentar gedacht, nachdem freie Teilchen, Potentialtopf, Potentialbarriere, Wasserstoffatom und Streuung verstanden sind. Unter den zahllosen Darstellungen empfehle ich als verlässliche, wenngleich sehr anspruchsvolle Darstellung [1].

Inhaltsverzeichnis

1	Wahrscheinlichkeit von Meßwerten	1
1.1	Orthonormalbasis	2
1.2	Bracket-Schreibweise	3
1.3	Matrixalgebra	3
1.4	Projektoren, Zerlegung der Eins	4
1.5	Endliche Norm	5
1.6	Strahlen im Hilbertraum	6
1.7	Dichtematrix	7
1.8	Mischen von Gemischen	9
2	Operatoren	11
2.1	Erwartungswerte	11
2.2	Unbeschränktes Spektrum	12
2.3	Unschärfe	13
2.4	Kommutator	15
2.5	Erzeuger-Vernichter-Algebra	16
2.6	Drehimpulsalgebra	18
2.7	Messung eines Spin-1/2-Gemisches	20
2.8	Störungstheorie	23
3	kontinuierliches Spektrum	27
3.1	Wellenfunktion	27
3.2	Transformationen des Ortes	28
3.3	Translationen und Impuls	31
3.4	Drehungen und Bahndrehimpuls	32
3.5	Kontinuierliche Basis	33
3.6	Mehrteilchenzustände	36
4	Zeitentwicklung, Grundzustandsenergie	39
4.1	Schrödingergleichung	39
4.2	Schrödingerbild, Heisenbergbild	42
4.3	Grundzustandsenergie	44
4.4	Kanonische Quantisierung, Normalordnung	46
4.5	Zeitentwicklung im Zweizustandssystem	48
4.6	Energiebänder	49

5	Zusammengesetzte Systeme	55
5.1	Produktraum	55
5.2	Addition von Drehimpulsen	56
5.3	Unabhängig zusammengesetzte Gemische	58
5.4	Quantenkopierer	59
5.5	Bellsche Ungleichung	59
5.6	Meßprozeß und Zustandsreduktion	64
6	Grundlagen der Thermodynamik	67
6.1	Entropie	67
6.2	Gleichgewicht	71
7	Zerfall eines instabilen Teilchens	75
7.1	Lorentzresonanz	75
7.2	Abweichungen vom exponentiellen Zerfall	76
7.3	Goldene Regel	78
7.4	Zerfall ins Kontinuum	80
7.5	Allgemeingültigkeit	84
7.6	Zerfall bewegter Teilchen	85
8	Das Wigner-Theorem	89
8.1	Wahrscheinlichkeitstreue und unitäre Abbildungen	89
8.2	Nichtlineare Schrödingergleichung	94
9	Relativistische Quantenmechanik	95
9.1	Poincaré- und Lorentztransformationen	95
9.2	Basiszustände und Wellenfunktionen	97
9.3	Unitäre Darstellung der Stabilitätsgruppe	103
9.4	Induzierte Darstellung	104
9.5	Zeitumkehr und Raumspiegelung	108
A	$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = \text{PV} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$	113
B	$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x)$	114
C	Bemerkung zur Fouriertransformation	115
D	Ableitung der Determinante	116
E	Der Propagator	117
	Literaturverzeichnis	119

1 Wahrscheinlichkeit von Meßwerten

Physiker beobachten, messen und analysieren Eigenschaften von Systemen, die so präpariert sind, daß sie genügend einfach sind.

Wir wollen uns konkreter vorstellen, daß es sich bei dem zu messenden System, dem Zustand, um jeweils ein Teilchen in einem Strahl handelt und daß der Meßapparat wie ein Stern-Gerlach-Apparat diesen Strahl in mehrere Teilstrahlen aufspaltet. Bei den Meßwerten $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots$ können wir an die Ablenkwinkel denken.

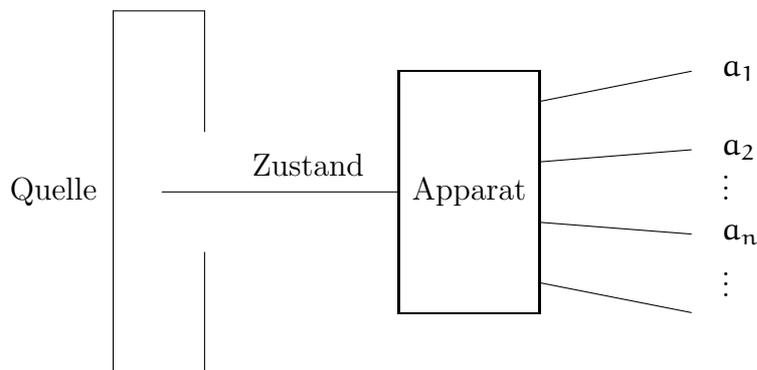


Abbildung 1.1: prinzipielle Meßanordnung

Die Quantenmechanik berücksichtigt folgende experimentelle Befunde

1. Für jeden Meßwert α_i eines idealen Meßapparats A kann ein Zustand Λ_i präpariert werden, bei dem mit Sicherheit α_i gemessen wird.
2. Auch wenn das zu messende System, der Zustand Ψ , ideal präpariert worden ist, liegt nicht für alle Meßapparate A fest, welcher seiner Meßwerte $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots$ auftritt.

und unterstellt die folgende **Grundgleichung**:

Wenn der Zustand Ψ mit dem Meßapparat A vermessen wird, so ist

$$w(i, A, \Psi) = |\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2 \quad (1.1)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der i -te Meßwert α_i angezeigt wird.

Dabei nehmen wir einfachheitshalber an, daß der Meßapparat A so fein unterscheidet, daß zu jedem Meßwert α_i nur ein Zustand Λ_i gehört. Dieser Zustand heißt Eigenzustand von A zum Eigenwert α_i .

Gehört zu einem Meßwert nur ein Zustand, so heißt der Meßwert „nicht entartet“.

1.1 Orthonormalbasis

Die Grundgleichung (1.1) für die Wahrscheinlichkeit ist folgendermaßen zu lesen: zu Zuständen wie Λ_i und Ψ gehören Vektoren in einem Hilbertraum \mathcal{H} . Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum, das heißt mit irgend zwei Vektoren Λ und Ψ aus dem Hilbertraum ist auch die Summe $\Lambda + \Psi$ und jedes komplexe Vielfache $c\Psi = \Psi c$, $c \in \mathbb{C}$, Vektor im Hilbertraum. Für alle Paare von Vektoren ist ein Skalarprodukt $\langle \Lambda | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ mit folgenden Eigenschaften definiert

$$\langle \Lambda | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \Lambda \rangle, \quad (1.2)$$

$$\langle \Lambda | \Psi_1 c_1 + \Psi_2 c_2 \rangle = \langle \Lambda | \Psi_1 \rangle c_1 + \langle \Lambda | \Psi_2 \rangle c_2 \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}. \quad (1.3)$$

Das Skalarprodukt ist also linear im zweiten Argument und wegen (1.2) antilinear im ersten Argument

$$\langle c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 | \Lambda \rangle = c_1^* \langle \Psi_1 | \Lambda \rangle + c_2^* \langle \Psi_2 | \Lambda \rangle. \quad (1.4)$$

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich ist positiv definit und wird verwendet, um die Länge von Vektoren zu definieren

$$0 \leq \langle \Psi | \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 < \infty, \quad \|\Psi\| = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0. \quad (1.5)$$

Die Wahrscheinlichkeit $w(i, \mathbf{A}, \Psi)$, mit der ein Meßapparat \mathbf{A} den i -ten Meßwert α_i anzeigt, wenn der Zustand Ψ vermessen wird, ist gemäß (1.1) das Betragsquadrat des Skalarproduktes $\langle \Lambda_i | \Psi \rangle$ des zu messenden Zustandes Ψ mit dem zum Meßwert α_i gehörenden Eigenzustand Λ_i . Man nennt das Skalarprodukt $\langle \Lambda_i | \Psi \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den i -ten Meßwert α_i .

Aus (1.1) folgt, daß die Zustände Λ_i normiert sind und zueinander senkrecht stehen.

$$\langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle = \delta^i_j = \begin{cases} 0 & \text{falls } i \neq j \\ 1 & \text{falls } i = j \end{cases} \quad (1.6)$$

Denn falls der Eigenzustand Λ_j vermessen wird, tritt mit Sicherheit der Meßwert α_j auf, $w(i, \mathbf{A}, \Lambda_j) = |\langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle|^2 = \delta^i_j$. Aus den Betragsquadraten folgen die Skalarprodukte (1.6) der Λ_j , weil nichtverschwindende Längenquadrate positiv sind.

Quantenmechanik macht über (1.1) hinaus die Annahme, daß die Eigenzustände Λ_i eine Basis bilden. Daher läßt sich jeder Zustand Ψ als komplexe Linearkombination der Λ_i schreiben

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \psi_j, \quad \psi_j \in \mathbb{C}. \quad (1.7)$$

Die Komponenten ψ_i erhält man wegen (1.6) als Skalarprodukt mit Λ_i

$$\psi_i = \langle \Lambda_i | \Psi \rangle. \quad (1.8)$$

Die Komponenten von Ψ in der Basis der Eigenzustände des Meßapparates sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden für die zugehörigen Meßwerte.

Ist der Zustand noch unbekannt, so können die Beträge der Komponenten, die zur Basis der Eigenzustände eines Meßapparates gehören, der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte entnommen werden. Die Phasen dieser Komponenten müssen aus anderen Messungen bestimmt werden. So wie in klassischer Mechanik die anfängliche Lage und die anfängliche Geschwindigkeit eines Massepunktes gemessen werden, so erschließt man in der Quantenmechanik durch Messen, welcher Zustand vorliegt.

1.2 Bracket-Schreibweise

Setzen wir die Komponenten in (1.7) ein, so erhalten wir

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle . \quad (1.9)$$

Das Skalarprodukt mit irgendeinem Vektor Φ führt zu folgendem Formelbild

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \left(\sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \right) \rangle = \sum_j \langle \Phi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle . \quad (1.10)$$

Da diese Gleichung für alle Φ gilt, läßt man das Symbol „ $\langle \Phi$ “ weg und erhält die einprägsame Gleichung

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \psi_j . \quad (1.11)$$

Zerlegt man Ψ im Skalarprodukt $\langle \Psi | \Phi \rangle$, so erhält man wegen (1.2) analog

$$\langle \Psi | = \sum_j \langle \Psi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | = \sum_j \psi_j^* \langle \Lambda_j | . \quad (1.12)$$

Dirac hat den Sprachgebrauch Ket-Vektor für den Anteil $|\Psi\rangle$ im Skalarprodukt eingeführt und für den Anteil $\langle \Phi |$ den Namen Bra-Vektor. Das Skalarprodukt ist eine Klammer (englisch bracket) $\langle \Phi | \Psi \rangle$, die sich aus Bra- und Ket-Vektoren zusammensetzt. Die zugegebenermaßen triviale, bijektive Abbildung¹ von Vektoren auf Ket-Vektoren $\Psi \mapsto |\Psi\rangle$ ist linear, diejenige auf Bra-Vektoren $\Psi \mapsto \langle \Psi |$ antilinear:

$$\langle c\Psi | = c^* \langle \Psi | . \quad (1.13)$$

Die Abbildung von Bra- auf Ket-Vektoren ist eine Konjugation $|\Psi\rangle^* = \langle \Psi |$.

1.3 Matrixalgebra

Gemäß (1.10) läßt sich das Skalarprodukt einfach aus den Komponenten berechnen.

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_j \phi_j^* \psi_j \quad (1.14)$$

¹Sie ähnelt einer militärischen Beförderung, bei der Streifen und Winkel hinzugefügt werden.

Ordnet man die Komponenten eines Ket-Vektors als Spalte an und die Komponenten des Bra-Vektors als Zeile – sie sind wegen (1.12) die komplex konjugierten Komponenten des zugehörigen Ket-Vektors – dann erhält man das Skalarprodukt durch Matrixmultiplikation der Zeile mit der Spalte.

Wendet man einen Operator \mathbf{A} auf einen Vektor Ψ an, so erhält man den Spaltenvektor der Komponenten von $\mathbf{A}\Psi$ durch Matrixmultiplikation der Matrix, die in der n -ten Zeile und m -ten Spalte das Matrixelement

$$A_{nm} = \langle \Lambda_n | \mathbf{A} \Lambda_m \rangle \quad (1.15)$$

enthält, mit dem Spaltenvektor der Komponenten von Ψ ,

$$(\mathbf{A}\Psi)_n = \langle \Lambda_n | \mathbf{A}\Psi \rangle = \sum_m \langle \Lambda_n | \mathbf{A} \Lambda_m \rangle \langle \Lambda_m | \Psi \rangle = \sum_m A_{nm} \psi_m . \quad (1.16)$$

Der hermitesch adjungierte Operator \mathbf{A}^\dagger eines linearen Operators \mathbf{A} ist durch

$$\langle \Lambda | \mathbf{A}\Psi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \Lambda | \Psi \rangle \quad \forall \Lambda, \Psi \quad (1.17)$$

definiert. Beim hermitesch Adjungieren eines Produkts von Operatoren wird die Reihenfolge gespiegelt

$$\langle \Lambda | \mathbf{A}\mathbf{B}\Psi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \Lambda | \mathbf{B}\Psi \rangle = \langle \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \Lambda | \Psi \rangle, \quad (\mathbf{A}\mathbf{B})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger, \quad (1.18)$$

Zahlen werden komplex konjugiert $c^\dagger = c^*$. Hermitesch adjungierte (transponierte und komplex konjugierte) Matrizen entsprechen hermitesch adjungierten Operatoren.

$$(\mathbf{A}^\dagger)_{nm} = \langle \Lambda_n | \mathbf{A}^\dagger \Lambda_m \rangle = \langle \mathbf{A} \Lambda_n | \Lambda_m \rangle = \langle \Lambda_m | \mathbf{A} \Lambda_n \rangle^* = A_{mn}^* \quad (1.19)$$

Mit den Matrixelementen A_{nm} und den Basisvektoren schreiben sich in Bracket-Schreibweise die Operatoren \mathbf{A} als

$$\mathbf{A} = \sum_{nm} |\Lambda_n\rangle A_{nm} \langle \Lambda_m|, \quad (1.20)$$

oder in konventionellerer Schreibweise als

$$\mathbf{A} : \Psi \mapsto \sum_{nm} \Lambda_n A_{nm} \langle \Lambda_m | \Psi \rangle . \quad (1.21)$$

1.4 Projektoren, Zerlegung der Eins

Gemäß (1.11) wird jeder Zustand $|\Psi\rangle$ von $\sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j|$ auf sich abgebildet, die Summe ist also der $\mathbb{1}$ -Operator

$$\mathbb{1} = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j|. \quad (1.22)$$

Die einzelnen Anteile

$$P_j = |\Lambda_j\rangle\langle\Lambda_j| \quad (1.23)$$

sind Projektoren

$$P_j^2 = P_j \quad (1.24)$$

auf zueinander orthogonale Unterräume

$$P_i P_j = 0 \text{ falls } i \neq j. \quad (1.25)$$

Die Darstellung (1.22) des 1-Operators als Summe von Projektionsoperatoren nennt man eine Zerlegung der Eins.

Mit Zerlegungen der Eins und der Bracket-Schreibweise ist die beim Basiswechsel zu bewältigende Algebra sehr übersichtlich: Seien $|\Gamma_i\rangle$ und $|\Lambda_j\rangle$ zwei Orthonormalbasen. Der Zusammenhang zwischen den Komponenten in den verschiedenen Basen ergibt sich, wenn man eine Zerlegung der Eins einschiebt

$$\langle\Gamma_i|\Psi\rangle = \sum_j \langle\Gamma_i|\Lambda_j\rangle\langle\Lambda_j|\Psi\rangle. \quad (1.26)$$

1.5 Endliche Norm

Der Hilbertraum der Zustände ist oft (abhängig von den präparierten und zu vermessenden Systemen) nicht endlichdimensional und die Summen über Basen müssen auf ihre Konvergenz geprüft werden. Wir unterschlagen in unserer Diskussion der Quantenmechanik fast alle damit verbundenen Komplikationen. Es sei hier nur bemerkt, daß Vektoren im Hilbertraum ein endliches Skalarprodukt haben

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_j \psi_j^* \psi_j < \infty \quad (1.27)$$

und daß daher die Komponenten ψ_j quadratsummierbar sein müssen. Umgedreht definiert bei gegebener Orthonormalbasis jede quadratsummierbare Folge ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, einen Vektor im Hilbertraum.

Für physikalische Zustände gilt einschränkender, daß die Betragsquadrate der Komponenten die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der zugehörigen Meßwerte sind. Wahrscheinlichkeiten erfüllen Summenregeln: wenn man die Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen, sich gegenseitig ausschließende Fälle addiert, erhält man die Gesamtwahrscheinlichkeit 1.

$$1 = \sum_i w(i, A, \Psi) = \sum_i |\psi_i|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle \quad (1.28)$$

Jeder zu einem physikalischen Zustand gehörige Vektor im Hilbertraum ist normiert.

Es gehört nicht, wie man manchmal in Umkehrung des Sachverhalts hört, zu jedem Vektor im Hilbertraum ein physikalischer Zustand. Insbesondere gehört zum Vektor 0 im Hilbertraum kein physikalischer Zustand, auch wenn der Grundzustand oft als $|0\rangle$ bezeichnet und mit dem Vektor 0 verwechselt wird.

1.6 Strahlen im Hilbertraum

Gemäß (1.6) und (1.28) gehören Zustände zu Vektoren auf der Einheitskugel des Hilbertraums. Aus der Grundgleichung (1.1) für Wahrscheinlichkeiten von Meßwerten folgt weiterhin, daß ein Einheitsvektor Ψ und der mit einer Phase multiplizierte Vektor $e^{i\alpha}\Psi$ zu demselben physikalischen Zustand gehören, denn für alle Meßapparate \mathbf{A} stimmen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Meßwerte überein

$$w(i, \mathbf{A}, \Psi) = w(i, \mathbf{A}, e^{i\alpha}\Psi) \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} . \quad (1.29)$$

Demnach gehören physikalische Zustände zu Äquivalenzklassen von Einheitsvektoren mit der Äquivalenzrelation

$$\Psi \sim \Psi' \Leftrightarrow \exists \alpha \in \mathbb{R} : \Psi = e^{i\alpha}\Psi' . \quad (1.30)$$

Eleganter als der Begriff „Einheitsvektor bis auf eine Phase“ ist der gleichwertige Begriff eines „Strahls im Hilbertraum“. Der zum Vektor $\Psi \neq 0$ gehörige Strahl ist der komplex eindimensionale Unterraum, der von ihm aufgespannt wird. Ordnet man physikalischen Zuständen Strahlen im Hilbertraum zu, ist die Grundgleichung (1.1) für die Wahrscheinlichkeit von Meßwerten \mathbf{a}_i so abzuändern, daß sie unabhängig von der Normierung der Vektoren $\Lambda_i \neq 0$ und $\Psi \neq 0$ wird, die man als Repräsentanten ihrer Strahlen wählt.

$$w(i, \mathbf{A}, \Psi) = \frac{|\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2}{\langle \Lambda_i | \Lambda_i \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (1.31)$$

Da Zustände Strahlen im Hilbertraum sind, kann man sie genau genommen nicht addieren. Zwar kann man die Vektoren addieren, aus denen zwei verschiedene Strahlen bestehen, aber die Summen bilden keinen Strahl, sondern einen zweidimensionalen Unterraum des Hilbertraumes. Hingegen können aus Repräsentanten Ψ und Φ der zwei Strahlen auf viele Arten Superpositionen, der zu $\mathbf{a}\Psi + \mathbf{b}\Phi$ gehörige Strahl, gebildet werden, wobei $\lambda(\mathbf{a}\Psi + \mathbf{b}\Phi)$ mit $\lambda \neq 0$ zu demselben Zustand gehört.

Die verschiedenen Superpositionen zweier verschiedener Zustände Ψ und Φ bilden den Raum $\mathbb{C}P^1 = S^2$, jede gegebene Superposition kann also als Punkt einer zweidimensionalen Kugeloberfläche gedacht werden. Auf dieser Kugel zeichnet Ψ einen Punkt als Nordpol und die zu Ψ senkrechte Superposition Ψ_\perp als Südpol aus, dem Äquator entsprechen die gleichgewichtigen Superpositionen $(\Psi + e^{i\alpha}\Psi_\perp)/\sqrt{2}$, deren relative Phase α wichtig ist. Außer durch die Herkunft ist keine Superposition auf natürliche Art gegenüber einer anderen ausgezeichnet.

Das Zusammenfassen zweier Zustände zu einer Superposition ist nicht, wie von Addition zu fordern, assoziativ und kommutativ. Man sollte Superposition daher nicht schlampig Addition nennen.

Statt einen Vektor Λ_i oder Ψ als Repräsentanten eines Strahls im Hilbertraum zu verwenden, kann man Strahlen durch die zugehörigen Projektoren

$$P_{i,\mathbf{A}} = \frac{|\Lambda_i\rangle\langle\Lambda_i|}{\langle\Lambda_i|\Lambda_i\rangle} \quad (1.32)$$

und

$$\rho = \frac{|\Psi\rangle\langle\Psi|}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (1.33)$$

darstellen. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des i -ten Meßwertes α_i ist dann durch die Spur von ρ mal $P_{i,A}$ gegeben.

$$w(i, A, \rho) = \text{tr } \rho P_{i,A} \quad (1.34)$$

Zur Erinnerung: die Spur $\text{tr } A$ eines Operators ist als

$$\text{tr } A = \sum_j \langle \xi_j | A \xi_j \rangle \quad (1.35)$$

definiert, wobei ξ_j eine Basis bilden (z.B. $\xi_j = \Lambda_j$). Die Spur eines Operators ist unabhängig von der Basis und zyklisch $\text{tr } AB = \text{tr } BA$.

In der Form (1.34) kann die Grundgleichung leicht für den Fall verallgemeinert werden, in dem der Meßwert α entartet ist und mehrere, durch feinere Meßapparate unterscheidbare (und daher zueinander orthogonale) Zustände $\Lambda_{\alpha,k}$, $k = 1, 2, \dots$, zum Meßwert α gehören. Der Projektor $P_{i,A}$ ist dann zum Projektor $P_{\alpha,A}$ auf den Unterraum derjenigen Zustände zu verallgemeinern, bei denen der Meßwert α mit Sicherheit auftritt.

$$P_{\alpha,A} = \sum_k \frac{|\Lambda_{\alpha,k}\rangle\langle\Lambda_{\alpha,k}|}{\langle\Lambda_{\alpha,k}|\Lambda_{\alpha,k}\rangle} \quad (1.36)$$

Wenn der Zustand ρ vermessen wird, so ist

$$w(\alpha, A, \rho) = \text{tr } \rho P_{\alpha,A} \quad (1.37)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Meßapparat A den Meßwert α anzeigt.

1.7 Dichtematrix

Die Wahrscheinlichkeit (1.1) kann mit der Häufigkeit, mit der in Versuchsreihen die Meßwerte auftreten, erst dann sicher verglichen werden, wenn in der Quelle wiederholt derselbe Zustand Ψ präpariert wird. Dies ist bei vielen Quellen, zum Beispiel bei Öfen, nicht der Fall. Wenn Teil der Quelle in Bild (1.1) ein Würfel ist, der mit Wahrscheinlichkeit p_1 den Zustand Ψ_1 , mit Wahrscheinlichkeit p_2 einen Zustand Ψ_2 und so weiter präpariert, dann tritt mit Wahrscheinlichkeit $p_1 w(i, A, \Psi_1)$ der Fall auf, daß der Zustand Ψ_1 präpariert und der i -te Meßwert α_i gemessen wird, mit Wahrscheinlichkeit $p_2 w(i, A, \Psi_2)$ der Fall, daß der Zustand Ψ_2 präpariert und der i -te Meßwert gemessen wird und so weiter. Berücksichtigt man alle Möglichkeiten, so erhält man den i -ten Meßwert α_i mit Wahrscheinlichkeit

$$w(i, A, \rho) = \sum_n p_n w(i, A, \Psi_n) = \sum_n p_n \langle \Lambda_i | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Lambda_i \rangle = \langle \Lambda_i | \rho \Lambda_i \rangle, \quad (1.38)$$

wobei die Dichtematrix ρ

$$\rho = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \quad (1.39)$$

das Gemisch in allen meßbaren Eigenschaften charakterisiert.

Die Wahrscheinlichkeit, den i -ten Meßwert α_i zu messen, ist das zugehörige Hauptdiagonalelement der Dichtematrix in der Basis der Eigenzustände des Meßapparates.

Die Wahrscheinlichkeit (1.38) kann in einer Versuchsreihe nur dann sicher mit der Häufigkeit von Meßwerten verglichen werden, wenn die Wahrscheinlichkeiten p_n während der Versuchsreihe unverändert bleiben, wenn das Gemisch genügend häufig präpariert werden kann und wenn außerhalb des quantenmechanischen Systems Meßapparate existieren. Daher ist unsicher, wie eine „Wellenfunktion des Universums“ zu deuten ist, die das einmalige Universum einschließlich aller Meßapparate beschreiben soll. Von dieser Frage sind wir allerdings gnädig verschont, da wir diese Wellenfunktion nicht kennen.

Mit der Bezeichnung Gemisch benennt man den Normalfall, daß verschiedene Zustände Ψ_n mit Wahrscheinlichkeiten p_n präpariert werden. Wird in Meßreihen immer derselbe Zustand Ψ präpariert, nennen wir das zu messende System auch deutlicher einen reinen Zustand. Reine Zustände sind spezielle Gemische, bei denen eine Produktionswahrscheinlichkeit 1 ist und die anderen Produktionswahrscheinlichkeiten verschwinden.

Die Zustände Ψ_n , aus denen sich das Gemisch zusammensetzt, sind normalerweise nicht paarweise orthogonal und bilden normalerweise keine Basis. Normalerweise lassen sich die einzelnen Summanden $p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$ nicht aus der Dichtematrix ρ rekonstruieren, ebenso wie man einer gegebenen Zahl nicht ihre Summanden ansieht. Man kann aber die Eigenwerte ρ_n und orthonormierte Eigenvektoren Υ_n von ρ bestimmen²

$$\rho \Upsilon_n = \rho_n \Upsilon_n \quad \text{mit} \quad \langle \Upsilon_m | \Upsilon_n \rangle = \delta^m_n \quad (1.40)$$

und damit die Dichtematrix in der zum Verwechseln ähnlichen Form

$$\rho = \sum_n \rho_n |\Upsilon_n\rangle \langle \Upsilon_n| \quad (1.41)$$

schreiben. Die Eigenwerte ρ_n und die Projektoren auf die zugehörigen Eigenräume sind durch die Eigenwertgleichung von ρ festgelegt.

Jedes Hauptdiagonalelement $\langle \Lambda | \rho \Lambda \rangle$ der Dichtematrix ist nichtnegativ

$$\langle \Lambda | \rho \Lambda \rangle = \sum_n \langle \Lambda | p_n \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Lambda \rangle = \sum_n p_n |\langle \Lambda | \Psi_n \rangle|^2 \geq 0. \quad (1.42)$$

Insbesondere haben daher Dichtematrizen nichtnegative Eigenwerte ρ_n . Ein Hauptdiagonalelement $\langle \Lambda | \rho \Lambda \rangle$ verschwindet genau dann, wenn alle Skalarprodukte $p_n \langle \Psi_n | \Lambda \rangle$ verschwinden, also wenn $\rho \Lambda$ Null ist

$$\langle \Lambda | \rho \Lambda \rangle = 0 \Leftrightarrow \rho \Lambda = 0. \quad (1.43)$$

²Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

Zudem ist die Spur $\text{tr } \rho$ der Dichtematrix

$$\text{tr } \rho = \sum_i \langle \Lambda_i | \rho | \Lambda_i \rangle = \sum_{in} \langle \Lambda_i | p_n \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Lambda_i \rangle = \sum_n \langle \Psi_n | p_n \Psi_n \rangle = \sum_n p_n$$

durch die Summenregel $\sum_n p_n = 1$ für Wahrscheinlichkeiten festgelegt.

$$\text{tr } \rho = 1 = \sum_n p_n \quad (1.44)$$

1.8 Mischen von Gemischen

Stellen wir uns in Abbildung (1.1) zwei Quellen vor, die Gemische $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$ präparieren, und eine Anordnung, die beide Teilchenstrahlen kombiniert. Dies geschehe zufällig, so daß mit einer Wahrscheinlichkeit λ Teilchen aus dem ersten Strahl und mit der Restwahrscheinlichkeit $(1 - \lambda)$ Teilchen aus dem zweiten Strahl gewählt werden.

Wenn wir an dieser Mischung von Gemischen messen, so tritt mit Wahrscheinlichkeit $\lambda \langle \Lambda_i | \hat{\rho} | \Lambda_i \rangle$ der Fall auf, daß der erste Strahl ausgewählt und \mathbf{a}_i gemessen wird, mit Wahrscheinlichkeit $(1 - \lambda) \langle \Lambda_i | \tilde{\rho} | \Lambda_i \rangle$ der Fall, daß der zweite Strahl gewählt und \mathbf{a}_i gemessen wird.

Insgesamt wird mit Wahrscheinlichkeit

$$\lambda \langle \Lambda_i | \hat{\rho} | \Lambda_i \rangle + (1 - \lambda) \langle \Lambda_i | \tilde{\rho} | \Lambda_i \rangle = \langle \Lambda_i | (\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) | \Lambda_i \rangle \quad (1.45)$$

der Meßwert \mathbf{a}_i gemessen. Die Mischung beider Gemische führt zu Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die zur Dichtematrix

$$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad (1.46)$$

gehört.

Wir werden sehen, daß beim Mischen die Unkenntnis über die zugrunde liegenden Zustände, die Entropie, und die Streuung von Meßwerten zunimmt.

2 Operatoren

2.1 Erwartungswerte

Die Formel (1.34) gibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle Meßwerte an. Sie enthält damit die vollständige Information über den Ausgang von Meßreihen. Oft ist man an weniger Information interessiert, zum Beispiel am Mittelwert der Meßwerte. Bei vielen Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist der wahrscheinlichste Meßwert nahe beim Mittelwert und der Mittelwert daher der Meßwert, den man erwartet. Deshalb nennen ihn Physiker den Erwartungswert. Man sei jedoch gewarnt, daß es auch zweihöckerige Verteilungen gibt, zum Beispiel die Strahlauffächerung in einer Stern-Gerlach-Apparatur, bei denen Meßwerte in der Nähe des Mittelwertes unwahrscheinlich sind und der Erwartungswert nicht zu erwarten ist.

Der Mittelwert $\langle A \rangle$ der Meßwerte des Apparates A ist die Summe der mit den Wahrscheinlichkeiten gewichteten Meßwerte

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i w(i, A, \rho) = \sum_i a_i \langle \Lambda_i | \rho | \Lambda_i \rangle = \text{tr} \left(\sum_i a_i | \Lambda_i \rangle \langle \Lambda_i | \right) \rho . \quad (2.1)$$

Er ist also durch

$$\langle A \rangle = \text{tr} \rho A \quad (2.2)$$

gegeben, wobei A jetzt nicht nur den Meßapparat sondern auch den Operator

$$A = \sum_i a_i | \Lambda_i \rangle \langle \Lambda_i | \quad (2.3)$$

bezeichnet. Er ist für den Meßapparat charakteristisch, da sich aus ihm die Meßwerte und ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle Gemische ρ berechnen lassen. Zu jedem Meßapparat A gehört ein Operator A im Hilbertraum. Allerdings ist enttäuschend, daß die Hersteller von Meßapparaten den Operator nicht der Gebrauchsanweisung beilegen.

Im Gegensatz zu weitverbreiteten Behauptungen entspricht das Anwenden des Operators auf den Zustand Ψ nicht der Messung des Zustands.

Die Notation $\langle A \rangle$ für den Mittelwert $\text{tr} A \rho$ stammt vom reinen Zustand (1.33). In diesem Fall gilt spezieller, wenn wir wieder ein normiertes Ψ verwenden,

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle . \quad (2.4)$$

Ohne am Sachverhalt etwas zu ändern, wird in der Bracket-Schreibweise noch ein „|“ eingefügt: $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$. Man betont dadurch, daß es irrelevant ist, ob der Operator

A auf das zweite oder das erste Argument des Skalarproduktes wirkt, denn A ist ein linearer, hermitescher (1.17) Operator

$$A = A^\dagger . \quad (2.5)$$

Man überzeugt sich leicht, daß die Projektionsoperatoren (1.23) hermitesch sind und daß reelle Linearkombinationen (2.3) von hermiteschen Operatoren wieder hermitesch sind.

Aus dem gleichen Grund ist die Dichtematrix ρ hermitesch.

$$\rho = \rho^\dagger \quad (2.6)$$

Aus (1.6) folgt unmittelbar, daß die Zustände Λ_i Eigenzustände des Operators A sind und daß die Eigenwerte die Meßwerte α_i sind.

$$A\Lambda_i = \alpha_i\Lambda_i \quad (2.7)$$

So haben wir in (2.3) den Operator A aus den Meßwerten und Eigenzuständen konstruiert.

Umgekehrt lassen sich bei gegebenem Operator A aus der Eigenwertgleichung die Eigenvektoren bis auf einen komplexen Faktor, das heißt also die zugehörigen Strahlen im Hilbertraum, und die Meßwerte α_i bestimmen.

Die Eigenwerte α eines hermiteschen Operators $A = A^\dagger$ sind reell, wie sich aus $A\Lambda = \alpha\Lambda$ und $\langle\Lambda|\Lambda\rangle \neq 0$ mit folgender Argumentationskette ergibt.

$$(\alpha^* - \alpha)\langle\Lambda|\Lambda\rangle = \langle\alpha\Lambda|\Lambda\rangle - \langle\Lambda|\alpha\Lambda\rangle = \langle A\Lambda|\Lambda\rangle - \langle\Lambda|A\Lambda\rangle = 0 \quad (2.8)$$

Die Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerte sind orthogonal zueinander.

$$(\alpha_i - \alpha_j)\langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = \langle A\Lambda_i|\Lambda_j\rangle - \langle\Lambda_i|A\Lambda_j\rangle = 0, \quad \alpha_i \neq \alpha_j \Rightarrow \langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = 0 \quad (2.9)$$

Unitäre Operatoren $U^\dagger = U^{-1}$ haben komplexe Eigenwerte vom Betrag 1. Denn unitäre Transformationen lassen Skalarprodukte invariant.

$$\langle U\Phi|U\Psi\rangle = \langle U^\dagger U\Phi|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle \quad (2.10)$$

Demnach haben Ψ und $U\Psi$ gleiche Länge und $U\Psi = \lambda\Psi$, $\lambda \in \mathbb{C}$, ist nur möglich für $|\lambda| = 1$

$$U^\dagger = U^{-1} \text{ und } U\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \lambda = e^{i\alpha}, \quad \alpha \in \mathbb{R} . \quad (2.11)$$

Unitäre Operatoren U können als e^{iH} mit einem hermiteschen Operator $H = H^\dagger$ geschrieben werden.

2.2 Unbeschränktes Spektrum

Die Menge der Eigenwerte eines Operators A – genauer das Komplement der komplexen Zahlenmenge $\lambda \in \mathbb{C}$, für die die Resolvente $(A-\lambda)^{-1}$ als Operator im ganzen Hilbertraum existiert – heißt Spektrum von A . Wenn das Spektrum nicht beschränkt ist, ist der lineare

Operator nicht auf allen Vektoren Ψ definiert und mit einer beliebig kleinen Änderung eines Zustandes, auf dem A definiert ist, kann man eine beliebig große Änderung des Erwartungswertes bewirken.

Das ist aus dem Alltag bekannt: soll zum Beispiel die mittlere Studiendauer berechnet werden, so ändert ein einziger Student im vierzigsten Semester den Mittelwert drastisch. Man behilft sich bei Statistiken mit Zusatzargumenten, wie „Ein Student im vierzigsten Semester ist kein Student“ und läßt ihn einfach weg. Bei Messungen verfährt man oft genauso und läßt Ausreißer bei der Bestimmung von Mittelwerten weg.

Vornehm heißt dies Verfahren Regularisierung. Will man nur genügend gutartige Fragen untersuchen, zum Beispiel: „Begreifen die Studenten den Lehrstoff seit Einführung des neuen Studienplanes schneller?“ hängt die Antwort nicht vom Altstudenten und der Regularisierung ab, und sie ist akzeptabel.

Die mathematischen Schwierigkeiten bei Operatoren mit unbeschränktem Spektrum zeigen sich schon beim Energieerwartungswert des harmonischen Oszillators. Die Energiewerte sind die Eigenwerte des Hamiltonoperators $H = \hbar\omega a^\dagger a$. Sie sind nichtnegative, ganzzahlige Vielfache von $\hbar\omega$

$$H|\Lambda_n\rangle = E_n|\Lambda_n\rangle, \quad E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

Wir unterstellen, daß die Λ_n normiert sind. Dann bilden sie eine Orthonormalbasis (1.6) und ein allgemeiner Vektor kann als Linearkombination $|\Psi\rangle = \sum_n |\Lambda_n\rangle\psi_n$ mit quadratsummierbaren Komponenten ψ_n geschrieben werden.

Der Hamiltonoperator ist hermitesch und bildet Ψ auf $H\Psi$ mit Komponenten

$$\langle\Lambda_n|H\Psi\rangle = \hbar\omega n\langle\Lambda_n|\Psi\rangle = \hbar\omega n\psi_n \quad (2.13)$$

ab. Es lassen sich leicht quadratsummierbare Folgen angeben, zum Beispiel $\psi_n = 1/(n+1)$, so daß die Folge $n\psi_n$ nicht quadratsummierbar ist. Auf den zugehörigen Vektoren ist H nicht definiert. Wenn man solche Folgen bei großem n abbricht, und mit einem genügend kleinen Vorfaktor zu einem physikalischen Zustand hinzufügt, so sieht man, daß in jeder Umgebung jedes Zustandes ein weiterer Zustand existiert, dessen Energieerwartungswert jede vorgegebene Grenze überschreitet. Das ist zwar mathematisch störend aber physikalisch unwichtig: der hohe Energieerwartungswert rührt von sehr seltenen Messungen mit sehr hohen Energien her.

Zahmer als ein Meßoperator mit unbeschränktem Spektrum sind die Projektoren (1.23) auf die zugehörigen Eigenräume. Nur sie werden benötigt, um die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte beim Vermessen eines Gemisches ρ anzugeben.

2.3 Unschärfe

Als nach dem Mittelwert nächstwichtige Größe charakterisiert in einem Gemisch ρ (1.39) die Schwankung der Meßwerte eines Apparats A , genauer der Erwartungswert der quadratischen Abweichung vom Mittelwert, die Wahrscheinlichkeitsverteilung.

$$(\Delta_\rho A)^2 = \langle(A - \langle A \rangle)^2\rangle = \sum_n p_n \langle\Psi_n|(A - \langle A \rangle)^2\Psi_n\rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (2.14)$$

$\Delta_\rho A$ heißt die Unschärfe oder Schwankung von A im Gemisch ρ . Die Unschärfe hängt vom hermiteschen Operator A und vom Gemisch ρ ab.

Die Größe $(\Delta_\rho A)^2$ ist nichtnegativ, denn sie ist eine mit nichtnegativen Wahrscheinlichkeiten p_n gewichtete Summe von Längenquadraten.

$$\langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 \Psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle) \Psi | (A - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \|(A - \langle A \rangle) \Psi\|^2 \quad (2.15)$$

Sie verschwindet genau dann, wenn das Gemisch nur aus Eigenzuständen Λ_n zu einem festen Eigenwert $a = \langle A \rangle$ gemischt ist

$$0 = \sum_n p_n \|(A - \langle A \rangle) \Lambda_n\|^2 \Leftrightarrow (A - a) \Lambda_n = 0 \text{ oder } p_n = 0. \quad (2.16)$$

Die Summe $\sum_n p_n \|(c_A(A - \langle A \rangle) + ic_B(B - \langle B \rangle)) \Psi_n\|^2$ ist nicht negativ. Betrachtet man reelle Zahlen c_A und c_B und hermitesche Operatoren A und B , so ergibt sich aus dieser Bemerkung eine allgemeine untere Schranke für das Produkt $\Delta_\rho A \Delta_\rho B$ der Schwankungen von A und B im Gemisch ρ . Mit der Schreibweise

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.17)$$

für den Kommutator von A mit B gilt

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_n p_n \|(c_A(A - \langle A \rangle) + ic_B(B - \langle B \rangle)) \Psi_n\|^2 \\ &= \sum_n p_n \langle \Psi_n | (c_A^2(A - \langle A \rangle)^2 + c_B^2(B - \langle B \rangle)^2 + ic_A c_B [A, B]) \Psi_n \rangle \\ &= (c_A \Delta_\rho A + c_B \Delta_\rho B)^2 - c_A c_B (2 \Delta_\rho A \Delta_\rho B - i \sum_n p_n \langle \Psi_n | [A, B] \Psi_n \rangle). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Wir werten diese Ungleichung für $c_A = -\Delta_\rho B$ und $c_B = \Delta_\rho A$ aus. Dann verschwindet der erste Term. Falls weder ΔA noch ΔB verschwindet, ist $-2c_A c_B > 0$ und wir erhalten die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta_\rho A \Delta_\rho B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (2.19)$$

Wir dürfen Betragszeichen setzen, wenn wir dieselben Überlegungen mit B statt A und A statt B anstellen. Dabei behält die linke Seite der Ungleichung ihren Wert und der Kommutator $[A, B]$ wechselt sein Vorzeichen. Auch für $\Delta_\rho A = 0$ (oder $\Delta_\rho B = 0$) ist diese Ungleichung erfüllt, denn ρ ist dann aus Eigenzuständen zu A (oder B) zu einem Eigenwert a gemischt und der Erwartungswert eines Kommutators $[A, B]$ verschwindet in jedem Eigenzustand von A oder B .

$$\langle [A, B] \rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n | [A, B] \Psi_n \rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n | (aB - Ba) \Psi_n \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Das Schwankungsquadrat nimmt beim Mischen nicht ab. Es ist

$$(\Delta_{\rho(\lambda)} A)^2 = \text{tr } \rho(\lambda) A^2 - (\text{tr } \rho(\lambda) A)^2 \quad \text{mit } \rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad (2.21)$$

ein Polynom in λ mit nichtpositiver zweiter Ableitung $-2(\text{tr } \hat{\rho}A - \text{tr } \tilde{\rho}A)^2$ und demnach eine konkave Funktion des Mischungsparameters

$$(\Delta_{\rho(\lambda)}A)^2 \geq \lambda(\Delta_{\hat{\rho}}A)^2 + (1 - \lambda)(\Delta_{\tilde{\rho}}A)^2 . \quad (2.22)$$

Das Schwankungsquadrat einer Mischung von Gemischen ist mindestens die anteilige Summe der Schwankungsquadrate und stimmt mit der anteiligen Summe nur überein, wenn die Mittelwerte $\text{tr } \hat{\rho}A$ und $\text{tr } \tilde{\rho}A$ gleich sind.

2.4 Kommutator

Trotz der mathematischen Komplikationen, die mit der Verwendung unbeschränkter Operatoren zusammenhängen, formuliert man die Eigenschaften quantenmechanischer Systeme vorzugsweise anhand von Operatoren.

Mit der Sprechweise „der Operator A vertauscht mit Operator B “ bezeichnet man den Fall, daß $AB = BA$ gilt, das heißt, daß der Kommutator

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.23)$$

verschwindet. Vertauschen A und B und sind sie diagonalisierbar, zum Beispiel weil sie hermitesch oder unitär sind, so können Eigenvektoren des Operators A auch als Eigenvektoren von B gewählt werden und umgekehrt, denn B bildet den Eigenraum \mathcal{H}_i von A zum Eigenwert α_i wieder auf \mathcal{H}_i ab

$$[A, B] = 0 \wedge (A - \alpha_i)\Lambda_i = 0 \Rightarrow (A - \alpha_i)(B\Lambda_i) = B(A - \alpha_i)\Lambda_i = 0 \quad (2.24)$$

und kann in diesem Unterraum diagonalisiert werden. Ist die Dimension d_i von \mathcal{H}_i größer als 1, so ist der Meßwert α_i entartet und es gibt linear unabhängige Eigenvektoren Λ_{ij} zu A und B

$$A\Lambda_{ij} = \alpha_i\Lambda_{ij} \quad B\Lambda_{ij} = b_{ij}\Lambda_{ij} \quad j = 1, \dots, d_i . \quad (2.25)$$

Es kann dann ein feinerer Meßapparat gebaut werden, der gleichzeitig A und B mißt, so daß die Teilstrahlen α_i in Abbildung (1.1) feiner in Teilstrahlen b_{ij} zerlegt werden.

Ist B in denselben Unterräumen entartet wie A , so ist $B = f(A)$. B ist dann kein wesentlich anderer Meßapparat. B verwendet nur eine andere Meßskala als A , etwa wie bei einem Volt- und Ampère-Meter.

Bezüglich Messungen, deren zugehörige Operatoren vertauschen, verhalten sich die quantenmechanischen Systeme wie klassische, statistische Systeme. Bezüglich solcher Messungen werden alle Zustände Ψ schon vollständig durch die Betragquadrate der Skalarprodukte $\langle \Lambda | \Psi \rangle$ mit den gemeinsamen Eigenzuständen Λ der kommutierenden Meßoperatoren charakterisiert, durch eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung also. Erst Messungen, deren Operatoren nicht miteinander vertauschen, sind empfindlich auf die komplexen Phasen der Komponenten von Ψ .

Daher sind Kommutatorrelationen von grundlegender Bedeutung in der Quantenmechanik. Die wesentlichen algebraischen Eigenschaften des Kommutators sind Antisymmetrie, Linearität und Produktregel

$$[A, B] = -[B, A], \quad (2.26)$$

$$[A, \lambda_1 B + \lambda_2 C] = \lambda_1 [A, B] + \lambda_2 [A, C] \quad \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \quad (2.27)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]. \quad (2.28)$$

Wegen der Antisymmetrie und weil hermitesch Adjungieren die Reihenfolge vertauscht (1.18), ist der Kommutator hermitescher Operatoren antihermitesch. Wegen der Linearität und der Produktregel verhält sich die Operation „Kommutator nehmen mit einem Operator A “ so wie Ableiten. Bei diesem Ableiten bleibt die Reihenfolge der Faktoren unverändert. Aus der Regel für Produkte folgt die Produktregel für Kommutatoren, die Jacobi-Identität

$$[A, [B, C]] = [[A, B], C] + [B, [A, C]] \quad (2.29)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \quad (2.30)$$

2.5 Erzeuger-Vernichter-Algebra

Algebraische Relationen strukturieren den Hilbertraum der Zustände. So kann zum Beispiel die Heisenbergsche Vertauschungsrelation eines hermiteschen Ortsoperators X mit dem zugehörigen hermiteschen Impulsoperator P

$$[X, P] = i\hbar \quad (2.31)$$

nicht in einem Hilbertraum \mathcal{H} mit endlicher Dimension n gelten, denn dann wäre die Spur $\text{tr}(XP - PX) = 0$ im Widerspruch zu $\text{tr}(i\hbar) = ni\hbar$.

Existieren für ein $x_0 \in \mathbb{R}$, $x_0 \neq 0$, die komplexen Linearkombinationen

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{X}{x_0} + \frac{i}{\hbar} x_0 P \right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{X}{x_0} - \frac{i}{\hbar} x_0 P \right) \quad (2.32)$$

des Orts- und des Impulsoperators, so erfüllen sie die Erzeuger-Vernichter-Algebra

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1, \quad (2.33)$$

und es existiert eine Orthonormalbasis

$$\Lambda_{n,\tau} = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \Lambda_{0,\tau}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.34)$$

auf denen die Operatoren a als Vernichter und a^\dagger als Erzeuger wirken

$$a \Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n} \Lambda_{n-1,\tau}, \quad a^\dagger \Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n+1} \Lambda_{n+1,\tau}. \quad (2.35)$$

Dies ergibt sich aus der Analyse des hermiteschen Operators $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$. Im Vorgriff auf spätere Ergebnisse nennen wir $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$ Anzahloperator und bezeichnen seine Eigenwerte mit \mathbf{n} .

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \Lambda_n = \mathbf{n} \Lambda_n . \quad (2.36)$$

Aus der Erzeuger-Vernichter-Algebra (2.33) folgt, daß der Kommutator mit $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$ die Operatoren \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger auf ein Vielfaches von \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger abbildet

$$[\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a} , \quad [\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{a}^\dagger . \quad (2.37)$$

Daher sind $\mathbf{a} \Lambda_n$ und $\mathbf{a}^\dagger \Lambda_n$ entweder Null oder Eigenzustände mit Eigenwerten $\mathbf{n} - 1$ beziehungsweise $\mathbf{n} + 1$.

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a} \Lambda_n = ([\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}] + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n = (-1 + \mathbf{n}) \mathbf{a} \Lambda_n \quad (2.38)$$

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n = ([\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n = (1 + \mathbf{n}) \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \quad (2.39)$$

Da der Operator \mathbf{a} den Anzahleigenwert erniedrigt, heißt er Vernichter. Entsprechend ist \mathbf{a}^\dagger der Erzeugungsoperator. Ist Λ_n normiert, so ergeben sich die Normen von $\mathbf{a} \Lambda_n$ und $\mathbf{a}^\dagger \Lambda_n$ aus der Algebra und der Eigenwertgleichung

$$\langle \mathbf{a} \Lambda_n | \mathbf{a} \Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \Lambda_n \rangle = \mathbf{n} \quad (2.40)$$

$$\langle \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n | \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | ([\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n \rangle = \mathbf{n} + 1 . \quad (2.41)$$

Diese Normen sind nicht negativ (1.5). Daher ist \mathbf{n} nicht negativ. Wiederholtes Anwenden des Vernichter-Operators \mathbf{a} erniedrigt den Anzahleigenwert in ganzen Schritten und muß, bevor \mathbf{n} negativ wird, einen Eigenzustand $\Lambda_0 \neq 0$ ergeben, der durch weiteres Anwenden von \mathbf{a} auf Null abgebildet wird

$$\mathbf{a} \Lambda_0 = 0 . \quad (2.42)$$

Solch ein Zustand heißt Grundzustand. Er hat nach (2.40) Anzahleigenwert $\mathbf{n} = 0$. Demnach ist jeder Anzahleigenwert \mathbf{n} ganzzahlig und nicht negativ. Das Spektrum des Anzahloperators $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$ besteht aus den ganzen, nichtnegativen Zahlen

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \Lambda_n = \mathbf{n} \Lambda_n , \quad \mathbf{n} = 0, 1, 2, \dots . \quad (2.43)$$

Man wählt im Raum aller Grundzustände eine Orthonormalbasis $\Lambda_{0,\tau}$ und betrachtet die Vektoren (2.34), die durch \mathbf{n} -faches Anwenden des Erzeugungsoperators \mathbf{a}^\dagger aus dem Grundzustand erzeugt werden. Sie stimmen bis auf einen Faktor mit den Eigenzuständen überein, von denen man durch \mathbf{n} -faches Absteigen die Grundzustände gewonnen hat, denn

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}^\dagger)^n \mathbf{a}^n \Lambda_n &= (\mathbf{a}^\dagger)^{n-1} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-1} \Lambda_n = (\mathbf{a}^\dagger)^{n-1} (\mathbf{n} - (\mathbf{n} - 1)) \mathbf{a}^{n-1} \Lambda_n = \\ &= 1 \cdot (\mathbf{a}^\dagger)^{n-2} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-2} \Lambda_n = 1 \cdot 2 \cdot (\mathbf{a}^\dagger)^{n-3} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-3} \Lambda_n = \dots = \mathbf{n}! \Lambda_n . \end{aligned} \quad (2.44)$$

Es sind also die Grundzustände genauso entartet wie die Eigenzustände zu jedem anderen Eigenwert des Anzahloperators.

2.6 Drehimpulsalgebra

Ein weiteres Beispiel für algebraische Relationen ist die Drehimpulsalgebra

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k, \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.45)$$

Ein Vektorraum mit einem bilinearen Produkt $[A, B]$, das antisymmetrisch ist und die Jacobi-Identität (2.30) erfüllt, ist eine Lie-Algebra. Es sind also die Drehimpulsoperatoren Basiselemente einer Lie-Algebra, genauer der zur Drehgruppe in drei Dimensionen, der $SO(3)$, gehörigen Lie-Algebra.

Wenn die hermiteschen Drehimpulsoperatoren L_i existieren, so hat der Hilbertraum \mathcal{H} eine Orthonormalbasis $\Lambda_{l,m,\tau}$. τ ist ein Entartungsindex. $2l$ ist ganzzahlig nichtnegativ, l kann also Werte $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ haben. Die Algebra legt nicht fest, welche dieser erlaubten l -Werte auftreten und wie sie entartet sind. Bei festem l treten die m -Werte $-l, -l+1, \dots, +l$ auf. Auf der Orthonormalbasis $\Lambda_{l,m,\tau}$ können die Drehimpulsoperatoren explizit angegeben werden.

$$L_3 \Lambda_{l,m,\tau} = \hbar m \Lambda_{l,m,\tau} \quad (2.46)$$

$$(L_1 + iL_2) \Lambda_{l,m,\tau} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \Lambda_{l,m+1,\tau} \quad (2.47)$$

$$(L_1 - iL_2) \Lambda_{l,m,\tau} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \Lambda_{l,m-1,\tau} \quad (2.48)$$

Dies läßt sich folgendermaßen aus der Drehimpulsalgebra ableiten. Man rechnet nach, daß der Gesamtdrehimpuls $L^2 = (L_1^2 + L_2^2 + L_3^2)$ mit jedem der Drehimpulsoperatoren L_1, L_2 und L_3 vertauscht. Denn Drehimpulsoperatoren erzeugen Drehungen und lassen Längenquadrate von Vektoren, wie $x^2 + y^2 + z^2$ oder L^2 , invariant.

$$[L_i, L^2] = 0 \quad (2.49)$$

Die Drehimpulsoperatoren bilden daher (2.24) Drehimpulsmultipletts, das heißt Unterräume \mathcal{H}_l von Eigenzuständen von L^2 mit Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$, auf sich ab. Man kann also gemeinsame Eigenzustände Λ_{lm} zu L^2 und L_3 finden

$$L^2 \Lambda_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \Lambda_{lm}, \quad L_3 \Lambda_{lm} = \hbar m \Lambda_{lm}. \quad (2.50)$$

Der Eigenwert $\hbar^2 \lambda$ von L^2 ist nicht negativ, denn für jeden Eigenzustand gilt $\hbar^2 \lambda \|\Lambda\|^2 = \langle \Lambda | L^2 \Lambda \rangle = \sum_i \|L_i \Lambda\|^2$. Im Vorgriff auf spätere Ergebnisse schreiben wir λ als $\lambda = l(l+1)$ mit nichtnegativem $l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda}$.

Aus der Drehimpulsalgebra (2.45) folgt, daß die komplexen Linearkombinationen L_+ und $L_- = (L_+)^{\dagger}$

$$L_+ = L_1 + iL_2, \quad L_- = L_1 - iL_2 \quad (2.51)$$

durch den Kommutator mit L_3 auf ein Vielfaches von L_+ beziehungsweise L_- abgebildet werden und daß ihr Kommutator $2\hbar L_3$ ergibt

$$[L_3, L_+] = +\hbar L_+, \quad [L_3, L_-] = -\hbar L_-, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_3. \quad (2.52)$$

Daher sind $L_+\Lambda_{lm}$ und $L_-\Lambda_{lm}$ entweder Null oder L_3 -Eigenzustände zum Eigenwert $\hbar(m+1)$ beziehungsweise $\hbar(m-1)$

$$L_3L_+\Lambda_{lm} = ([L_3, L_+] + L_+L_3)\Lambda_{lm} = \hbar(1+m)L_+\Lambda_{lm} \quad (2.53)$$

$$L_3L_-\Lambda_{lm} = ([L_3, L_-] + L_-L_3)\Lambda_{lm} = \hbar(-1+m)L_-\Lambda_{lm} . \quad (2.54)$$

Da L_+ und L_- die L_3 -Eigenwerte mit konstanter Schrittweite erhöhen und erniedrigen, heißen sie auch Leiteroperatoren. Hat Λ_{lm} Einheitslänge, so folgt die Norm von $L_+\Lambda_{lm}$ und $L_-\Lambda_{lm}$ aus

$$L^2 = L_+L_- + L_3^2 - \hbar L_3 = L_-L_+ + L_3^2 + \hbar L_3 , \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} \langle L_+\Lambda_{lm} | L_+\Lambda_{lm} \rangle &= \langle \Lambda_{lm} | L_-L_+\Lambda_{lm} \rangle = \langle \Lambda_{lm} | (L^2 - L_3^2 - \hbar L_3) \Lambda_{lm} \rangle = \\ &= \langle \Lambda_{lm} | \hbar^2(l(l+1) - m(m+1)) \Lambda_{lm} \rangle = \hbar^2(l(l+1) - m(m+1)) \\ &= \hbar^2(l-m)(l+m+1) , \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\langle L_-\Lambda_{lm} | L_-\Lambda_{lm} \rangle = \hbar^2(l(l+1) - m(m-1)) = \hbar^2(l+m)(l-m+1) . \quad (2.57)$$

Diese Normen sind nicht negativ (1.5), daher ist bei gegebenem l die Quantenzahl m nach unten und oben beschränkt.

Auf den Eigenzustand $\Lambda_{lm_{\max}}$ mit höchstem L_3 -Eigenwert angewendet, muß L_+ verschwinden. Also gilt $(l - m_{\max})(l + m_{\max} + 1) = 0$ und $m_{\max} = l$, denn l ist nicht negativ. Ebenso muß L_- , auf den Zustand mit niedrigstem L_3 -Eigenwert angewendet, verschwinden. Daher folgt $(l + m_{\min})(l - m_{\min} + 1) = 0$ und, wegen $m_{\min} \leq l$, $m_{\min} = -l$,

$$m_{\max} = l, \quad m_{\min} = -l . \quad (2.58)$$

Da man durch wiederholtes Anwenden von L_+ auf den Zustand mit minimalem L_3 -Eigenwert die m -Quantenzahl in ganzen Schritten erhöht bis man zum Zustand mit $m_{\max} = l$ gelangt, muß die Differenz $m_{\max} - m_{\min} = 2l$ ganzzahlig und nicht negativ sein. Es ist also $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$ ganz- oder halbzahlig. Die Drehimpulsoperatoren wirken in einem $2l+1$ -dimensionalen Raum, dem Drehimpulsmultiplett mit Gesamtdrehimpuls l , der von Basiszuständen Λ_{lm} mit $m = -l, -l+1, \dots, +l$ aufgespannt wird.

Für $l = 1/2$ wirken die Drehimpulsoperatoren, die Spin-1/2-Operatoren S_1, S_2 , und S_3 , in einem zweidimensionalen Raum auf den Spinoren des Spin-1/2-Multipletts mit Basiszuständen $\Lambda_{l,m}$ mit $l = 1/2$ und $m = \pm 1/2$. In dieser Basis sind die Spinoperatoren wegen (2.46), (2.47) und (2.48) durch das $\hbar/2$ -fache der Pauli-Matrizen σ_1, σ_2 und σ_3 gegeben

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad i \in \{1, 2, 3\} . \quad (2.60)$$

Die Pauli-Matrizen erfüllen die algebraischen Relationen

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k . \quad (2.61)$$

Drehimpulsoperatoren erzeugen Drehungen von Zuständen. Zeigt die Drehachse in Richtung des Einheitsvektors \vec{e} , dann gehört zu einer Drehung um den Winkel α der unitäre Operator

$$U_{\vec{e},\alpha} = \exp\left(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}\right). \quad (2.62)$$

Für Spin-1/2 läßt sich die zu (2.62) gehörige Matrix leicht angeben, weil die e-Reihe wegen $(i\vec{\sigma} \cdot \vec{e})^2 = -\mathbb{1}$ (2.61) wie bei der Euler-Formel $e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$ summiert werden kann.

$$U_{\vec{e},\alpha} = \exp\left(-\frac{i\alpha}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{e}\right) = \mathbb{1} \cos \alpha/2 - i \vec{e} \cdot \vec{\sigma} \sin \alpha/2 \quad (2.63)$$

Eine Drehung um 2π führt einen Spin-1/2-Spinor in sein negatives über, $U_{\vec{e},2\pi} = -\mathbb{1}$.

2.7 Messung eines Spin-1/2-Gemisches

Für Systeme mit zwei Basiszuständen Λ_1, Λ_2 lassen sich alle Messungen an allen Zuständen mit wenigen Parametern charakterisieren. Prominentes Beispiel für Zweizustandssysteme sind Spin-1/2-Teilchen, die mit Stern-Gerlach-Apparaten untersucht werden, es kann sich aber auch zum Beispiel um Atome handeln, bei denen aufgrund der experimentellen Anordnung nur zwei der vielen Energiezustände berücksichtigt werden müssen.

In einer Stern-Gerlach-Apparatur wird ein Strahl von Spin-1/2 Teilchen wie in Abbildung (1.1) in zwei Teilstrahlen ($n = 2$) aufgespalten. Die Intensität des oberen Teilstrahls, bezogen auf die Intensität des einfallenden Strahls, ist die Wahrscheinlichkeit, mit der der Spin in Analyserichtung der Stern-Gerlach-Apparatur nach oben steht. Uns interessiert, wie diese Intensität von der Analyserichtung abhängt.

Die Dichtematrix ρ , die das zu messende Zweizustandssystem charakterisiert, wird in jeder Orthonormalbasis durch eine hermitesche Matrix mit Spur 1 charakterisiert. Hermitesche $n \times n$ -Matrizen bilden einen reellen, n^2 -dimensionalen Vektorraum, das heißt in unserem Fall, daß man jede hermitesche 2×2 -Matrix als reelle Linearkombination von 4 Basismatrizen schreiben kann. Als Basismatrizen bieten sich die $\mathbb{1}$ -Matrix und die spurfreien, hermiteschen Pauli-Matrizen (2.59) an. Wegen der Normierungsbedingung $\text{tr } \rho = 1$ ist der Koeffizient bei der $\mathbb{1}$ -Matrix $1/2$ und die allgemeinste Dichtematrix eines Zweizustandssystems hat die Form

$$\rho = \frac{1}{2} \mathbb{1} + a\sigma_1 + b\sigma_2 + c\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1/2 + c & a - ib \\ a + ib & 1/2 - c \end{pmatrix} \quad a, b, c \in \mathbb{R}. \quad (2.64)$$

Wir können diese Matrix noch durch Wahl der Basisvektoren des Zweizustandssystems vereinfachen. Wählen wir als Basis die Eigenvektoren von ρ , so wird die zu ρ gehörige Matrix diagonal. Sie ist also einfacher

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 + c & 0 \\ 0 & 1/2 - c \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Wählen wir spezieller als ersten Eigenvektor denjenigen, der zum größeren Eigenwert von ρ gehört, so ist c nichtnegativ. Zudem ist das Hauptdiagonalelement $1/2 - c$ nichtnegativ

(1.42). Die Dichtematrix ρ ist also durch die Basis und den Eigenwert $\rho_1 = 1/2 + c$, $0 \leq c \leq 1/2$, charakterisiert.

An den Meßapparaten, mit denen wir dieses Gemisch vermessen wollen, sind für uns die zwei Meßwerte α_1 und α_2 unwichtig: Der Apparat ändert sich nicht wesentlich, wenn wir eine andere Meßskala unterlegen. Wichtig ist die Wahrscheinlichkeit, mit der der erste Meßwert angezeigt wird. Um sie zu berechnen, brauchen wir gemäß (1.38) den ersten, normierten Eigenzustand Λ des Meßapparates \mathcal{A} . Wir schreiben seine Komponenten als Betrag mal Phase. Die Betragsquadrate müssen sich wegen $\langle \Lambda | \Lambda \rangle = 1$ zu Eins summieren, die Beträge sind daher Sinus und Kosinus eines Winkels $\theta/2$. Eine gemeinsame Phase der Komponenten ist irrelevant¹, die relative Phase der zwei Komponenten teilen wir hälftig auf.

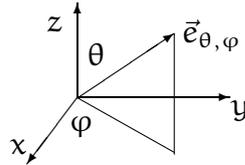
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2)e^{+i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

Die Winkel θ und φ haben geometrische Bedeutung. Der Zustand Λ (2.66) ist Eigenzustand zum Meßwert $\hbar/2$ des Spin-1/2-Operators

$$S_{\theta, \varphi} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x e_x + \sigma_y e_y + \sigma_z e_z), \quad (2.67)$$

der den Spin in Richtung von $\vec{e}(\theta, \varphi)$ mißt.

$$\vec{e}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.68)$$



Der Vektor $\vec{e}(\theta, \varphi)$ schließt mit der z -Achse den Winkel θ und seine Projektion in die x - y -Ebene schließt mit der x -Achse den Winkel φ ein.

Das Hauptdiagonalelement $\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle$ gibt nach (1.38) die Wahrscheinlichkeit $w(\uparrow_{\theta, \varphi})$ an, mit der bei Messung des Spins in Richtung $\vec{e}(\theta, \varphi)$ der Spin nach oben steht. Mit (2.65) und (2.66) berechnet man

$$w(\uparrow_{\theta, \varphi}) = 1/2 + c \cos \theta. \quad (2.69)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung hängt nicht vom Winkel φ ab. Sie ist invariant unter Drehungen um die z -Achse.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist in Abbildung (2.1) für $c = 0$, $c = 1/2$ und einen mittleren Wert von c als Funktion von θ dargestellt. θ ist der Winkel, den die Richtung, in die der Stern-Gerlach-Apparat den Strahl aufspaltet, mit der z -Achse bildet.

Die Wahl der Eigenvektoren von ρ als Basis für die Spinzustände erweist sich als Wahl der z -Richtung. Die z -Achse ist diejenige Richtung, in der bei Spin-Messung im Gemisch ρ am meisten Teilchen Spin nach oben haben.

¹Es gibt keine Wahl der Phasen, so daß die Komponenten stetig, 2π -periodisch in φ und für $\theta = 0$ und $\theta = \pi$ von φ unabhängig sind. Sie können also nicht als auf der Kugeloberfläche stetige Funktion gewählt werden. Das Problem betrifft die Phasen der Vektoren. Die zugehörigen Hilbertraumstrahlen variieren stetig auf der Kugeloberfläche.

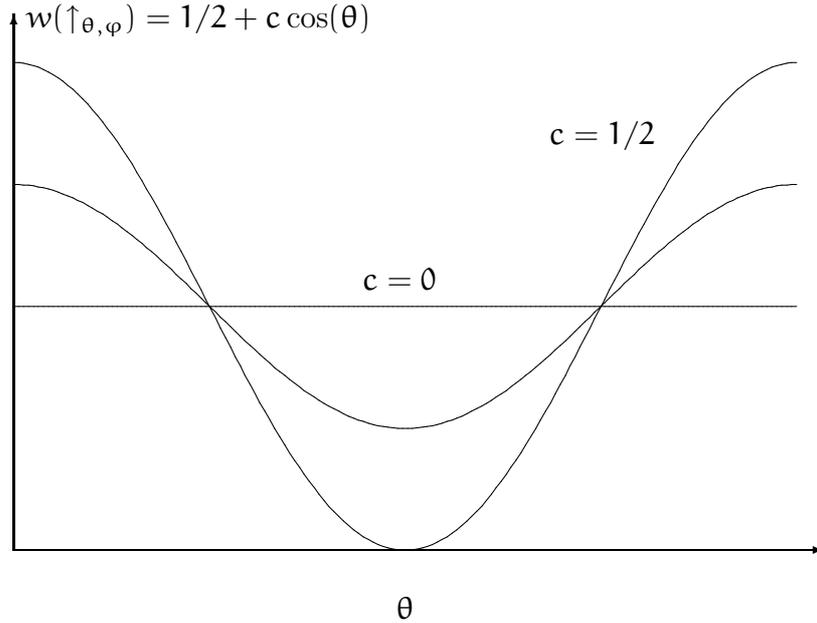


Abbildung 2.1: Strahlaufspaltung bei Spin 1/2

Die Darstellung im Winkelbereich $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ist redundant. Der Winkel θ zur z -Achse durchläuft nur Werte $0 \leq \theta \leq \pi$ und bezeichnet für Werte $\pi < \theta \leq 2\pi$ Winkel $\theta' = 2\pi - \theta$. Für Abbildung (2.1) ist aber der Winkelbereich $0 \leq \theta \leq 2\pi$ gewählt worden, um klar zu machen, daß die Meßwerte an einem Spin-1/2-System nach Drehung um 2π wieder in sich über gehen.

Spin-1/2-Spinoren (2.66) gehen durch eine Drehung um 2π in ihr negatives über (2.63). Nehmen wir beispielsweise den Eigenzustand $\Lambda_{\theta,\varphi} = \Lambda_{\frac{\pi}{2},0}$, dessen Spin bei Messung in x -Richtung nach oben steht und drehen ihn um die z -Achse um 2π , so wächst der Winkel φ von 0 auf 2π an und $\Lambda_{\frac{\pi}{2},0}$ geht in sein Negatives über.

$$\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} \quad (2.70)$$

Das bedeutet nicht, daß nach der Drehung der Spin in x -Richtung nach unten zeigt $-\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} \neq \Lambda_{\frac{\pi}{2},\pi}$. Das negative Vorzeichen ist nur eine unmeßbare Phase. Es ist der Strahl im Hilbertraum, das heißt der Vektor Ψ bis auf einen nichtverschwindenden Faktor, der dem physikalischen Zustand entspricht. Dieser Strahl im Hilbertraum geht durch Drehung um 2π in sich über. Das negative Vorzeichen kann man nur als relative Phase messen, wenn man einen Spin-1/2-Zustand teilt, etwa in einem Doppelspalt, einen Anteil um 2π dreht und die Änderung der Phase relativ zum zweiten Anteil in einem Interferenzbild nachweist.

Für $c = 1/2$ beschreibt ρ ein Gemisch, bei dem der Spin mit Sicherheit nach oben steht, wenn der Spin in z -Richtung ($\theta = 0$) gemessen wird. Es ist nämlich für $c = 1/2$ die Wahrscheinlichkeit $w(\uparrow_{\theta=0,\varphi}) = 1$ und das Gemisch ρ ein reiner Zustand und zwar

der Eigenzustand mit Spin nach oben bei Spin-Messung in z-Richtung.

$$\rho_{|c=1/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.71)$$

Nicht immer ist so einfach zu sehen, ob die Dichtematrix $\rho = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|$ vom Rang 1 ist und sich durch einen Term schreiben läßt. In solch einem Fall ist ein $p_j = 1$, die anderen Terme verschwinden und $\rho = \rho_{\text{rein}}$ ist ein Projektor $\rho_{\text{rein}}^2 = \rho_{\text{rein}}$. Wegen $\text{tr } \rho = 1$ gilt dann auch

$$\text{tr } \rho_{\text{rein}}^2 = 1 . \quad (2.72)$$

Wertet man die Spur in der Eigenbasis von ρ aus, so erkennt man, daß diese Gleichung auch hinreichend dafür ist, daß ρ ein reiner Zustand ist. Es ist nämlich die Spur gleich der Summe über die Eigenwerte von ρ , die zwischen 0 und 1 liegen und sich zu 1 summieren. Daher summieren sich ihre Quadrate dann und nur dann zu 1, wenn ein Eigenwert 1 und die anderen 0 sind.

Der Unterschied zwischen dem Maximalwert w_{max} und dem Minimalwert w_{min} von $w(\uparrow_{\theta,\varphi})$ bezogen auf den Maximalwert ist die Polarisation P des Strahls von Spin-1/2-Teilchen.

$$P = \frac{w_{\text{max}} - w_{\text{min}}}{w_{\text{max}}} \quad (2.73)$$

Für den reinen Zustand ($c = 1/2$) beträgt die Polarisation 100 % . Für $c = 0$ ist der Strahl total unpolarisiert und jede Spin-Messung spaltet unabhängig von der Richtung den Strahl hälftig auf.

Der Unterschied von einem reinen Zustand und einem Gemisch zeigt sich normalerweise erst bei Messen mit unterschiedlichen, in vorliegenden Beispiel gedrehten, Apparaten. Die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsverteilungen hängen bei reinen Zuständen stark vom Messapparat, im vorliegenden Fall von θ , ab, bei Gemischen verschwindet der Kontrast. Ebenso verschwindet beispielsweise das Interferenzbild von Licht hinter einem Doppelspalt, wenn es so wie Sonnenlicht aus verschiedenen Farben gemischt ist.

2.8 Störungstheorie

Wir untersuchen diskrete Eigenwerte und normierbare Eigenzustände einer differenzierbaren Schar $H(\lambda)$ von hermiteschen Operatoren. Kennt man das Spektrum für zum Beispiel $\lambda = 0$, so kann man mit Reihenentwicklung versuchen, das Spektrum und die Eigenzustände für benachbarte Werte von λ zu nähern.

$$(H(\lambda) - E_n(\lambda)) \Psi_n(\lambda) = 0 \quad (2.74)$$

Wir unterstellen, daß der Operator $H(\lambda)$, seine Eigenwerte $E_n(\lambda)$ und seine Eigenzustände $\Psi_n(\lambda)$ differenzierbar von λ abhängen.

Alle Ergebnisse der stationären Störungstheorie folgen aus (2.74) durch Differenzieren nach λ mit der folgenden Einschränkung, daß die Eigenwertgleichung den zugehörigen Eigenvektor $\Psi_n(\lambda) \neq 0$ nicht festlegt, sondern daß auch alle komplexe Vielfache von

$\Psi_n(\lambda)$ die Gleichung lösen. Um die Normierung und die Phase von $\Psi_n(\lambda)$ festzulegen, verlangen wir

$$\langle \Psi_m(\lambda) | \Psi_n(\lambda) \rangle = \delta_{m,n} \quad (2.75)$$

$$\langle \Psi_m(\lambda) | \frac{d}{d\lambda} \Psi_n(\lambda) \rangle_{m=n} = 0. \quad (2.76)$$

Die Bedingung (2.75) ist für $E_n \neq E_m$ erfüllt, weil Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind (2.9). In jedem Unterraum, in dem ein Eigenwert entartet ist, kann eine Orthonormalbasis gewählt und (2.75) erfüllt werden.

Differenzieren von (2.75) für $n = m$ ergibt, daß $\langle \Psi_n(\lambda) | \frac{d}{d\lambda} \Psi_n(\lambda) \rangle = if(\lambda)$ imaginär ist. Durch Phasenwahl

$$\tilde{\Psi}_n(\lambda) = e^{i\alpha} \Psi_n(\lambda) \quad \alpha(\lambda) = - \int^\lambda d\lambda' f(\lambda') \quad (2.77)$$

kann man die Gleichung (2.76) mit $\tilde{\Psi}_n$ erfüllen. Wir unterstellen, daß die Gleichungen (2.75) und (2.76) ohne Redefinition der Phasen schon gelten.

Differenzieren von (2.74) nach λ ergibt

$$\left(\frac{d}{d\lambda} H - \frac{d}{d\lambda} E_n \right) \Psi_n + (H - E_n) \frac{d}{d\lambda} \Psi_n = 0. \quad (2.78)$$

Das Skalarprodukt mit Ψ_n führt auf $\langle \Psi_n | \left(\frac{d}{d\lambda} H - \frac{d}{d\lambda} E_n \right) \Psi_n \rangle = 0$, also

$$\frac{d}{d\lambda} E_n = \langle \Psi_n | \left(\frac{d}{d\lambda} H \right) \Psi_n \rangle. \quad (2.79)$$

Das Skalarprodukt mit Ψ_m , $m \neq n$, ergibt

$$\langle \Psi_m | \left(\frac{d}{d\lambda} H \right) \Psi_n \rangle + (E_m - E_n) \langle \Psi_m | \frac{d}{d\lambda} \Psi_n \rangle = 0. \quad (2.80)$$

Ist ein Eigenwert E entartet, gilt also $E_{m_1} = E_{m_2} = \dots = E_{m_k} = E$ für einen Wert von λ für einige orthonormale Zustände Ψ_{m_i} , die einen k -dimensionalen Unterraum aufspannen, so können diese Zustände nur dann differenzierbar vom Störparameter abhängen, wenn der Störoperator $\left(\frac{d}{d\lambda} H \right)$ keine Übergänge zwischen diesen Zuständen macht, wenn also gilt

$$\langle \Psi_{m_i} | \left(\frac{d}{d\lambda} H \right) \Psi_{m_j} \rangle = 0 \text{ für } E_{m_i} = E_{m_j} \text{ und } m_i \neq m_j. \quad (2.81)$$

Im Unterraum, in dem ein Eigenwert entartet ist, muß also die Orthonormalbasis so gewählt werden, daß der auf den Unterraum eingeschränkte Störoperator $\frac{d}{d\lambda} H$ diagonal ist.

Durch (2.80), (2.81) und durch (2.76) sind die Skalarprodukte von $\frac{d}{d\lambda} \Psi_n$ mit allen Basisvektoren Ψ_m festgelegt. Daher gilt

$$\frac{d}{d\lambda} \Psi_n = - \sum_{m: E_m \neq E_n} \Psi_m \frac{\langle \Psi_m | \left(\frac{d}{d\lambda} H \right) \Psi_n \rangle}{E_m - E_n}. \quad (2.82)$$

Die Koeffizienten von $\frac{d}{d\lambda}\Psi_n$ sind quadratsummierbar, wenn der Vektor Ψ_n differenzierbar von λ abhängt.

$$\sum_{m: E_m \neq E_n} \left| \frac{\langle \Psi_m | (\frac{d}{d\lambda} H) \Psi_n \rangle}{E_m - E_n} \right|^2 < \infty \quad (2.83)$$

Die Gleichungen (2.79) und (2.82) sind ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem für E_n und Ψ_n , aus dem man algebraisch durch wiederholtes Differenzieren alle höheren Ableitungen und dadurch die Potenzreihenentwicklung in λ bestimmen kann.

Hängt der Hamiltonoperator $H(\lambda)$ linear von λ ab, so ist die zweite Ableitung der Grundzustandsenergie $E_0(\lambda)$ negativ und sie wird in zweiter Ordnung abgesenkt, die Grundzustandsenergie ist dann eine konkave Funktion des Störparameters.

$$\frac{d^2 E_0}{d\lambda^2} = -2 \sum_{m: E_m > E_0} \frac{|\langle \Psi_m | \frac{dH}{d\lambda} \Psi_0 \rangle|^2}{E_m - E_0} \leq 0 \quad (2.84)$$

In relativistischen Theorien will man für jeden Wert der Kopplungskonstante einen Poincaré-invarianten Grundzustand haben. Es soll identisch in der Kopplung λ die Gleichung $H(\lambda)\Psi_0 = 0$ gelten. Dann kann nicht einfach H linear von λ abhängen, denn sonst wäre die Grundzustandsenergie eine konkave Funktion von λ .

Betrachten wir den Spin-Operator $S_{\theta, \varphi}$ für $\theta = \frac{\pi}{2}$ als Funktion von φ und durchlaufen wir mit φ einen Kreis, so geht der Operator wieder in sich über

$$S_{\frac{\pi}{2}, 0} = S_{\frac{\pi}{2}, 2\pi} . \quad (2.85)$$

Der zugehörige Eigenzustand mit Spin nach oben, dessen Phase und Normierung durch (2.76) und (2.75) festgelegt ist, geht nur bis auf eine Phase, allgemeiner bei Operatoren mit entarteten Zuständen bis auf eine unitäre Transformation, in sich über

$$\Psi_{\frac{\pi}{2}, 0} = e^{i\pi} \Psi_{\frac{\pi}{2}, 2\pi} . \quad (2.86)$$

3 kontinuierliches Spektrum

3.1 Wellenfunktion

Viele Meßapparate, insbesondere die Orts- oder Impulsmessung, haben ein Kontinuum möglicher Meßwerte, die eventuell gemeinsam mit diskreten Meßwerten, wir nennen sie im folgenden Spin, gemessen werden können. In der Eigenbasis der zur Messung gehörigen, miteinander kommutierenden Operatoren wird Ψ durch die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi_i(\mathbf{x})$ angegeben für kontinuierliche, reelle Meßwerte \mathbf{x} und für diskrete Meßwerte α_i , $i \in I$, die durch eine Indexmenge I abgezählt werden. Der Zustand Ψ ist durch eine Abbildung der Menge der gemeinsam meßbaren, reellen Meßwerte $\mathbb{D} \subset (I \times \mathbb{R}^n)$ in die komplexen Zahlen \mathbb{C} gegeben.

$$\Psi : (i, \mathbf{x}) \mapsto \psi_i(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

Gehört \mathbf{x} zur Ortsmessung, so heißen die Funktionen $\psi_i(\mathbf{x})$ die Ortswellenfunktionen.

Das Betragsquadrat $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Das heißt: Die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert \mathbf{x} in einem Bereich Δ liegt und daß die Spinnmessung den i -ten Meßwert α_i ergibt, ist

$$w(i, \Delta, \Psi) = \int_{\Delta} d^n \mathbf{x} |\psi_i(\mathbf{x})|^2 . \quad (3.2)$$

Für Meßintervalle Δ , die den Wert \mathbf{x} enthalten und so klein sind, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ in ihnen fast konstant ist, können wir das Integral nähern. Bezeichnen wir die Größe des Meßintervalls mit $d^n \mathbf{x}$, so erhalten wir

$$w(i, \Delta, \Psi) \approx |\psi_i(\mathbf{x})|^2 d^n \mathbf{x} . \quad (3.3)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert bei \mathbf{x} in einem kleinen Bereich liegt und daß der Spin den i -ten Meßwert α_i hat, ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ multipliziert mit der Größe $d^n \mathbf{x}$ des Bereichs.

Da Wahrscheinlichkeiten dimensionslos sind, haben Wellenfunktionen die Dimension

$$\dim(\psi_i(\mathbf{x})) = (\dim(d^n \mathbf{x}))^{-1/2} . \quad (3.4)$$

Umfaßt das Meßintervall Δ die Menge aller möglichen kontinuierlichen Meßwerte und summiert man über alle möglichen Spinwerte, so impliziert die Summenregel für Wahrscheinlichkeiten, daß Ψ normiert ist.

$$\sum_i \int d^n \mathbf{x} |\psi_i(\mathbf{x})|^2 = 1 \quad (3.5)$$

Hieraus liest man das Skalarprodukt ab.

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n \mathbf{x} \phi_i^*(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) \quad (3.6)$$

Genau genommen wird nur über alle mögliche Meßwerte $(i, \mathbf{x}) \in \mathbb{D} \subset \mathbb{I} \times \mathbb{R}^n$ integriert. Wir können diese Einschränkung leicht berücksichtigen, indem wir uns auf den Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen beschränken, die außerhalb von \mathbb{D} verschwinden.

Angewendet auf Wellenfunktionen ergeben die zu den kontinuierlichen Meßwerten gehörigen Operatoren X^l , $l \in \{1, 2, \dots, n\}$, die Wahrscheinlichkeitsamplitude multipliziert mit dem Meßwert

$$X^l : \Psi \mapsto X^l \Psi \quad X^l \Psi : (i, \mathbf{x}) \mapsto x^l \psi_i(\mathbf{x}) . \quad (3.7)$$

Funktionen $f(X)$ der Operatoren X^l , zum Beispiel $e^{ik \cdot X}$, wirken durch Multiplikation mit $f(\mathbf{x})$

$$f(X) : \Psi \mapsto f(X) \Psi \quad f(X) \Psi : (i, \mathbf{x}) \mapsto f(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) . \quad (3.8)$$

Die Operatoren X^l sind nur auf Zuständen Ψ definiert, deren zugehörige Wellenfunktionen $\psi_i(\mathbf{x})$ nach Multiplikation mit x^l quadratintegrabel bleibt. Die Operatoren $e^{ik \cdot X}$ sind für alle $k \in \mathbb{R}^n$ im ganzen Hilbertraum definiert.

3.2 Transformationen des Ortes

Der Begriff Ortswellenfunktion überträgt sich zwanglos auf Mannigfaltigkeiten. Gleichung (3.3) gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen mit i -tem Spinmeßwert α_i im Bereich der Punkte zu finden, die zum Koordinatenintervall Δ gehören. Dieser Sachverhalt ist unabhängig vom verwendeten Koordinatensystem, wenn unter allgemeinen Koordinatentransformationen der Orte $\mathbf{x}'(\mathbf{x})$ die Wellenfunktion wie eine Halbdichte transformiert

$$\psi'_i(\mathbf{x}') = \left| \det \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}'} \right|^{\frac{1}{2}} \psi_i(\mathbf{x}(\mathbf{x}')) . \quad (3.9)$$

Dies definiert die zu invertierbaren Selbstabbildungen $T : \mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}' = T(\mathbf{x})$ der Mannigfaltigkeit gehörigen unitären Transformationen $U(T)$ von Zuständen. Bezeichnen wir mit dT die Jacobi-Matrix der partiellen Ableitungen

$$(dT)^k_l = \frac{\partial x'^k}{\partial x^l} \quad (3.10)$$

so schreiben sie sich mit $\Psi' = U(T)\Psi$ in (3.9) als

$$U(T)\Psi = |\det dT|^{-\frac{1}{2}} \Psi \circ T^{-1} \quad (3.11)$$

Die Operatoren $U(T)$ sind linear und unitär. Linearität in Ψ ist offensichtlich. Unitarität besagt, daß Skalarprodukte invariant bleiben. Sie ergibt sich aus der Definition von $U(T)$

und dem Integralsubstitutionssatz

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{U}\Phi | \mathbf{U}\Psi \rangle &= \sum_i \int d^n \mathbf{x}' (\mathbf{U}\Phi)_i^*(\mathbf{x}') (\mathbf{U}\Psi)_i(\mathbf{x}') \\ &= \sum_i \int d^n \mathbf{x}' \left| \det \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}'} \right| \phi_i^*(\mathbf{x}(\mathbf{x}')) \psi_i(\mathbf{x}(\mathbf{x}')) = \sum_i \int d^n \mathbf{x} \phi_i^*(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) = \langle \Phi | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Invertierbare Selbstabbildungen T der Mannigfaltigkeit bilden eine Gruppe mit Hintereinanderausführen der Transformationen als Gruppenmultiplikation und der identischen Abbildung als Einselement. Die unitären Transformationen (3.11) sind eine Darstellung dieser Gruppe im Hilbertraum, das heißt, sie sind lineare Transformationen des Hilbertraumes und genügen dem Multiplikationsgesetz

$$\mathbf{U}(T_2)\mathbf{U}(T_1) = \mathbf{U}(T_2 \circ T_1) , \quad (3.13)$$

das hintereinander ausgeführte Transformationen verknüpft.

Verwenden wir die Kettenregel

$$(dT_2 \cdot dT_1)^{k_l} = \frac{\partial x''^k}{\partial x'^m} \frac{\partial x'^m}{\partial x^l} = \frac{\partial x''^k}{\partial x^l} = (d(T_2 \circ T_1))^{k_l} \quad (3.14)$$

so folgt die Darstellungseigenschaft aus

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(T_2)\mathbf{U}(T_1)\Psi &= |\det dT_2|^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{U}(T_1)\Psi) \circ T_2^{-1} \\ &= |\det dT_2|^{-\frac{1}{2}} |\det dT_1|^{-\frac{1}{2}} \Psi \circ T_1^{-1} \circ T_2^{-1} \\ &= |\det dT_2 \cdot dT_1|^{-\frac{1}{2}} \Psi \circ (T_2 \circ T_1)^{-1} \\ &= |\det d(T_2 \circ T_1)|^{-\frac{1}{2}} \Psi \circ (T_2 \circ T_1)^{-1} = \mathbf{U}(T_2 \circ T_1)\Psi . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Wir betrachten eine einparametrische, kontinuierliche Gruppe T_α von Transformationen, zum Beispiel Drehungen oder Translationen, die so parametrisiert sei, daß $T_{\alpha+\beta} = T_\alpha T_\beta$ gilt. Dann gehört $\alpha = 0$ zur identischen Abbildung $T_0 = \text{id}$ und es gilt $(T_\alpha)^{-1} = T_{-\alpha}$. Variiert α , so durchläuft $T_\alpha \mathbf{x} = \mathbf{x}'(\alpha, \mathbf{x})$ für jedes festgehaltene \mathbf{x} als Funktion von α eine Kurve mit Tangentialvektoren

$$\frac{d(T_\alpha \mathbf{x})^m}{d\alpha} = \xi^m(T_\alpha(\mathbf{x})) . \quad (3.16)$$

Die Tangentialvektoren an diese Kurven definieren ein Vektorfeld, das wegen $T_{\alpha+\varepsilon}(\mathbf{x}) - T_\alpha(\mathbf{x}) = T_\alpha \circ (T_\varepsilon(\mathbf{x}) - T_0(\mathbf{x})) = (T_\varepsilon - T_0) \circ T_\alpha(\mathbf{x})$ von α und \mathbf{x} nur über $T_\alpha(\mathbf{x})$ abhängt. Bei \mathbf{x} kann es demnach durch Differenzieren für $\alpha = 0$ bestimmt werden oder durch Differenzieren und anschließende Transformation mit $T_{-\alpha}$.

$$\xi^m(\mathbf{x}) = \frac{d(T_\alpha \mathbf{x})^m}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = \frac{d(T_\alpha \mathbf{x})^m}{d\alpha} \Big|_{T_{-\alpha} \circ T_\alpha \mathbf{x}} \quad (3.17)$$

Das Vektorfeld $\xi^m(\mathbf{x})$ heißt infinitesimale Transformation des Ortes. Die Lösung $\mathbf{x}(\alpha)$ des zugehörigen Differentialgleichungssystem

$$\frac{d\mathbf{x}^m}{d\alpha} = \xi^m(\mathbf{x}(\alpha)) \quad (3.18)$$

definiert T_α als Abbildung der Anfangswerte $\mathbf{x}(0)$ auf $\mathbf{x}(\alpha)$.

$$T_\alpha(\mathbf{x}(0)) = \mathbf{x}(\alpha) \quad (3.19)$$

Differenzieren wir das Transformationsgesetz (3.11) für eine einparametrische, kontinuierliche Gruppe T_α bei $\alpha = 0$ oder entwickeln wir $\mathbf{x}'^m = \mathbf{x}^m + \alpha \xi^m$ und $U(T_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha N}$ nach α , so erhalten wir die infinitesimale Form

$$-\frac{i}{\hbar} (N\Psi)_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} (\partial_{x^m} \xi^m) \psi_i(\mathbf{x}) - \xi^m \partial_m \psi_i(\mathbf{x}) . \quad (3.20)$$

Dabei bezeichnet $N = i\hbar U^{-1} \partial_\alpha U$ den hermiteschen Operator, der die unitäre Transformation $U(T_\alpha)$ erzeugt

$$U(T_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha N} . \quad (3.21)$$

Er ist hermitesch, wie sich aus der Unitaritätsbedingung $U^\dagger = U^{-1}$ ergibt. Die Ableitung von $|\det dT_\alpha|^{-\frac{1}{2}}$ steuert in (3.20) den Term $-\frac{1}{2} (\partial_{x^m} \xi^m)$ bei, denn die Determinante $\det dT_\alpha$ hat die Entwicklung (D.5)

$$\det \frac{\partial x'^m}{\partial x^n} = 1 + \alpha \partial_{x^m} \xi^m + O(\alpha^2) . \quad (3.22)$$

Auf Mannigfaltigkeiten büßen die Komponenten X^k des Ortsoperators ihre Bedeutung ein, denn Koordinaten \mathbf{x} dienen nur der Bezeichnung der Orte, ihr Wert ist irrelevant. Auf dem Kreis zum Beispiel existiert kein hermitescher Ortsoperator: spinlose Zustände auf einem Kreis mit Umfang l sind Strahlen im Hilbertraum der l -periodische Ortswellenfunktionen $\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + l)$, die im Intervall $0 \leq x \leq l$ quadratintegrierbar sind. Es ist aber $x\psi(\mathbf{x})$ nicht periodisch. X ist kein Operator im Hilbertraum der Wellenfunktionen auf dem Kreis.

Daß X auf dem Kreis nicht existiert, ist die Auflösung des Rätsels, warum für einen normierten Impulseigenzustand auf dem Kreis $\psi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{l}} e^{i\frac{2\pi x}{l} n}$ mit Impuls $p = \frac{2\pi\hbar}{l} n$ der Erwartungswert von $[X, P] \stackrel{?}{=} i\hbar$ je nach Rechnung einmal $i\hbar$ und ein andermal 0 ist.

$$i\hbar \langle \Psi | \Psi \rangle \stackrel{?}{=} \langle \Psi | [X, P] \Psi \rangle = \langle \Psi | (XP - PX) \Psi \rangle = \langle \Psi | (Xp - pX) \Psi \rangle = 0$$

Untersucht man dieselben Rechenschritte statt auf dem Kreis auf der reellen Achse, so existieren zwar die hermiteschen Operatoren X und P , nicht aber ein normierter Eigenzustand zu P oder X .

Ortsmessungen auf dem Kreis messen Winkel und gehören zu einem unitären Operator

$$U : \Psi \mapsto U\Psi, \quad U\Psi : \mathbf{x} \mapsto e^{i\frac{2\pi}{l} x} \psi(\mathbf{x}), \quad (3.23)$$

aus dessen Eigenwerten $e^{i\lambda}$ sich der Ort $\mathbf{x} = \frac{\lambda \mathbf{l}}{2\pi}$ bis auf Vielfache von \mathbf{l} ablesen läßt.

Zu einem periodischen Potential $V(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = V(\mathbf{x})$ gehört der Operator $V\Psi(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$. Das Potential läßt sich als Fourierreihe $V(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{n} \cdot \frac{2\pi}{\mathbf{l}} \mathbf{x}}$ und der Operator daher als Reihe in \mathbf{U} darstellen

$$V = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \mathbf{U}^{\mathbf{n}} . \quad (3.24)$$

3.3 Translationen und Impuls

Die Forderung, daß Translationen $T_{\mathbf{a}} : \mathbf{x} \mapsto T_{\mathbf{a}}\mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{a}$ definiert werden können, und daß keine Translation außer $T_0 = \text{id}$ einen Punkt fest läßt, legt die möglichen Meßwerte von Ortsmessungen fest $\mathbb{D} = \mathbf{I} \times \mathbb{R}^n$, wobei n die Dimension des Raumes ist.

Translationen bilden gemäß (3.11) auf natürliche Art Zustände Ψ unitär auf verschobene Zustände $\mathbf{U}(T_{\mathbf{a}})\Psi$ ab. Es ist $\det(dT_{\mathbf{a}}) = 1$ und die transformierten Wellenfunktionen haben an der Stelle $T_{\mathbf{a}}\mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{a}$ denselben Wert wie ψ_i am Urbild \mathbf{x} .

$$(\mathbf{U}(T_{\mathbf{a}})\Psi)_i(\mathbf{x}) = \psi_i(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \quad (3.25)$$

Die infinitesimale Form (3.20) dieser Transformation erhalten wir, wenn wir die einparametrischen Transformationen $T_{\alpha \cdot \mathbf{a}}$ bei $\alpha = 0$ differenzieren. Das erzeugende Vektorfeld $\xi^k = \mathbf{a}^k$ ist \mathbf{x} -unabhängig und daher divergenzfrei $\partial_{x^k} \xi^k = 0$. Die rechte Seite von (3.20) ist also einfach $-\mathbf{a}^k \partial_k \psi_i(\mathbf{x})$. Demnach ist der Operator \mathbf{N} , der die unitäre Transformation $\mathbf{U}(T_{\alpha})$ erzeugt, linear in \mathbf{a}^k : $\mathbf{N} = P_k \mathbf{a}^k$. Dabei sind die erzeugenden Operatoren P_k , die zu Translationen in Koordinatenrichtung x^k gehören, definitionsgemäß die zu den Koordinaten gehörigen Impulse P_k . Koeffizientenvergleich bei den Parametern \mathbf{a}^k in (3.20) ergibt, daß der Impulsoperator die Ortswellenfunktion differenziert.

$$(P_k \Psi)_i(\mathbf{x}) = -i\hbar \partial_{x^k} \psi_i(\mathbf{x}) \quad (3.26)$$

Die Operatoren P_k erzeugen die unitäre Transformation $\mathbf{U}(T_{\mathbf{a}})$ (3.25), die zu endlichen Translationen gehört.

$$\mathbf{U}(T_{\mathbf{a}}) = e^{-\frac{i}{\hbar} P \cdot \mathbf{a}} \quad (3.27)$$

Der Impulsoperator ist auf Vektoren im Hilbertraum definiert, die zu differenzierbaren Wellenfunktionen mit quadratintegrabler Ableitung gehören. Die Operatoren $\mathbf{U}(T_{\mathbf{a}}) = e^{-\frac{i}{\hbar} P \cdot \mathbf{a}}$ sind für alle $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ im ganzen Hilbertraum definiert, wenn \mathbb{D} Translationen zuläßt.

Auf Vektoren, die mehrfaches Anwenden von Ortsoperator und Impulsoperator gestatten, vertauschen wegen $x^k x^l = x^l x^k$ und $\partial_{x^k} \partial_{x^l} = \partial_{x^l} \partial_{x^k}$ die Komponenten des Ortsoperators und ebenso die Komponenten des Impulsoperators. Orts- und Impulsoperator erfüllen wegen

$$((X^k P_l - P_l X^k)\Psi)_i(\mathbf{x}) = -i\hbar x^k \partial_{x^l} \psi_i(\mathbf{x}) + i\hbar \partial_{x^l} (x^k \psi_i(\mathbf{x})) = (i\hbar \delta_l^k \Psi)_i(\mathbf{x})$$

die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[X^k, X^l] = 0, \quad [P_k, P_l] = 0, \quad [X^k, P_l] = i\hbar \delta_l^k . \quad (3.28)$$

Daher können die Ortsunschärfe ΔX^k und die Impulsunschärfe ΔP_k in derselben Richtung nicht durch Präparation des Zustandes gleichzeitig klein gemacht werden, denn aus der allgemeinen Unschärferelation (2.19) und der Heisenbergschen Vertauschungsrelation folgt die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta X^k \Delta P_l \geq \frac{\hbar}{2} \delta_l^k . \quad (3.29)$$

Es kann durchaus in zwei Richtungen durch eine Lochblende der Ort und senkrecht dazu in der dritten Richtung der Impuls scharf gemacht werden. So präpariert man Teilchenstrahlen. Engt man die Lochblende ein, so macht sich der unscharfe Impuls in diesen zwei Richtungen als Beugung an der Lochblende bemerkbar.

3.4 Drehungen und Bahndrehimpuls

Drehungen sind lineare Transformationen des Orts $D : x \mapsto Dx$, die alle Längenquadrate invariant lassen.

$$\sum_k (D^k_l x^l)^2 = D^k_l D^k_m x^l x^m = x^k x^k \quad \forall x \Leftrightarrow D^k_l D^k_m = \delta_{lm} \quad (3.30)$$

Die zugehörigen Matrizen D erfüllen also die Orthogonalitätsrelation

$$D^T = D^{-1} . \quad (3.31)$$

Sie bilden die Gruppe $O(n)$ der orthogonalen Transformationen des \mathbb{R}^n . Hierbei und im folgenden gestatten wir uns den unter Physikern verbreiteten, bequemen Sprachgebrauch und unterscheiden nicht ausdrücklich zwischen den Transformationen und den zugehörigen Matrizen.

Aus (3.31) folgt $\det D = (\det D)^{-1}$, also $\det D = \pm 1$. Orthogonale Transformationen, deren Determinante den speziellen Wert 1 hat, bilden die Untergruppe $SO(n)$ der speziellen orthogonalen Transformationen.

Jede einparametrische Untergruppe von Drehungen ist eine Schar von Matrizen $D_\alpha = e^{\alpha\omega}$ mit erzeugender Matrix ω , die wegen $D_\alpha^{-1} = e^{-\alpha\omega} = D_\alpha^T = e^{\alpha\omega^T}$ (3.31) antisymmetrisch ist.

$$(\omega)^k_l = -(\omega)^l_k \quad (3.32)$$

In $n=3$ Raumdimensionen ist die Matrix ω daher eine Linearkombination von drei antisymmetrischen Basismatrizen τ_m , deren Matrixelemente wir mit dem ε -Tensor schreiben

$$\omega^k_l = \varphi^m \varepsilon_{kml} , \quad (\tau_m)^k_l = \varepsilon_{kml} . \quad (3.33)$$

Ist $\vec{\varphi} = \vec{e}$ ein Einheitsvektor, so ist α der Drehwinkel, denn $D_\alpha = e^{\alpha\omega}$ hat folgende Eigenschaften: ω wirkt auf jeden Vektor \vec{v} wie ein Kreuzprodukt $\omega\vec{v} = \vec{e} \times \vec{v}$. Daher verschwindet $\omega\vec{e}$ und \vec{e} markiert die Drehachse $D_\alpha\vec{e} = \vec{e}$. Ein zu \vec{e} senkrechter Einheitsvektor \vec{n}_1 wird durch ω auf den auf beiden senkrecht stehenden Einheitsvektor \vec{n}_2 abgebildet.

$$\omega\vec{n}_1 = \vec{n}_2 , \quad \omega\vec{n}_2 = -\vec{n}_1 . \quad (3.34)$$

Wendet man die Reihe $e^{\alpha\omega}$ auf \vec{n}_1 und \vec{n}_2 an und trennt man die geraden und ungeraden Potenzen von ω , so erhält man die Kosinus- und Sinusreihe

$$e^{\alpha\omega}\vec{n}_1 = \vec{n}_1 \cos \alpha + \vec{n}_2 \sin \alpha, \quad e^{\alpha\omega}\vec{n}_2 = -\vec{n}_1 \sin \alpha + \vec{n}_2 \cos \alpha. \quad (3.35)$$

Insbesondere führt eine Drehung um 2π zur Ausgangslage zurück.

Das zur Transformation $x' = D_\alpha x$ gehörige Vektorfeld $\xi(x) = \partial_\alpha D_\alpha x|_{\alpha=0}$ ist $\xi^k = \omega^k_l x^l = (\vec{\varphi} \times \vec{x})^k$. Das Vektorfeld ist divergenzfrei $\partial_{x^k} \xi^k = \delta_k^l \omega^k_l = 0$ und die infinitesimale Transformation (3.20) der Wellenfunktion ist

$$-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{N}\Psi)_i(x) = -\omega^k_l x^l \partial_{x^k} \psi(x) = -\varphi^m \varepsilon_{km}^l x^l \partial_{x^k} \psi(x). \quad (3.36)$$

Die rechte Seite ist linear in φ^m , daher ist der Operator \mathbf{N} linear in φ^m und von der Form $\mathbf{N} = L_m \varphi^m$. Definitionsgemäß sind die hier auftretenden Operatoren L_m die Komponenten des Bahndrehimpulses: sie erzeugen Drehungen um die Koordinatenachsen, $\vec{L} \cdot \vec{e}$ erzeugt Drehungen um \vec{e} . Der Koeffizientenvergleich von φ^m ergibt

$$(L_m \Psi)_i(x) = -i\hbar \varepsilon_{mkl} x^k \partial_{x^l} \psi_i(x), \quad L_m = \varepsilon_{mkl} X^k P_l. \quad (3.37)$$

Mit der Heisenbergalgebra (3.28) folgt, daß die Komponenten des Bahndrehimpulses die Drehimpulsalgebra (2.45) erfüllen.

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} [X^k P_l, X^m P_n] = \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} ([X^k, X^m P_n] P_l + X^k [P_l, X^m P_n]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (X^m \delta_n^k P_l - X^k \delta_l^m P_n) = i\hbar (\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmk} - \varepsilon_{imk} \varepsilon_{jkl}) X^m P_l \\ &= i\hbar (\delta_{im} \delta_{lj} - \delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{ij} \delta_{ml} - \delta_{il} \delta_{mj}) X^m P_l = i\hbar \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} X^m P_n \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Die endliche, unitäre Transformation, die zu einer Drehung um den Winkel α um die Drehachse \vec{e} gehört, ist

$$(\mathbf{U}(\vec{e}, \alpha)\Psi)_i(x) = (\exp(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e})\Psi)_i(x) = \psi_i(D_{\vec{e}, \alpha}^{-1}(x)). \quad (3.39)$$

Drehungen um $\alpha = 2\pi$ bilden Orte auf sich ab, $D_{\vec{e}, 2\pi}^{-1}x = x$. Für Bahndrehimpulse (3.37) gilt daher einschränkend $\mathbf{U}(\vec{e}, 2\pi) = \exp(-\frac{2\pi i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}) = \mathbb{1}$. Angewendet auf L_3 -Eigenzustände heißt dies für Drehungen um die z-Achse $\exp(-2\pi i m) = 1$. Daher können die m -Quantenzahlen des Bahndrehimpulses und in der Folge auch seine l -Quantenzahlen nur ganzzahlige Werte haben.

3.5 Kontinuierliche Basis

Führen wir geeignet verallgemeinerte Basiselemente $\Lambda_{i,x}$ ein, so können wir Zustände Ψ mit den Ortswellenfunktionen als Entwicklungskoeffizienten schreiben.

$$\Psi = \sum_i \int d^n x \Lambda_{i,x} \psi_i(x) \quad (3.40)$$

Das Skalarprodukt (3.60) mit einem ebenso zerlegten Vektor Φ legt die Skalarprodukte der Basiselemente fest.

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \int d^n x d^n x' \phi_i^*(x) \langle \Lambda_{i,x} | \Lambda_{j,x'} \rangle \psi_j(x') &= \sum_i \int d^n x \phi_i^*(x) \psi_i(x) \quad \forall \Phi, \Psi \\ \Leftrightarrow \langle \Lambda_{i,x} | \Lambda_{j,x'} \rangle &= \delta^n(x - x') \delta_j^i \end{aligned} \quad (3.41)$$

Man liest hieraus ab, daß $\Lambda_{i,x}$ keine endliche Länge hat und kein Vektor im Hilbertraum ist, sondern daß $\Lambda_{i,x}$ eine Distribution ist. Erst das Integral (3.40) mit den quadratintegrierbaren Wellenfunktionen $\psi_i(x)$ ergibt einen Vektor im Hilbertraum. Verallgemeinerte Basiselemente, deren Skalarprodukte wie in (3.41) durch δ -Funktionen gegeben sind, nennt man kontinuierlich normiert.¹

Die Ortswellenfunktionen $\psi_i(x)$ sind wegen (3.41) die Skalarprodukte von Ψ mit der kontinuierlich normierten Ortsbasis

$$\psi_i(x) = \langle \Lambda_{i,x} | \Psi \rangle . \quad (3.42)$$

Insbesondere sind die Ortswellenfunktionen der Basiselemente $\Lambda_{j,x'}$ Deltafunktionen $\delta^n(x - x') \delta_j^i$. Die Basiselemente sind verallgemeinerte Eigenvektoren des Ortsoperators

$$X^k \Lambda_{j,x'} = x'^k \Lambda_{j,x'} . \quad (3.43)$$

Setzen wir in (3.40) ein, so ergibt sich in Bracket-Schreibweise

$$|\Psi\rangle = \sum_i \int d^n x |\Lambda_{i,x}\rangle \langle \Lambda_{i,x} | \Psi \rangle . \quad (3.44)$$

Es läßt sich also analog zu (1.22) mit den Basiselementen $\Lambda_{i,x}$ die Eins kontinuierlich zerlegen.

$$\mathbb{1} = \sum_i \int d^n x |\Lambda_{i,x}\rangle \langle \Lambda_{i,x}| \quad (3.45)$$

Die verallgemeinerten Eigenzustände $\Gamma_{j,p}$ des Impulsoperators

$$P_k \Gamma_{j,p} = p_k \Gamma_{j,p} \quad (3.46)$$

zu den Eigenwerten p_k , $p \in \mathbb{R}^n$, bilden wie die Ortszustände $\Lambda_{i,k}$ eine kontinuierliche Basis. Ihre Ortswellenfunktionen $(\Gamma_{j,p})_i(x) = \langle \Lambda_{i,x} | \Gamma_{j,p} \rangle$ sind Lösungen der Eigenwertgleichung

$$-i\hbar \partial_{x^k} (\Gamma_{j,p})_i(x) = p_k (\Gamma_{j,p})_i(x) \quad (3.47)$$

¹Die mathematische Untersuchung von selbstadjungierten Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum vermeidet solche kontinuierlich normierte Zustände, sondern arbeitet mit Scharen von Projektionsoperatoren, $E(\lambda)$, die auf die Unterräume projizieren, die zu Spektralwerten kleiner gleich λ gehören und sich mit der Kontinuumsbasis als $E(\lambda) = \int^\lambda d\mu |\Lambda_\mu\rangle \langle \Lambda_\mu|$ schreiben würden.

und daher, nach geeigneter Wahl von Normierungsfaktoren c_j^i , durch

$$\langle \Lambda_{i,x} | \Gamma_{j,p} \rangle = (\Gamma_{j,p})_i(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} \delta_j^i e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \quad (3.48)$$

gegeben. Wie man mit

$$\int \frac{d^n x}{(2\pi)^n} e^{-ix \cdot (y-y')} = \delta^n(y-y') \quad (3.49)$$

sieht, sind die Basiselemente $\Gamma_{j,p}$ kontinuierlich normiert

$$\langle \Gamma_{i,p} | \Gamma_{j,p'} \rangle = \delta^n(p-p') \delta_j^i \quad (3.50)$$

und bilden eine kontinuierliche Basis, mit der man die Eins zerlegen kann.

$$\mathbb{1} = \sum_i \int d^n p |\Gamma_{i,p}\rangle \langle \Gamma_{i,p}| \quad (3.51)$$

Analog zur Ortswellenfunktion definiert man die Impulswellenfunktion² eines Zustandes Ψ als Skalarprodukt mit der kontinuierlichen Basis von Impulseigenzuständen

$$\tilde{\psi}_j(p) = \langle \Gamma_{j,p} | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n x \langle \Gamma_{p,j} | \Lambda_{i,x} \rangle \langle \Lambda_{i,x} | \Psi \rangle. \quad (3.52)$$

Die Impulswellenfunktion ist also die Fouriertransformierte der Ortswellenfunktion und, bis auf ein Vorzeichen, umgekehrt

$$\tilde{\psi}_i(p) = \int d^n x \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \psi_i(x), \quad \psi_i(x) = \int d^n p \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \tilde{\psi}_i(p). \quad (3.53)$$

Wir können also einen Zustand Ψ statt durch die Ortswellenfunktionen $\psi_i(x)$ durch die Impulswellenfunktionen $\tilde{\psi}_i(p)$ darstellen und daraus, wenn wir wollen, die Ortswellenfunktion rekonstruieren.

Zu $P_k \Psi$ gehört wegen $\langle \Gamma_{j,p} | P_k \Psi \rangle = p_k \langle \Gamma_{j,p} | \Psi \rangle$ die Impulswellenfunktion $p_k \tilde{\psi}_j(p)$. Zu $X^k \Psi$ gehören die Impulswellenfunktionen $i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_j(p)$

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_{j,p} | X^k \Psi \rangle &= \sum_i \int d^n x \langle \Gamma_{j,p} | \Lambda_{i,x} \rangle \langle \Lambda_{i,x} | X^k \Psi \rangle \\ &= \int \frac{d^n x}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} x^k \psi_j(x) = i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_j(p), \\ (P_k \Psi) \sim_i(p) &= p_k \tilde{\psi}_i(p), \quad (X^k \Psi) \sim_i(p) = i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_i(p). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Das Betragsquadrat der Impulswellenfunktion ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für Impulsmessungen. Die Wahrscheinlichkeit, den Impuls im Intervall Δ_p zu finden und den i -ten, diskreten Meßwert a_i zu messen, ist

$$w(i, \Delta_p, \Psi) = \int_{\Delta_p} d^n p |\tilde{\psi}_i(p)|^2. \quad (3.55)$$

² Zur Unterscheidung von Ortswellenfunktionen markieren wir Impulswellenfunktionen durch „ \sim “.

Der Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$ dreht die Argumente der Impulswellenfunktion $\tilde{\psi}_i(\mathbf{p})$ genauso wie die Ortsargumente der Ortswellenfunktion (3.39).

$$(\mathbf{L}_m \Psi) \sim_i(\mathbf{p}) = -i\hbar \varepsilon_{mkl} p^k \frac{\partial}{\partial p^l} \tilde{\psi}_i(\mathbf{p}) \quad (3.56)$$

$$(\mathbf{U}(\vec{e}, \alpha) \Psi) \sim_i(\mathbf{p}) = (\exp(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}) \Psi) \sim_i(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}_i(\mathbf{D}_{\vec{e}, \alpha}^{-1}(\mathbf{p})) . \quad (3.57)$$

3.6 Mehrteilchenzustände

Die Berücksichtigung mehrerer kontinuierlicher Meßwerte, wie etwa die sechs Ortskoordinaten eines Zweiteilchensystems, und die Berücksichtigung zusätzlicher diskreter Meßwerte, wie zum Beispiel der Spins der beiden Teilchen, ist offensichtlich. Solch ein Zweiteilchenzustand Ψ ordnet sechs kontinuierlichen Meßwerten und zwei diskreten Quantenzahlen eine Wahrscheinlichkeitsamplitude zu

$$\Psi : (i, \vec{x}, j, \vec{y}) \mapsto \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) \quad (3.58)$$

und wird durch Wellenfunktionen $\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})$ angegeben. Dabei ist

$$w(i, \vec{x}, d^3x, j, \vec{y}, d^3y, \Psi) \approx |\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})|^2 d^3x d^3y \quad (3.59)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, das erste Teilchen mit Spin i bei \vec{x} im Bereich d^3x und das zweite Teilchen mit Spin j bei \vec{y} im Bereich d^3y zu messen. Aus der Wahrscheinlichkeitsformel liest man das Skalarprodukt ab

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_{ij} \int d^3x d^3y \phi_{ij}^*(\vec{x}, \vec{y}) \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) . \quad (3.60)$$

Es handelt sich um identische Teilchen, wenn für alle Zweiteilchenzustände die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen bei \vec{x} mit Spin i und das zweite Teilchen bei \vec{y} mit Spin j zu messen, mit derjenigen übereinstimmt, das erste Teilchen bei \vec{y} mit Spin j und das zweite Teilchen bei \vec{x} mit Spin i zu messen, wenn also für alle Zustände der zwei identischen Teilchen die Wellenfunktion $\psi_{ji}(\vec{y}, \vec{x})$ mit $\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})$ bis auf eine Phase übereinstimmt. Ist diese Phase 1 , heißen die Teilchen Bosonen, ist sie -1 heißen sie Fermionen. Genauer gesagt sind bei n -Teilchenzuständen identischer Bosonen die Wellenfunktionen invariant unter jeder Permutation $\pi : (1, \dots, n) \mapsto (\pi(1), \dots, \pi(n))$.

$$(\psi_{\text{Boson}})_{i_1, \dots, i_n}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = (\psi_{\text{Boson}})_{i_{\pi(1)}, \dots, i_{\pi(n)}}(\mathbf{x}_{\pi(1)}, \dots, \mathbf{x}_{\pi(n)}) \quad (3.61)$$

Unter ungeraden Permutationen π , $\text{sign}(\pi) = -1$, gehen n -Teilchen-Wellenfunktionen identischer Fermionen in ihr Negatives über.

$$(\psi_{\text{Fermion}})_{i_1, \dots, i_n}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \text{sign}(\pi) (\psi_{\text{Fermion}})_{i_{\pi(1)}, \dots, i_{\pi(n)}}(\mathbf{x}_{\pi(1)}, \dots, \mathbf{x}_{\pi(n)}) \quad (3.62)$$

Als Konsequenz unterliegen Fermionen dem Pauli-Verbot, daß Mehrfermionenzustände nicht ein Produkt gleicher Einteilchenzustände enthalten können oder, umgangssprachlich, daß nicht zwei Fermionen in demselben Zustand sein können. Es kann aber zum Beispiel die Grundzustandswellenfunktion der zwei Elektronen im Heliumatom ein Produkt derselben Ortswellenfunktion χ sein, weil sie in der Spinquantenzahl antisymmetrisch ist

$$\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) = \varepsilon_{ij} \chi(\vec{x}) \chi(\vec{y}), \quad \varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}, \quad \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = 1, \quad i, j \in \{\uparrow, \downarrow\}. \quad (3.63)$$

Slater-Determinanten sind total antisymmetrische n -Teilchenzustände. Sie entstehen aus einem Produkt (5.1) von orthonormierten Einteilchenzuständen χ_i , das antisymmetrisiert wird.

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \chi_{\pi(1)} \otimes \chi_{\pi(2)} \otimes \cdots \otimes \chi_{\pi(n)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \chi_{i_1} \otimes \chi_{i_2} \otimes \cdots \otimes \chi_{i_n} \end{aligned} \quad (3.64)$$

Das Pauli-Verbot und die Tatsache, daß Elektronen Spin $1/2$ haben, machen die Grundzüge des Periodensystem der Elemente verständlich, wenn man das Wasserstoffatom verstanden hat, und sind grundlegend für die Chemie. Ebenso wird die Festkörperphysik vom Pauli-Verbot beherrscht zum Beispiel mit der Folge, daß im Grundzustand Elektronen alle Einteilchenzustände bis zur Fermikante besetzen.

Fermionen haben halbzahliges Spin, Bosonen haben ganzzahliges Spin. Dies ist zunächst ein experimenteller Befund. Als Spin-Statistik-Theorem folgt dieser Sachverhalt aus den Grundannahmen relativistischer Quantenmechanik.

Bei Zuständen identischer Teilchen existieren keine Operatoren, die individuelle Quantenzahlen, etwa den Impuls \mathbf{p}_1 des ersten Teilchens messen. Denn die Eigenzustände Λ der Meßoperatoren unterliegen ebenfalls der Bose- oder Fermisymmetrie und die Operatoren bewahren die Bose- oder Fermisymmetrie der Zustände. Die individuellen Quantenzahlen \mathbf{p}_1 und \mathbf{p}_2 kann man nur bis auf Teilchenpermutation aus den Eigenwerten der symmetrischen Operatoren $\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$ und $\mathbf{P}_1^2 + \mathbf{P}_2^2$ rekonstruieren.

4 Zeitentwicklung, Grundzustandsenergie

4.1 Schrödingergleichung

Wir können in Abbildung (1.1) den Abstand zwischen Quelle und Apparat und damit die Flugzeit variieren und fragen, wie die Verteilung der Meßergebnisse von der Zeit abhängt. Diskutieren wir dies zunächst für reine Zustände. Am Eingang des Meßapparates liegt ein Zustand $\Psi(t)$ vor, der von der Flugdauer t abhängt. Die Zeitentwicklung bildet Strahlen im Hilbertraum $\Psi(0)$ auf Strahlen $\Psi(t)$ ab. Verwenden wir normierte Vektoren, um die Strahlen zu repräsentieren, so muß für alle Zeiten

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad (4.1)$$

gelten und eine Phasenänderung von $\Psi(0)$ darf höchstens zu einer Phasenänderung von $\Psi(t)$ führen. Mit dieser Einschränkung bildet die Zeitentwicklung die Einheitskugel im Hilbertraum auf sich ab. Differenzieren wir nach der Zeit, so erhalten wir

$$\langle \partial_t \Psi(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle = 0 . \quad (4.2)$$

Die Zeitentwicklungsgleichung sollte eine Differentialgleichung erster Ordnung sein, sonst würde nicht Ψ das System vollständig charakterisieren und zusätzliche, nicht in Ψ enthaltene Daten wie $\partial_t \Psi$ könnten präpariert werden und würden im Laufe der Zeitentwicklung meßbar.

Der eigentliche Inhalt des Superpositionsprinzips der Quantenmechanik ist die Annahme, daß die Zeitentwicklung linear in Ψ ist. Mit dieser Annahme postuliert man die Schrödingergleichung.

$$i\hbar \partial_t \Psi = H\Psi \quad H = H^\dagger \quad (4.3)$$

Denn wenn $\partial_t \Psi = O\Psi$ für irgendeinen linearen Operator O gilt, so ist er nach (4.2) antihermitesch. Die Schrödingergleichung drückt diesen Sachverhalt nach Abspalten von i und einem maßsystemabhängigen Faktor \hbar , dem Wirkungsquantum, aus. Der Hamiltonoperator H erzeugt die Zeitentwicklung. Er hat die Dimension einer Energie.

Es ist mit den Grundstrukturen der Quantenmechanik durchaus verträglich, daß bei physikalischen Systemen der Zustand zur Zeit t nichtlinear vom Anfangszustand $\Psi(0)$ abhängt und durch eine einparametrische Schar invertierbarer Abbildungen $\Phi_t : \Psi(0) \mapsto \Psi(t)$ gegeben ist, die Strahlen des Hilbertraumes auf Strahlen abbildet

$$\Phi_t : \lambda \cdot \Psi \mapsto f_t(\lambda, \Psi) \cdot \Phi_t(\Psi) , \quad (\Psi \neq 0 , \lambda \neq 0) , \quad (4.4)$$

wobei der komplexe Faktor $f_t(\lambda, \Psi) \in \mathbb{C}$ für nichtverschwindendes λ nicht Null wird. Die zugehörigen, allgemeineren Zeitentwicklungsgleichungen solcher nichtlinearer Quantenmechanik heißen „nichtlineare Schrödingergleichung“. Beispielsweise wird die Zeitentwicklung eines geladenen Teilchens, das in leitenden Flächen Spiegelladungen beeinflusst, zutreffend von einer nichtlinearen Schrödingergleichung beschrieben, wenn man die Spiegelladung durch die Wellenfunktion des Teilchens ausdrückt.

Allerdings verletzt nichtlineare Zeitentwicklung den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, daß die Entropie eines abgeschlossenen Systems im Laufe der Zeit nicht abnimmt (Seite 94). Nichtlineare Schrödingergleichungen beschreiben daher nur Systeme, die nicht abgeschlossen sind. Wir beschränken unsere Darstellung auf lineare Quantenmechanik, deren Zeitentwicklung durch einen hermiteschen Hamiltonoperator gegeben ist.

In einem Gemisch $\rho = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|$ ändern sich als Funktion der Zeit die Zustände Ψ_j . Die Wahrscheinlichkeiten p_j sind die Produktionswahrscheinlichkeiten, mit der diese Zustände im Gemisch vorliegen. Sie ändern sich nicht durch Schrödingersche Zeitentwicklung.

$$\rho(t) = \sum_j p_j |\Psi_j(t)\rangle\langle\Psi_j(t)| \quad (4.5)$$

Differenziert man nach der Zeit, und beachtet man, daß Bra-Vektoren antilinear sind (1.13) und demnach

$$-i\hbar\partial_t\langle\Psi(t)| = \langle i\hbar\partial_t\Psi(t)| = \langle H\Psi(t)| \quad (4.6)$$

erfüllen, so erhält man aus der Schrödingergleichung (4.3) für die Zeitentwicklung der Dichtematrix die von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\rho = H\rho - \rho H = [H, \rho] . \quad (4.7)$$

Es gehört zu den Besonderheiten der Quantenmechanik, daß die Zeit nicht an den physikalischen Systemen der Abbildung (1.1) gemessen wird, sondern daß die Zeit ebenso wie der Meßapparat zur Außenwelt gehört. Durch Messen eines Zustandes kann man nicht sagen, wie spät es ist, auch wenn man durch Verfolgen der Entwicklung und Vergleich mit Uhren durchaus sagen kann, wieviel Zeit zwischen zwei Ereignissen vergangen ist.

Es gibt in der Quantenmechanik keinen Operator, der die Zeit mißt. Das hat die erfreuliche Konsequenz, daß es keine Eigenzustände zu einem Zeitoperator gibt. Diese Zustände wären zu einer Zeit und zu keiner anderen, für sie würde die Zeit nicht laufen.

Aus der allgemeinen Unschärferelation (2.19) und der Schrödingergleichung folgt eine Zeit-Energie-Unschärferelation, wenn man als Zeitunschärfe Δt diejenige Zeit definiert, die in einem Zustand vergeht, bis sich der Erwartungswert $\langle A \rangle$ um die Unschärfe von A geändert hat.

$$\Delta t = \frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \quad (4.8)$$

Es gilt nämlich wegen (2.19) und (4.3)

$$\Delta A \Delta H \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| \quad (4.9)$$

und mit unserer Definition von Δt , unabhängig davon, mit welchem Apparat A man die Zeit mißt,

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (4.10)$$

Die Variable t in zeitabhängigen Ortswellenfunktionen ist auch in relativistischer Quantenmechanik grundverschieden von den Ortsvariablen x . Mehrteilchenzustände haben Wellenfunktionen mit mehreren Ortsvariablen aber mit nur einer Zeit. Über t wird im Skalarprodukt nicht integriert, die Wahrscheinlichkeit $w(\Delta, \Psi(t))$ ist nicht eine Wahrscheinlichkeit, einen Meßwert t im Zeitintervall dt zu finden. Vielmehr parametrisiert t die Zustände $\Psi(t)$ zwischen Austritt aus der Quelle bis zum Erreichen des Meßapparates. Wo genau die Quelle aufhört und der Meßapparat anfängt, ist dabei unerheblich. Der Aufbau in Bild (1.1) verändert sich nicht wesentlich, wenn wir einen Teil der Laufstrecke zur Quelle und einen anderen Teil zum Apparat zählen. Die Zeit zwischen Präparation des Zustands und Messung ist positiv.

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig und ist zu Beginn der Zustand $\Psi(t = 0)$ Eigenzustand zu H , so sind die Wahrscheinlichkeiten für alle Meßwerte zeitunabhängig, denn aus

$$i\hbar \partial_t \Psi = H\Psi = E\Psi \quad (4.11)$$

folgt $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(0)$ und der zu $\Psi(t)$ gehörige Strahl im Hilbertraum ändert sich nicht. Energieeigenzustände heißen daher auch stationäre Zustände.

Vertauscht der zeitunabhängige Hamiltonoperator mit einem hermiteschen Operator A ,

$$[H, A] = 0, \quad (4.12)$$

so ändert sich die Wahrscheinlichkeit $w(i, A, \Psi(t))$ (1.1) für den i -ten Meßwert α_i nicht mit der Zeit. Denn der zum Meßwert gehörige, normierte Eigenzustand Λ_i kann zeitunabhängig und als Eigenzustand zu H gewählt werden (2.24), $H\Lambda_i = E_i\Lambda_i$. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle$ ändert sich daher nur um eine Phase

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle &= \langle \Lambda_i | H\Psi(t) \rangle = \langle H\Lambda_i | \Psi(t) \rangle = E_i \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle, \\ \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} \langle \Lambda_i | \Psi(0) \rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Ist insbesondere $\Psi(0)$ Eigenzustand zu A zum Meßwert α , so bleibt er Eigenzustand und die Quantenzahl α ist eine Erhaltungsgröße. Hierauf beruht die überragende Bedeutung von Energie-, Impuls- und Drehimpulsoperatoren, denn außerhalb von Wechselwirkungszonen, das heißt vor und nach Streuung, sind Energie, Impuls und Drehimpuls der Stoßpartner erhalten.

Wenn der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist und wenn man sein Spektrum $\{E_1, E_2, \dots, E_i, \dots\}$ und seine Eigenzustände $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_i, \dots$ kennt, so ist das Problem, die Zeitentwicklung eines allgemeinen Zustands zu bestimmen, dazu vereinfacht, die Komponenten des Anfangszustands in der normierten Eigenbasis des Hamiltonoperators zu bestimmen und den Zustand zur späteren Zeit mit diesen Komponenten zusammenzusetzen

$$\Psi(t) = \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} \Lambda_i \psi_i, \quad \psi_i = \langle \Lambda_i | \Psi(0) \rangle. \quad (4.14)$$

Zu gegebenem Hamiltonoperator gehört daher die Standardaufgabe, das Spektrum und die Eigenzustände zu bestimmen.

Die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators

$$(\mathbf{H} - \mathbf{E}_i)\Lambda_i = 0 \quad (4.15)$$

heißt zeitunabhängige Schrödingergleichung. Trotz weitverbreiteter, anderer Meinung erlaubt sie nicht, auszurechnen, in welchem Zustand sich das quantenmechanische System befindet, denn quantenmechanische Systeme müssen sich nicht in Energieeigenzuständen befinden. Zum Beispiel sind instabile Teilchen oder Wellenpakete freier Teilchen keine Energieeigenzustände. Allerdings trennen sich, wenn man genügend wartet, verschiedene, durch eine endliche Energiedifferenz getrennte Energieanteile, wenn sie verschieden schnell sind. Auf diese Art präparieren sich häufig Energieeigenzustände von selbst.

Handelt es sich bei dem Zustand um ein Teilchen ohne Spin, das sich in einer Dimension bewegt, so kann der allgemeinste Zustand als Linearkombination von Ortseigenzuständen Λ_x mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ als Entwicklungskoeffizient (3.40) geschrieben werden

$$\Psi = \int dx \Lambda_x \psi(x) . \quad (4.16)$$

Der Hamiltonoperator für die Bewegung im Potential besteht aus kinetischer Energie $\frac{p^2}{2m}$ und potentieller Energie $V(X)$. Auf die Ortswellenfunktion wirkt der Impulsoperator als Ableitung $(P\Psi)(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$ (3.26) und das Potential multipliziert die Ortswellenfunktion $(V\Psi)(x) = V(x)\psi(x)$ (3.8). Also lautet die Eigenwertgleichung $(\mathbf{H} - \mathbf{E})\Psi = 0$ auf Ortswellenfunktionen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E\right)\psi(x) = 0 . \quad (4.17)$$

Die Lösungen müssen normierbar sein, wenn ihnen Vektoren im Hilbertraum der quadratintegriblen Wellenfunktionen entsprechen sollen. Zusätzlich sind aber auch alle Lösungen interessant, die für $x \rightarrow \pm\infty$ nicht anwachsen. Denn aus solchen verallgemeinerten Lösungen lassen sich normierte Wellenpakete Ψ zusammensetzen, die der Eigenwertgleichung mit jeder vorgegebenen Genauigkeit $\varepsilon > 0$ nahe kommen, $\|(\mathbf{H} - \mathbf{E})\Psi\|^2 < \varepsilon \|\Psi\|^2$. Zum Beispiel sind für verschwindendes Potential die verallgemeinerten Impulseigenzustände $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ verallgemeinerte Energieeigenzustände mit $E = \frac{p^2}{2m}$. Sie gehören zum kontinuierlichen Spektrum der kinetischen Energie, das aus den reellen, nichtnegativen Zahlen $E \geq 0$ besteht.

Um die mathematischen Schwierigkeiten klein zu halten, untersucht man vorzugsweise die Eigenwertgleichung (4.17) für vereinfachte Potentiale, wie den Topf oder die Schwelle.

4.2 Schrödingerbild, Heisenbergbild

Es läßt sich in der Quantenmechanik nicht entscheiden, ob die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Meßwerten sich ändert, weil sich der Zustand Ψ bei unverändertem Meßapparat

im Laufe der Zeit ändert, oder weil sich die Meßapparate ändern und die Zustände unverändert bleiben.

Im Schrödingerbild, das wir bisher verwendet haben, ordnet man die Zeitentwicklung den Zuständen zu und verwendet zeitlich unveränderte Meßoperatoren.

Sei als Funktion der Zeit t eine Schar $U(t)$ von unitären Operatoren

$$U^\dagger(t) = U^{-1}(t) \quad (4.18)$$

gegeben. Verwendet man statt der zu vermessenden Zustände $\Psi(t)$ und der Eigenzustände Λ_i der Meßapparate A die Zustände und Operatoren

$$\Psi'(t) = U(t)\Psi(t), \quad \Lambda'_i(t) = U(t)\Lambda_i, \quad A'(t) = U(t)AU^{-1}(t), \quad (4.19)$$

so erhält man zu allen Zeiten und für alle Meßapparate und alle physikalischen Zustände unveränderte Wahrscheinlichkeitsamplituden und unveränderte Eigenwerte der zu den Meßapparaten gehörenden Operatoren

$$\langle \Lambda'_i(t) | \Psi'(t) \rangle = \langle U(t)\Lambda_i | U(t)\Psi(t) \rangle = \langle \Lambda_i | U^\dagger(t)U(t)\Psi(t) \rangle = \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle .$$

$$A\Lambda_i = a_i\Lambda_i \Leftrightarrow U(t)AU^{-1}(t)U(t)\Lambda_i = a_iU(t)\Lambda_i .$$

Durch Differenzieren $\partial_t(U(t)U^{-1}(t)) = 0$ mit der Produktregel lernt man

$$\partial_t U^{-1} = -U^{-1}(\partial_t U)U^{-1} . \quad (4.20)$$

Daher und wegen $U^\dagger = U^{-1}$ ist $U^{-1}(t)\partial_t U(t)$ antihermitesch

$$(U^\dagger \partial_t U)^\dagger = (\partial_t U^{-1})U = -U^{-1} \partial_t U. \quad (4.21)$$

Mit der Bezeichnung

$$U^{-1}(t)i\hbar\partial_t U(t) = -H_0(t) \quad H_0 = H_0^\dagger \quad (4.22)$$

und der Schrödingergleichung für $\Psi(t)$ folgt für $\Psi'(t)$ die Zeitentwicklung

$$i\hbar\partial_t \Psi' = H'(t)\Psi' \quad \text{mit } H' = U(H - H_0)U^{-1} . \quad (4.23)$$

Operatoren, die zu Meßapparaten gehören, erfüllen die Gleichung

$$i\hbar\partial_t A'(t) = -[\tilde{H}, A'(t)] \quad \text{mit } \tilde{H} = UH_0U^{-1} . \quad (4.24)$$

Wählt man insbesondere $H_0 = H$, bestimmt also $U(t)$ als Lösung von $i\hbar\partial_t U = -HU$ mit $U(0) = 1$, so ist Ψ' zeitunabhängig und $\tilde{H} = H$. Die gestrichenen Größen heißen Zustände und Meßoperatoren im Heisenbergbild und erfüllen die Gleichungen

$$i\hbar\partial_t \Psi_H = 0, \quad i\hbar\partial_t \rho_H = 0, \quad i\hbar\partial_t A_H = -[H, A_H] . \quad (4.25)$$

Für $t = 0$ stimmen Zustände und Meßoperatoren im Heisenbergbild und im Schrödingerbild überein.

Für Zustände, die in eine Wechselwirkungszone ein- und auslaufen, sollte für frühe und späte Zeiten die Wechselwirkung H_{int} verschwinden. Im Wechselwirkungsbild wählt man H_0 so, daß $H_{\text{int}} = U(H - H_0)U^{-1}$. Man arbeitet also mit Zuständen, die für frühe und späte Zeiten zeitunabhängig werden, so daß der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Psi_W(t)$ existiert. Dies ist für die Diskussion von Streuexperimenten günstig.

Wenngleich alle Bilder mathematisch äquivalent sind, so sind sie doch unterschiedlich intuitiv. Zum Beispiel zerläuft ein freies Wellenpaket. Im Schrödinger-Bild ist das verständlich, weil das Wellenpaket Anteile mit unterschiedlichem Impuls und, bei massiven Teilchen, mit unterschiedlicher Geschwindigkeit hat. Das Zerfließen eines Wellenpakets ist so intuitiv erfaßbar, wie ein Hundertmeter-Rennen, bei dem am Ziel die Teilnehmer nacheinander einlaufen. Im äquivalenten Heisenberg-Bild ändert sich nicht der Zustand sondern der Meßapparat, als würden nicht die Läufer sondern die Zielrichter auseinanderstreben.

4.3 Grundzustandsenergie

Energien, die Eigenwerte des Hamiltonoperators, der die Zeitentwicklung erzeugt, sind streng genommen nicht meßbar, sondern nur Differenzen der Energien. Insbesondere ist die Grundzustandsenergie von physikalischen Systemen nicht aus der Zeitentwicklung rekonstruierbar.

Gilt nämlich die Schrödingergleichung (4.3) für alle Zustände $\Psi(t)$, so lassen sich diese Zustände nicht von $\Psi'(t) = e^{i\alpha t/\hbar} \Psi(t)$ für reelles α unterscheiden, denn Ψ' und Ψ ergeben zu allen Zeiten für alle Meßapparate dieselbe Verteilung von Meßwerten. Es erfüllt aber $\Psi'(t)$ die Schrödingergleichung mit $H' = H - \alpha$. Also kann nicht zwischen H und $H - \alpha$ unterschieden werden. Diskussionen über die Größe der Grundzustandsenergie ähneln daher mittelalterlichen Erörterungen der Frage, wieviel Engel auf eine Nadelspitze passen: immerhin wissen wir, daß wir dies durch keine Messung klären können.

Im Heisenbergbild ist es noch einfacher einzusehen, daß sich die Zeitentwicklung der Meßapparate nicht ändert, wenn zum Hamiltonoperator eine Zahl α hinzugefügt wird, denn α vertauscht mit jedem Operator.

Zwar nicht aus der Zeitentwicklung, wohl aber aus anderen Gründen, kann durchaus die Energie absolut festgelegt werden. Energiedichte, genauer der Energie-Impulstensor, führt in der Allgemeinen Relativitätstheorie zu Krümmung der Raumzeit. Aus den kosmologischen Befunden erschließt man, daß die Energiedichte, die im Vakuum ohne Teilchen vorliegt, größer ist als die Energiedichte, die zur Materie des Universums gehört. Allerdings existiert keine erfolgreiche Theorie, die Quantenmechanik und Allgemeine Relativitätstheorie vereint.

Einem freien, nichtrelativistischen Teilchen mit Impuls \vec{p} schreibt man die Energie $E = \vec{p}^2/(2m) \geq 0$ zu und hat dabei über die Grundzustandsenergie so verfügt, daß die Ruhenergie verschwindet.

Das Wasserstoffatom hat ein kontinuierliches, positives Spektrum der Schwerpunkts-

bewegung. In Bindungszuständen hat die Relativbewegung von Proton und Elektron ein diskretes Spektrum von Energiewerten mit Energien $E_{n,l,m} = -\frac{Ry}{n^2}$ und Eigenzuständen $\Lambda_{n,l,m}$. Hierbei ist $Ry = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$ die Rydbergkonstante, die Hauptquantenzahl $n = 1, 2, \dots$ durchläuft die natürlichen Zahlen, für gegebenes n gibt es je ein Drehimpulsmultipllett mit $l = 0, 1, \dots, n-1$ und jedes Drehimpulsmultipllett wird von $2l+1$ Zuständen mit $m = -l, -l+1, \dots, l$ aufgespannt. Berücksichtigt man genauer, daß das Elektron Spin $1/2$ hat, so verdoppelt sich die Zahl der Zustände, bezieht man auch den Spin $1/2$ des Protons ein, so verdoppeln sich diese Zustände nochmal.

Der Spin des Elektrons ist entscheidend für das Periodensystem der Elemente. Der gleich große Spin des Protons bewirkt die Hyperfeinstruktur der Energien und wird in manchen Lehrbüchern nicht einmal erwähnt.

Über den diskreten Energien der Bindungszustände schließt sich das Kontinuum der positiven Energien der Relativbewegung des ionisierten Elektron-Proton-Paares an. Es ist natürlich, der Ionisationskante die Energie der Schwerpunktsbewegung von Elektron und Proton zuzuschreiben.

In relativistischen Theorien im nichtgekrümmten Raum liegt die Grundzustandsenergie fest. Der Hamiltonoperator $H = cP^0$ ist hier eine Komponente des Viererimpulses P^m , $m = 0, 1, 2, 3$, der mit den Operatoren $M^{mn} = -M^{nm}$, die Lorentztransformationen erzeugen, folgende Kommutatorrelationen erfüllt

$$[M^{mn}, P^l] = -i(\eta^{ml}P^n - \eta^{nl}P^m) \quad m, n, l \in \{0, 1, 2, 3\}. \quad (4.26)$$

Diese Relationen erlauben nicht, zu P^m Zahlen hinzuzufügen. In relativistischen Theorien muß das Vakuum, der Zustand niedrigster Energie, wenn er existiert, die Energie Null haben. Ebenso muß für freie Teilchen mit Impuls \vec{p} und Masse m die Energie $E = \sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^2c^2}$ sein.

Es gibt eine durch die ganze Literatur durchgängige Wahl, dem harmonischen Oszillator die Grundzustandsenergie $\hbar\omega/2$ zuzuordnen. Das wußte Planck bei der Ableitung seiner Strahlungsformel, mit der im Jahr 1900 die Quantenmechanik begann, schon besser: er ordnete Zuständen mit n Photonen die Energie $n\hbar\omega$ zu und nicht den Wert $(n+1/2)\hbar\omega$, der mit relativistisch kovarianter Beschreibung der Photonen unverträglich ist.

Wir haben schon gesehen, daß die Grundzustandsenergie unmeßbar ist, man sollte daher über sie so verfügen, daß Berechnungen einfach und insbesondere daß sie endlich sind. Energien frei zusammengesetzter Systeme sollten additiv sein. Es gibt in jedem Hohlraum unendlich viele Frequenzen ω_i für Photonen. Ordnet man jeder Frequenz einen Beitrag $\hbar\omega_i/2$ zur Grundzustandsenergie zu, so hat schon der Grundzustand ohne Photonen unendlich viel Energie $\sum_i \hbar\omega_i/2 = \infty$.

Das Mißverständnis, die Grundzustandsenergie liege fest, beginnt in der klassischen Physik. Die Wahl der Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (4.27)$$

verfügt über die klassisch nicht meßbare Grundzustandsenergie so, daß der Zustand niedrigster Energie, der Punkt $(x=0, p=0)$ im Phasenraum, die Energie 0 hat. Diese

Wahl macht den algebraischen Ausdruck für die potentielle Energie $V(x)$ einfach, man hätte aber genauso gut $V(x) = 1/2 m\omega^2 x^2 - \hbar\omega/2$ wählen können.

4.4 Kanonische Quantisierung, Normalordnung

Das Mißverständnis, Grundzustandsenergie liege fest, setzt sich fort bei kanonischer Quantisierung. Kanonische Quantisierung besteht darin, im algebraischen Ausdruck für die Hamiltonfunktion $H(p, x)$ die Symbole p und x als hermitesche Operatoren P und X zu lesen, die die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (3.28) erfüllen. So erhält man zum Beispiel aus der Hamiltonfunktion des eindimensionalen, harmonischen Oszillators den Hamiltonoperator

$$H_{\text{Oszillator}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (4.28)$$

Er hat Eigenwerte $(n + 1/2)\hbar\omega$.

So einfach kanonische Quantisierung ist, sie ist nicht einmal definiert: sie ist keine Abbildung von Phasenraumfunktionen $H(p, x)$ auf Operatoren. Das Ergebnis kanonischer Quantisierung hängt nicht nur von der Phasenraumfunktion $H(p, x)$ ab, sondern von der Schreibweise der Funktion.

Mit $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und mit komplexen Phasenraumkoordinaten

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar}x_0 p\right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - \frac{i}{\hbar}x_0 p\right) \quad (4.29)$$

können wir die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators als Betragsquadrat schreiben.

$$H = \hbar\omega a^\dagger a \quad (4.30)$$

Quantisieren wir die Hamiltonfunktion in dieser Schreibweise, werden a und a^\dagger Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren (2.33) und der zu (4.30) gehörige Hamiltonoperator hat Eigenwerte $n\hbar\omega$ (Kapitel 2.5).

Schreiben wir die Hamiltonfunktion als $H = \hbar\omega((1 - \lambda)a^\dagger a + \lambda a a^\dagger)$ mit beliebigem $\lambda \in \mathbb{R}$, so erhalten wir bei kanonischer Quantisierung jede Grundzustandsenergie $\lambda\hbar\omega$, die wir wollen.

Unabhängig vom Wert der Grundzustandsenergie erfüllt der Grundzustand die Gleichung $a\Psi_0 = 0$, die für die Ortswellenfunktion

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \partial_x\right)\psi_0(x) = 0 \quad (4.31)$$

besagt. Die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators ist eine Gaußfunktion

$$\psi_0(x) = (\pi^{-1/4} x_0^{-1/2}) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}. \quad (4.32)$$

Das Ergebnis kanonischer Quantisierung und insbesondere die Grundzustandsenergie hängt von der Schreibweise der klassischen Hamiltonfunktion ab. Kanonische Quantisierung ist also keine Abbildung von Phasenraumfunktionen auf zugehörige Operatoren.

Es gibt allerdings eine andere, sehr einfache Quantisierung, die analytischen Phasenraumfunktionen H Operatoren zuordnet: die Normalordnung $:H:$. Die Normalordnung ist linear

$$:c_1 H_1 + c_2 H_2: = c_1 :H_1: + c_2 :H_2:, \quad :1: = 1 \quad (4.33)$$

und ist für Monome in a, a^\dagger rekursiv erklärt

$$:aH: = :Ha: = :H:a, \quad :a^\dagger H: = :Ha^\dagger: = a^\dagger :H:. \quad (4.34)$$

Das Argument der Normalordnung besteht aus kommutierenden Phasenraumvariablen, das Ergebnis der Normalordnung von Monomen ist ein Produkt von Erzeugungsoperatoren a^\dagger und Vernichtungsoperatoren a , wobei die Erzeuger links und die Vernichter rechts stehen. Die Definition der Normalordnung erweitert man leicht auf mehrere, verschiedene Erzeuger a_i^\dagger und Vernichter a_j , solange die Reihenfolge der Erzeuger und die Reihenfolge der Vernichter irrelevant ist

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (4.35)$$

Das Argument der Normalordnung besteht aus kommutierenden Größen, denn wenn das Argument ein Produkt von H_1, H_2 und H_3 ist, so gilt

$$:H_1 H_2 H_3: = :H_2 H_1 H_3: = :H_2 H_3 H_1:. \quad (4.36)$$

Dann kann für das Argument der Normalordnung keine Operatoridentität wie $XP - PX = i\hbar$ (3.28) gelten, denn die Normalordnung von $XP - PX$ verschwindet.

Normalordnung ist linear, aber die Normalordnung eines Produkts von Faktoren ist nicht das Produkt der normalgeordneten Faktoren.

$$:H_1 H_2: \neq :H_1: :H_2: \quad (4.37)$$

Dies ist erwünscht. Ansonsten würden wegen (4.36) alle normalgeordneten Operatoren kommutieren im Gegensatz zur Heisenbergschen Vertauschungsrelation (3.28).

Normalordnung von (4.27) führt zu verschwindender Grundzustandsenergie. Aber Normalordnung ist eine willkürliche Vorschrift zur Quantisierung. Leider hängt sie von den verwendeten Phasenraumkoordinaten ab. Nicht quantisierte physikalische Systeme lassen sich durch kanonische Transformationen in andere, äquivalente Form bringen. Die Quantisierung der verschiedenen, klassisch äquivalenten Formen führt aber zu quantenmechanischen Modellen, die nicht äquivalent sind.

Die Enttäuschung darüber, daß es keine willkürfreie Quantisierung gibt, hält sich bei mir in Grenzen. Es muß keinen Zusammenhang von klassischen Systemen und quantisierten Systemen geben. Das hieße doch, daß man einem klassischen System, also dem quantisierten System nach Vernachlässigung der Quanteneigenschaften, das zugrunde liegende Quantensystem ansehen kann.

Kanonische Quantisierung leitet die Intuition, welche Quantentheorien man untersuchen solle. Ob aber ein wie auch immer konstruiertes quantenmechanisches Modell richtig ist, entscheidet sich daran und nur daran, ob die Konsequenzen des quantenmechanischen Modells mit den Beobachtungen übereinstimmen.

4.5 Zeitentwicklung im Zweizustandssystem

Die Zeitentwicklung im Zweizustandssystem ist einfach genug, um bei zeitunabhängigem Hamiltonoperator eine Übersicht über die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeit für Meßwerte an allen physikalischen Zuständen und für alle Meßapparate zu geben.

Wir verwenden zur Diskussion die Eigenbasis des Hamiltonoperators. Dann ist er diagonal und hat in jedem Fall die Form

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad E_1, E_2 \in \mathbb{R} . \quad (4.38)$$

Wir wählen die Eigenzustände Λ_i , $i = 1, 2$, von H zeitunabhängig, dann erfüllen die Komponenten $\psi_i(t) = \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle$, $i = 1, 2$, die folgende, entkoppelte Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi_i(t) = E_i \psi_i(t), \quad i = 1, 2, \quad (4.39)$$

mit der Lösung

$$\psi_1(t) = \psi_1(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t}, \quad \psi_2(t) = \psi_2(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} . \quad (4.40)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der erste Meßwert irgend eines Meßapparates angezeigt wird, wenn zur Zeit t gemessen wird, beträgt

$$w(t) = |\phi_1^* \psi_1(t) + \phi_2^* \psi_2(t)|^2 . \quad (4.41)$$

Hierbei sind ϕ_1, ϕ_2 die Komponenten des ersten Eigenvektors des Meßapparates. Einfaches Rechnen zeigt, daß $w(t)$ die Form

$$w(t) = a + b \cos(\omega t + \alpha), \quad a \geq b \geq 0, \quad \omega, \alpha \in \mathbb{R} \quad (4.42)$$

hat mit $a = |\phi_1^* \psi_1(0)|^2 + |\phi_2^* \psi_2(0)|^2$, $b e^{i\alpha} = 2\phi_1 \phi_2^* \psi_1(0)^* \psi_2(0)$ und

$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} . \quad (4.43)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der erste Meßwert angezeigt wird, oszilliert mit der Rabi-Frequenz $\omega/2\pi$. Die Frequenz ist durch die Energiedifferenz gegeben. Absolute Energiewerte treten in der Zeitentwicklung meßbarer Größen nicht auf.

Die Amplitude b der Rabi-Oszillation verschwindet, wenn $\Psi(0)$ oder der Eigenzustand Φ des Meßapparates Energieeigenzustand ist.

Rabi-Oszillationen treten in physikalisch unterschiedlichen Situationen auf, wenn für die Zeitentwicklung und die Messung nur zwei Zustände relevant sind. In der Teilchenphysik heißt das entsprechende Phänomen Teilchenoszillation. Es wird an neutralen K-Mesonen und an Neutrinos beobachtet. In der Quantenoptik ist das Phänomen eingedeutscht und heißt „quantum beat“.

Wird nicht ein reiner Zustand sondern ein Gemisch ρ mit Eigenwerten ρ_i und Eigenzuständen Υ_i vermessen,¹ behält die Rabi-Frequenz ihren Wert. Die Parameter \mathbf{a} , \mathbf{b} und α sind $\mathbf{a} = \rho_1 \mathbf{a}_1 + \rho_2 \mathbf{a}_2$ und $\mathbf{b}e^{i\alpha} = \rho_1 \mathbf{b}_1 e^{i\alpha_1} + \rho_2 \mathbf{b}_2 e^{i\alpha_2}$, wobei \mathbf{a}_i , \mathbf{b}_i und α_i zu $\Psi = \Upsilon_i$ gehören. Berücksichtigt man, daß $\langle \Upsilon_1 | \Upsilon_2 \rangle = 0$ ist, so sieht man, daß die Amplitude \mathbf{b} der Rabi-Oszillation proportional zur Differenz der Eigenwerte ($\rho_1 - \rho_2$) ist. Sie nimmt also bei abnehmender Polarisation ab.

4.6 Energiebänder

Wir untersuchen in eindimensionaler, spinloser Quantenmechanik das Spektrum (4.17) eines Hamiltonoperators mit periodischem Potential [2, Kapitel XIII.16] mit Periodizitätslänge l

$$V(x+l) = V(x) \quad \forall x. \quad (4.44)$$

Die Differentialgleichung (4.17) mit periodischer Funktion $V(x)$ heißt Hillsche Differentialgleichung. Sie kommt in der Mechanik bei Schwingungen mit periodisch zeitabhängiger Frequenz zum Beispiel bei der Bahn des Mondes vor.

Weil das Potential periodisch ist, vertauscht der Hamiltonoperator mit der Verschiebung U_l (3.25) um die Periodizitätslänge

$$\begin{aligned} (HU_l\Psi)(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)(U_l\Psi)(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x-l) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x-l)\right)\psi(x-l) = (U_l H \Psi)(x). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Der Hamiltonoperator und die unitäre Transformation U_l können demnach gemeinsam diagonalisiert werden (2.24). Die Verschiebung ist eine unitäre Transformation (3.25) mit komplexen Eigenwerten vom Betrag 1 (2.11). Diese Eigenwerte schreiben wir als e^{-ikl} mit reellem k . Dann lautet die Eigenwertgleichung $U_{-l}\Psi_k = e^{ikl}\Psi_k$

$$\psi_k(x+l) = e^{ikl}\psi_k(x). \quad (4.46)$$

Diese Periodizitätsbedingung der Wellenfunktion heißt unter Physikern Blochsches Theorem, Mathematiker nennen sie Floquetsches Theorem. Sie ist verträglich mit der Energieeigenwertgleichung und kann zur Vereinfachung der mathematischen Analyse verlangt werden. Aber sie besagt nicht, daß jede Ortswellenfunktion im periodischen Potential bis auf eine Phase periodisch ist. Als Gegenbeispiel denke man an das freie Teilchen mit verschwindendem Potential. Das Potential $V \equiv 0$ ist trivialerweise periodisch. Dennoch sind die Wellenpakete, die freien Teilchen entsprechen, nicht periodisch, sie sind aus periodischen Funktionen zusammengesetzt.

Die Eigenwertgleichung (4.17) ist eine reelle, lineare, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Wellenfunktion $\psi(x)$. Daher hängt die Wellenfunktion und ihre Ableitung bei $x = l$ linear von den Anfangswerten bei $x = 0$ ab. Fassen wir die

¹Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

Wellenfunktion und ihre Ableitung zu zwei Komponenten eines Vektors \mathbf{u} zusammen,

$$\mathbf{u}(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

so gilt mit einer Matrix A

$$\mathbf{u}(l) = A \mathbf{u}(0). \quad (4.48)$$

Die lineare Abbildung A der Anfangswerte $\mathbf{u}(0)$ auf $\mathbf{u}(l)$ heißt Wiederkehrabbildung oder stroboskopische Abbildung.

Die 2×2 -Matrix A ist reell, denn zu reellen Anfangswerten $\mathbf{u}(0)$ gehört eine reelle Lösung $\mathbf{u}(x)$

$$A = A^* = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}. \quad (4.49)$$

Die Matrixelemente der Matrix A sind differenzierbare Funktionen der Energie E , denn die Lösung $\psi(x)$ und ihre Ableitung hängt bei $x = l$ differenzierbar von dem Parameter E der Differentialgleichung ab.

Aus der Eigenwertgleichung (4.17) folgt unmittelbar, daß der quantenmechanische Strom, die Wronski-Determinante, x -unabhängig ist

$$\begin{aligned} \frac{2\text{im}}{\hbar} \mathbf{j} &= \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_x \psi = \psi^* \partial_x \psi - \partial_x \psi^* \psi = \mathbf{u}^\dagger(x) \mathbf{I} \mathbf{u}(x), \quad \text{mit } \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \partial_x (\mathbf{u}^\dagger(x) \mathbf{I} \mathbf{u}(x)) &= 0. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Insbesondere hat $\mathbf{u}^\dagger(x) \mathbf{I} \mathbf{u}(x)$ für $x = 0$ und für $x = l$ denselben Wert. Daher gilt für alle Anfangswerte $\mathbf{u} = \mathbf{u}(0)$

$$(\mathbf{A} \mathbf{u})^\dagger \mathbf{I} \mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{u}^\dagger \mathbf{I} \mathbf{u} \quad \forall \mathbf{u} \quad (4.51)$$

und daher

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{I} \mathbf{A} = \mathbf{I}. \quad (4.52)$$

Diese Matrixrelation ist für reelle 2×2 -Matrizen A genau dann erfüllt, wenn die Determinante den speziellen Wert 1 hat.

$$ad - bc = 1 \quad (4.53)$$

Die Matrix A ist aus der Gruppe der speziellen linearen Transformationen von zweidimensionalen reellen Vektorräumen.

$$A \in \text{SL}(2, \mathbb{R}) \quad (4.54)$$

Die Eigenwerte von A

$$\lambda_{1,2} = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a+d}{2}\right)^2 - 1} \quad (4.55)$$

sind reell, falls $|\operatorname{tr} \mathbf{A}| = |\mathbf{a} + \mathbf{d}| \geq 2$ ist. Wegen $\det \mathbf{A} = 1$ sind sie zueinander invers und der Betrag von einem der reellen Eigenwerte ist größer gleich 1.

$$|\operatorname{tr} \mathbf{A}| \geq 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_1^* = \frac{1}{\lambda_2} \quad (4.56)$$

Lösungen $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, die zu Eigenwerten mit $|\lambda| > 1$ gehören, wachsen für $\mathbf{x} \rightarrow \infty$ wegen $\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{n}\mathbf{l}) = \lambda^n \mathbf{u}(\mathbf{x})$ exponentiell an. Die zum anderen Eigenwert $\lambda_2 = \lambda^{-1}$ gehörige Lösung wächst wegen $\mathbf{u}_2(\mathbf{x} - \mathbf{n}\mathbf{l}) = \lambda_2^{-n} \mathbf{u}_2(\mathbf{x})$ für $\mathbf{x} \rightarrow -\infty$. Aus solchen Lösungen lassen sich keine normierbaren Wellenpakete zusammensetzen.

Falls der Betrag der Spur von \mathbf{A} kleiner als 2 ist, sind die Eigenwerte komplex, zueinander konjugiert und wegen $\det \mathbf{A} = 1$ vom Betrag 1

$$|\operatorname{tr} \mathbf{A}| < 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2^*, \quad |\lambda_1| = 1. \quad (4.57)$$

Die Periodizitätsbedingung (4.46) besagt, daß die Eigenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ zu Eigenvektoren der Matrix \mathbf{A} mit Eigenwerten $e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}$ gehört

$$(\mathbf{A} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}) \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = 0. \quad (4.58)$$

Dies schränkt die Energie E auf Bänder ein, für die $|\operatorname{tr} \mathbf{A}(E)| \leq 2$ gilt, für die also die Eigenwerte von \mathbf{A} auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene liegen.

In der Umgebung der Bandkante, zum Beispiel bei $\operatorname{tr} \mathbf{A} = 2$, hat \mathbf{A} die Form

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \\ \mathbf{c} & 2 - \mathbf{a} \end{pmatrix} + \delta E \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}. \quad (4.59)$$

Dabei ist δE die Abweichung der Energie von der Bandkante, die Matrixelemente \mathbf{b} und \mathbf{c} sind durch $\det \mathbf{A} = 1$ eingeschränkt $\mathbf{b}\mathbf{c} = -(1 - \mathbf{a})^2$, und α , β , γ und δ sind die Ableitungen der Matrixelemente \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} und \mathbf{d} nach der Energie. Hat $|\operatorname{tr} \mathbf{A}| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\frac{d}{dE} \operatorname{tr} \mathbf{A} = \alpha + \delta \neq 0$, dann variieren die Eigenwerte in einer Umgebung der Bandkante in niedrigster Ordnung in $(\delta E)^{\frac{1}{2}}$ mit

$$\lambda_{1,2} \approx \operatorname{sign}(\operatorname{tr} \mathbf{A}) \pm \sqrt{\delta E (\alpha + \delta) \operatorname{sign}(\operatorname{tr} \mathbf{A})}. \quad (4.60)$$

An der unteren Bandkante ist $(\alpha + \delta) \operatorname{sign}(\operatorname{tr} \mathbf{A}) < 0$ und Energien oberhalb der unteren Bandkante führen zu komplexen Eigenwerten $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{l}} \approx 1 \pm i\mathbf{k}\mathbf{l}$. Löst man hier nach der Energie als Funktion von \mathbf{k} auf, so erhält man am unteren Ende der Bandkante in niedrigster Ordnung

$$E(\mathbf{k}) = E(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \dots \quad \text{mit} \quad M = \frac{\hbar^2}{2l^2} \left| \frac{d}{dE} \operatorname{tr} \mathbf{A} \right|. \quad (4.61)$$

Dies ist die Energie-Impulsbeziehung eines Teilchens mit effektiver Masse M .

Wächst mit der Energie im erlaubten Band der Wert von $|k|$ an, so erreicht er bei $k = \pm \frac{\pi}{l}$ die obere Bandkante. Hat dort $|\operatorname{tr} \mathbf{A}| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\alpha + \delta \neq 0$, so verschwindet dort die Ableitung $\frac{dE}{dk}$ und die Krümmung $\frac{d^2E}{dk^2}$ ist negativ

$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{l}} = 0, \quad \left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{l}} = -2l^2 \left| \frac{d}{dE} \operatorname{tr} \mathbf{A} \right|^{-1}. \quad (4.62)$$

Innerhalb jedes Bandes ist $k(E)$ eine monotone Funktion. Dies sieht man, wenn man die Eigenfunktion von (4.17) und (4.46) als Produkt von e^{ikx} und einer periodischer Funktion $\mathbf{u}_k(x+l) = \mathbf{u}_k(x)$ schreibt.

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikx} \mathbf{u}_k(x) \quad (4.63)$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\mathbf{H}(k)\mathbf{u}_k = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \mathbf{u}_k, \quad \mathbf{H}(k) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar k}{m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) + V(x). \quad (4.64)$$

Der Hamiltonoperator $\mathbf{H}(k)$ wirkt als hermitescher Operator auf l -periodische Funktionen \mathbf{u} und \mathbf{v} , deren Skalarprodukt durch

$$\langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = \int_0^l dx \mathbf{u}^*(x) \mathbf{v}(x) \quad (4.65)$$

definiert ist; dies sind Ortswellenfunktionen auf einem Kreis mit Umfang l .

Innerhalb eines Bandes ist $k(E)$ eine differenzierbare Funktion, denn k ist eine differenzierbare Funktion (4.55) der Matrixelemente von \mathbf{A} , die wiederum differenzierbar von E abhängen. Differenzieren wir den Eigenwert $E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ von $\mathbf{H}(k)$ nach E , so erhalten wir wegen (2.79) für normierte \mathbf{u}_k und mit

$$\mathbf{P}\mathbf{u}_k(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \mathbf{u}_k(x) \quad (4.66)$$

$$1 - \frac{\hbar^2 k}{m} \frac{dk}{dE} = \langle \mathbf{u}_k | \frac{d\mathbf{H}(k)}{dk} \mathbf{u}_k \rangle \frac{dk}{dE} = \langle \mathbf{u}_k | \mathbf{P}\mathbf{u}_k \rangle \frac{\hbar}{m} \frac{dk}{dE}. \quad (4.67)$$

Diese Gleichung schließt Nullstellen von $\frac{dk}{dE}$ aus, denn das Matrixelement $\langle \mathbf{u}_k | \mathbf{P}\mathbf{u}_k \rangle$ ist endlich. Es ist $\mathbf{u}_k(x)$ differenzierbar, wenn das Potential V nichtsingulär ist, und das Skalarprodukt ist ein Integral über ein endliches Intervall, also ist das Matrixelement endlich. Daher ist $k(E)$ innerhalb eines Bandes invertierbar und die Energie ist eine strikt monotone Funktion von k zwischen $k = 0$ und $k = \frac{\pi}{l}$.

Die Gruppengeschwindigkeit von Wellenpaketen

$$v_{\text{Gruppe}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{m} (\hbar k + \langle \mathbf{u}_k | \mathbf{P}\mathbf{u}_k \rangle) \quad (4.68)$$

setzt sich zusammen aus dem Impuls, der vom Faktor e^{ikx} getragen wird und dem Impulserwartungswert innerhalb des Periodizitätsintervalls. Für Werte in der Nähe der unteren Bandkante ist er proportional zu k

$$\langle \mathbf{u}_k | P \mathbf{u}_k \rangle = \hbar k \left(\frac{m}{M} - 1 \right) + O(k^2), \quad (4.69)$$

an der oberen Bandkante kompensiert er den Impuls von e^{ikx}

$$\langle \mathbf{u}_{\frac{\pi}{l}} | P \mathbf{u}_{\frac{\pi}{l}} \rangle = -\langle \mathbf{u}_{-\frac{\pi}{l}} | P \mathbf{u}_{-\frac{\pi}{l}} \rangle = -\hbar \frac{\pi}{l}. \quad (4.70)$$

Die Funktionen \mathbf{u}_k sind periodisch und lassen sich deshalb als Fourierreihe darstellen.

$$\mathbf{u}_k(x) = \sum_n c_n e^{in \frac{2\pi}{l} x} \quad (4.71)$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen $\psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikx} \mathbf{u}_k(x)$ mit $-\frac{\pi}{l} \leq k \leq \frac{\pi}{l}$ sind daher bezüglich k kontinuierlich normiert, wenn die Wellenfunktionen \mathbf{u}_k im Periodizitätsintervall normiert sind.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle &= \frac{l}{2\pi} \int dx \left(e^{ikx} \sum_n c_n e^{in \frac{2\pi}{l} x} \right)^* \left(e^{ik'x} \sum_m c'_m e^{im \frac{2\pi}{l} x} \right) \\ &= l \sum_{m,n} c_n^* c'_m \delta(k' - k + (m - n) \frac{2\pi}{l}) \\ &= (l \sum_n c_n^* c'_n) \delta(k' - k) = \langle \mathbf{u}_k | \mathbf{u}'_k \rangle \delta(k' - k). \end{aligned} \quad (4.72)$$

Gehören die Wellenfunktionen zum selben Band, so stimmen \mathbf{u}_k und \mathbf{u}'_k überein und mit $\langle \mathbf{u}_k | \mathbf{u}_k \rangle = 1$ folgt

$$\langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle = \delta(k' - k). \quad (4.73)$$

Gehören die Wellenfunktionen zu verschiedenen Bändern, so sind sie orthogonal, weil bei verschiedenen Bändern und gleichem k die Eigenzustände \mathbf{u}_k und \mathbf{u}'_k zu (4.64) mit verschiedenen Eigenwerten $E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ orthogonal zueinander sind.

Hat an der Bandkante $|\operatorname{tr} A| - 2$ einen Nulldurchgang, so gibt es zwischen den Bändern Lücken. Diese Lücke verschwindet, wenn $|\operatorname{tr} A| = 2$ ein lokales Maximum ist.

Zu jedem Energiewert im Band gehören zwei Eigenwerte e^{ikl} und e^{-ikl} . Die Dispersionsrelation $E(k) = E(-k)$ ist also eine gerade Funktion.

Betrachtet man einen festen Eigenwert $e^{ikl} \neq \pm 1$ der Verschiebung (4.46), so gehören dazu abzählbar viele Energieeigenzustände mit nichtentarteten Energien. Diese Eigenzustände gehören zu den verschiedenen Bändern. Beim Eigenwert $e^{ikl} = \pm 1$ ist die Energie nur dann entartet und dann zweifach entartet, wenn $A(E) = \pm \mathbb{1}$ ist.

5 Zusammengesetzte Systeme

5.1 Produktraum

Häufig ist ein quantenmechanisches System aus identifizierbaren Teilen zusammengesetzt, zum Beispiel aus zwei verschiedenen Teilchen, deren Eigenschaften getrennt gemessen werden können. Dann ist der Hilbertraum \mathcal{H} ein Produktraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 , \quad (5.1)$$

dessen Elemente Summen von Vielfachen von Paaren $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ von Elementen $\mathbf{u} \in \mathcal{H}_1$ und $\mathbf{v} \in \mathcal{H}_2$ der einzelnen Hilberträume sind. Diese Paare sind Produkte, das heißt, für alle \mathbf{u} und \mathbf{u}' aus \mathcal{H}_1 und für alle \mathbf{v} und \mathbf{v}' aus \mathcal{H}_2 und für alle komplexen Zahlen c gelten

$$(c\mathbf{u} + \mathbf{u}') \otimes \mathbf{v} = c(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) + (\mathbf{u}' \otimes \mathbf{v}) \quad , \quad \mathbf{u} \otimes (c\mathbf{v} + \mathbf{v}') = c(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) + (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}') . \quad (5.2)$$

Das Skalarprodukt der Produktzustände ist das Produkt der einzelnen Skalarprodukte,

$$\langle \mathbf{u}' \otimes \mathbf{v}' | \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}' | \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{v}' | \mathbf{v} \rangle . \quad (5.3)$$

Die Produkte $\chi_i \otimes \phi_\alpha$ der Vektoren einer Orthonormalbasis χ_i von \mathcal{H}_1 mit den Vektoren ϕ_α einer Orthonormalbasis von \mathcal{H}_2 bilden eine orthonormale Produktbasis von $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Bezüglich solch einer Basis haben Zustände Ψ die Entwicklung

$$\Psi = \sum_{i\alpha} \chi_i \otimes \phi_\alpha \psi_{i\alpha} \quad , \quad \psi_{i\alpha} = \langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | \Psi \rangle . \quad (5.4)$$

Die Komponenten $\psi_{i\alpha}$ definieren Abbildungen $\mathbf{N} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$ und $\mathbf{N}^\dagger : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$,

$$\mathbf{N} \left(\sum_\alpha \phi_\alpha v_\alpha \right) = \sum_i \chi_i \left(\sum_\alpha \psi_{i\alpha} v_\alpha \right) \quad , \quad \mathbf{N}^\dagger \left(\sum_i \chi_i u_i \right) = \sum_\alpha \phi_\alpha \left(\sum_i \psi_{i\alpha}^* u_i \right) , \quad (5.5)$$

die nicht von der Basis χ_i von \mathcal{H}_1 und nicht von der Basis ϕ_α von \mathcal{H}_2 abhängen.

Die Abbildung $\mathbf{N}^\dagger \mathbf{N} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2$ ist hermitesch. Ihre Eigenvektoren \mathbf{v}_n zu verschiedenen Eigenwerten λ_n^2 , $\mathbf{N}^\dagger \mathbf{N} \mathbf{v}_n = \lambda_n^2 \mathbf{v}_n$, stehen aufeinander senkrecht und können bei entarteten Eigenwerten senkrecht zueinander gewählt werden. Wählen wir die \mathbf{v}_n normiert, so bilden sie eine Orthonormalbasis von \mathcal{H}_2 .

Für $m = n$ besagt $\langle \mathbf{N} \mathbf{v}_m | \mathbf{N} \mathbf{v}_n \rangle = \langle \mathbf{v}_m | \mathbf{N}^\dagger \mathbf{N} \mathbf{v}_n \rangle = \lambda_n^2 \delta_{mn}$ (keine Summe über n), daß die Eigenwerte λ_n^2 von $\mathbf{N}^\dagger \mathbf{N}$ nicht negativ sind und daß $\mathbf{N} \mathbf{v}_n = \lambda_n \mathbf{u}_n$ für $\lambda_n > 0$ normierte Vektoren $\mathbf{u}_n \in \mathcal{H}_1$ definiert. Für $m \neq n$ besagt dieselbe Gleichung, daß

die \mathbf{u}_m aufeinander senkrecht stehen. Falls sie nicht \mathcal{H}_1 , sondern nur einen Unterraum aufspannen, denken wir uns die \mathbf{u}_n zu einer Orthonormalbasis ergänzt.

Demnach definiert jeder normierte Zustand ψ eine Orthonormalbasis \mathbf{u}_n von \mathcal{H}_1 und eine Orthonormalbasis \mathbf{v}_n von \mathcal{H}_2 , in der ψ die Komponenten $\psi_{nm} = \lambda_n \delta_{nm}$ hat (keine Summe über n). Denn zu ψ gehört die lineare Abbildung \mathbf{N} , die jeden Basisvektor \mathbf{v}_n auf das λ_n -fache des Basisvektors \mathbf{u}_n abbildet,

$$\Psi = \sum_n \lambda_n \mathbf{u}_n \otimes \mathbf{v}_n, \quad 0 \leq \lambda_n, \quad \sum_n \lambda_n^2 = 1, \quad \langle \mathbf{u}_m | \mathbf{u}_n \rangle = \langle \mathbf{v}_m | \mathbf{v}_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (5.6)$$

Diese Darstellung eines normierten Vektors $\Psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist seine Schmidtzerlegung. Die Orthonormalbasis \mathbf{v}_n ist, wenn wir die λ_n nach abnehmender Größe ordnen, eindeutig bis auf unitäre Transformationen der Unterräume von \mathcal{H}_2 , die zum gleichen Eigenwert von $\mathbf{N}^\dagger \mathbf{N}$ gehören; dies ist bei nichtentartetem Eigenwert eine Phase $e^{i\varphi}$. Dann ist die Basis \mathbf{u}_n eindeutig bis auf eine unitäre Transformation des Nullraumes von \mathbf{N}^\dagger .

Können die Komponenten $\psi_{i\alpha}$ als Produkt $\mathbf{a}_i \mathbf{b}_\alpha$ geschrieben werden, so hat die Matrix $\psi_{i\alpha}$ den Rang Eins und $\Psi = (\sum_i \chi_i \mathbf{a}_i) \otimes (\sum_\alpha \phi_\alpha \mathbf{b}_\alpha)$ ist ein Produktzustand.

Zustände, deren Schmidtzerlegung aus mehreren Termen bestehen, nennt man verschränkte Zustände. Die Funktion

$$V(\Psi) = - \sum_n \lambda_n^2 \ln \lambda_n^2 \quad (5.7)$$

ist ein Maß der Verschränkung, das nur bei Produktzuständen verschwindet und sonst positiv ist. Alle Mehrteilchenzustände identischer Bosonen oder Fermionen, die wie zum Beispiel Slater-Determinanten (3.64) aus verschiedenen Einteilchenzuständen zusammengesetzt sind, sind verschränkt.

Sei der Operator \mathbf{A} einen Meßapparat, der das erste Teilsystem vermißt, der also \mathcal{H}_1 auf \mathcal{H}_1 abbildet, und sei \mathbf{B} einen Meßapparat des zweiten Teilsystems, dann wirkt ihr direktes Produkt $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ auf Produktzustände durch

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = (\mathbf{A}\mathbf{u}) \otimes (\mathbf{B}\mathbf{v}) \quad (5.8)$$

und ist allgemeiner durch Linearität erklärt,

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) \left(\sum_{i\alpha} \chi_i \otimes \phi_\alpha \psi_{i\alpha} \right) = \sum_{i\alpha} (\mathbf{A}\chi_i) \otimes (\mathbf{B}\phi_\alpha) \psi_{i\alpha}. \quad (5.9)$$

Operatoren des zusammengesetzten Systems $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ von der Form $\mathbf{A} \otimes \mathbb{1}$ entsprechen den Messungen am ersten Teilsystem, die Operatoren von der Form $\mathbb{1} \otimes \mathbf{B}$ den Messungen am zweiten Teilsystem.

5.2 Addition von Drehimpulsen

Betrachten wir das quantenmechanische System, daß von zwei Spin-1/2-Teilchen gebildet wird, die sich einfachheitshalber nicht bewegen können. Der Hilbertraum der Einteilchenzustände wird dann einfach von Basiszuständen Λ_\uparrow und Λ_\downarrow aufgespannt. Eine Basis des

Produkttraumes der Zweiteilchenzustände ist

$$\Lambda_{\uparrow\uparrow}, \Lambda_{\uparrow\downarrow}, \Lambda_{\downarrow\uparrow}, \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (5.10)$$

Die Basis ist so gewählt, daß die Spinoperatoren für das erste und zweite Teilchen \vec{S}_1 und \vec{S}_2 durch Multiplikation mit den Paulimatrizen wirken.

$$\vec{S}_1 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{kj} \vec{\sigma}_{ki}, \quad \vec{S}_2 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{ik} \vec{\sigma}_{kj}. \quad (5.11)$$

Alle Spinoperatoren des ersten Teilchens vertauschen mit allen Spinoperatoren des zweiten Teilchens.

$$[S_{1a}, S_{2b}] = 0 \quad a, b \in \{1, 2, 3\} \quad (5.12)$$

Daher sind die Summen $S_a = S_{1a} + S_{2a}$ Komponenten von Drehimpulsoperatoren, die die Drehimpulsalgebra (2.45) erfüllen.

$$[S_a, S_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} S_c \quad (5.13)$$

Das Spektrum von $S_3 = S_{13} + S_{23}$ läßt sich unmittelbar ablesen

$$S_3 \Lambda_{\uparrow\uparrow} = \hbar \Lambda_{\uparrow\uparrow}, \quad S_3 \Lambda_{\downarrow\uparrow} = 0 \hbar \Lambda_{\downarrow\uparrow}, \quad S_3 \Lambda_{\uparrow\downarrow} = 0 \hbar \Lambda_{\uparrow\downarrow}, \quad S_3 \Lambda_{\downarrow\downarrow} = -\hbar \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (5.14)$$

Demnach gehört $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$ zu einem Drehimpulsmultipllett mit Gesamtspin $s = 1$, denn den Gesamtspin s kann man am höchsten S_3 -Eigenwert ablesen (2.58). Ebenso gehört der Zustand $\Lambda_{\downarrow\downarrow}$ mit niedrigstem S_3 -Eigenwert $-\hbar$ zu Gesamtspin $s = 1$. Den Zustand mit $s = 1$ und S_3 -Eigenwert 0 erhält man mit einem Faktor $\sqrt{(1+1)(1-1+1)} = \sqrt{2}$ (2.48) durch Anwenden des Leiteroperators S_- auf $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$

$$S_- \Lambda_{\uparrow\uparrow} = (S_{1-} + S_{2-}) \Lambda_{\uparrow\uparrow} = \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} + \Lambda_{\uparrow\downarrow}) \quad (5.15)$$

$$\Lambda_{s=1, s_3=1} = \Lambda_{\uparrow\uparrow}, \quad \Lambda_{s=1, s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} + \Lambda_{\uparrow\downarrow}), \quad \Lambda_{s=1, s_3=-1} = \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (5.16)$$

Diese drei Basisvektoren spannen ein Gesamtspin-1-Multipllett auf. Weitere Gesamtdrehimpulsmultipletts sind als Eigenzustände von S^2 senkrecht zu diesem Gesamtspin-1-Multipllett, wenn sie zu anderem Gesamtspin gehören, oder können senkrecht zu diesem Gesamtspin-1-Multipllett gewählt werden. Sie sind demnach in unserem Beispiel aufgespannt vom Zustand

$$\Lambda_{s=0, s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} - \Lambda_{\uparrow\downarrow}). \quad (5.17)$$

Er ist S_3 -Eigenzustand zum Eigenwert 0. Da der Gesamtspin in einem Drehimpulsmultipllett am höchsten und am niedrigsten S_3 -Eigenwert ablesbar ist, gehört dieser Zustand zu Gesamtspin 0. Dies kann man leicht nachprüfen, denn S_3 , S_+ und S_- verschwinden auf diesem Zustand.

Die Zustände $\Lambda_{s=0, s_3=0}$ und $\Lambda_{s=1, s_3=0}$ sind verschränkt.

5.3 Unabhängig zusammengesetzte Gemische

Gemische ρ von zusammengesetzten Systemen sind unabhängig zusammengesetzt, falls die Wahrscheinlichkeiten für alle Paare von Meßergebnissen von $A \otimes \mathbb{1}$ am ersten Teilsystem und von $\mathbb{1} \otimes B$ am zweiten Teilsystem faktorisieren,

$$w((i, \alpha), A \otimes B, \rho) = w_1(i, A, \hat{\rho}) \cdot w_2(\alpha, B, \tilde{\rho}) . \quad (5.18)$$

Hierbei ist $w((i, \alpha), A \otimes B, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß A den i -ten Meßwert a_i und B den α -ten Meßwert b_α anzeigt, $w_1(i, A, \hat{\rho}) = \sum_\alpha w((i, \alpha), A \otimes B, \rho)$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß A den i -ten Meßwert anzeigt, und $w_2(\alpha, B, \tilde{\rho}) = \sum_i w((i, \alpha), A \otimes B, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß B den α -ten Meßwert b_α anzeigt. Anderenfalls, wenn ein Gemisch nicht unabhängig zusammengesetzt ist, nennen wir die Teilsysteme verschränkt.

Daß Systeme unabhängig zusammengesetzt sind, bedeutet mathematisch folgendes: die Wahrscheinlichkeiten sind durch Hauptdiagonalelemente $\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle$ (1.38) gegeben. Daher muß (5.18) insbesondere für jeden Eigenzustand Λ eines Operators $A \otimes B$ gelten, also für jeden Produktzustand $u \otimes v$,

$$\sum_{ij\alpha\beta} a_i^* b_\alpha^* \rho_{i,\alpha j,\beta} a_j b_\beta = \left(\sum_{ij} a_i^* \hat{\rho}_{ij} a_j \right) \left(\sum_{\alpha\beta} b_\alpha^* \tilde{\rho}_{\alpha\beta} b_\beta \right) . \quad (5.19)$$

Beide Seiten der Gleichung sind Bilinearformen in u und in v und sind für alle u und v genau dann gleich, wenn die Koeffizienten gleich sind, wenn also das Gemisch ein direktes Produkt von Gemischen ist,

$$\rho_{\text{unabhängig}} = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho} , \quad \rho_{i,\alpha j,\beta} = \hat{\rho}_{ij} \tilde{\rho}_{\alpha\beta} . \quad (5.20)$$

Nur bei unabhängig zusammengesetzten Systemen gibt es keine Verschränkung von Wahrscheinlichkeiten für Meßwerte am ersten und am zweiten Teilsystem. Dann kann man sich auf ein Teilsystem beschränken und es in seinen Eigenschaften getrennt vom zweiten Teilsystem untersuchen. In Abbildung (1.1) ist zum Beispiel zunächst zu prüfen, ob die Zusammenfassung von zwei Teilchen im Strahl zu einem Zweiteilchensystem nicht eine Verschränkung sichtbar macht, die bei einer Deutung, der Strahl enthalte wiederholt hergestellte Einteilchenzustände, nicht erfaßt wird.

Sind die Systeme nicht unabhängig zusammengesetzt, so sind Meßergebnisse am ersten und zweiten Teilsystem verschränkt. Im Extremfall kann man, wie bei einem Zweiteilchen-Gesamtspin-0-Zustand, aus dem Ergebnis einer Messung am ersten Teilsystem erschließen, was sich bei einer geeigneten Messung am zweiten Teilsystem ergibt.

Zu den überraschenden Eigenschaften verschränkter Systeme gehört, daß ein reiner, verschränkter Zustand Ψ gemischt erscheint, wenn man nur am ersten Teilsystem mißt. Unvollständige Messung wirkt wie Unkenntnis des zu vermessenden Systems,

$$w_1(i, A, \Psi) = \sum_\alpha |\langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | \Psi \rangle|^2 = \sum_{\alpha m} \lambda_m^2 |\langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | u_m \otimes v_m \rangle|^2 = \langle \chi_i | \hat{\rho} | \chi_i \rangle , \quad (5.21)$$

wobei χ_i die zu A gehörigen Eigenzustände seien und $\hat{\rho}$ die Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \sum_m p_m |u_m\rangle \langle u_m| \quad \text{mit} \quad p_m = \lambda_m^2 \sum_\alpha |\langle \phi_\alpha | v_m \rangle|^2 . \quad (5.22)$$

Diese Dichtematrix gehört nur dann zu einem reinen Zustand \mathbf{u} des ersten Teilsystems, wenn alle Wahrscheinlichkeiten p_m bis auf eine, zum Beispiel $p_1 = 1$, verschwinden. Dann ist $\Psi = \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{v}_1$ ein Produktzustand.

5.4 Quantenkopierer

Wenn man Zustände vervielfältigen könnte, dann könnte man Unschärfebeziehungen umgehen und an der einen Kopie eine Messung und an der anderen eine zweite Messung vornehmen, die man nicht gemeinsam an einem Zustand durchführen kann. Darüber hinaus könnte man Zustände, die zur Nachrichtenübertragung genutzt werden, abhören und auslesen und dem bestimmungsgemäßen Empfänger eine Kopie weiterleiten, an der sich das Abhören nicht feststellen ließe.

Ein einfaches Argument zeigt aber, daß man Zustände nicht vervielfältigen kann, daß man also nicht mit unitärer Zeitentwicklung aus einem Produktzustand $\Psi \otimes \Phi \otimes \chi$ für alle Ψ einen vervielfältigten Zustand

$$\mathbf{U}(\Psi \otimes \Phi \otimes \chi) = \Psi \otimes \Psi \otimes \chi' \quad (5.23)$$

herstellen kann. Hierbei stehe Φ und χ für die anfänglichen, normierten Zustände von Kopie und Kopiermaschine und χ' für irgendeinen, normierten Endzustand des Kopierers, der von Ψ abhängen kann.

Wenn nämlich die Zeitentwicklung unitär ist, so erhält sie Skalarprodukte. Es gilt aber für verschiedene zu kopierende Zustände Ψ und Ψ'

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \langle \Psi \otimes \Phi \otimes \chi | \Psi' \otimes \Phi \otimes \chi \rangle \neq \langle \Psi \otimes \Psi \otimes \chi' | \Psi' \otimes \Psi' \otimes \chi'' \rangle = \langle \Psi | \Psi' \rangle^2 \langle \chi' | \chi'' \rangle, \quad (5.24)$$

denn der Betrag von $\langle \Psi | \Psi' \rangle \langle \chi' | \chi'' \rangle$ ist kleiner als Eins.

5.5 Bellsche Ungleichung

Die revolutionäre Erkenntnis der Quantenphysik ist, daß es auch bei ideal präparierten Teilchen immer Messungen gibt, für deren Ergebnisse man nur ihre Wahrscheinlichkeit angeben kann. Wir widerlegen hier am Beispiel von Spinmessungen an Teilchenpaaren die Unterstellung, die Unfähigkeit, die Einzelergebnisse aller Messungen vorherzusagen, beruhe nur auf unvollständiger Kenntnis der Ursachen.

Diese Vorstellung untersuchen wir an Spin-1/2-Teilchen, an denen wir verschiedene Messungen bedenken, die nicht gemeinsam, sondern nur alternativ, erfolgen können.

Wenn man in Richtung $\vec{\mathbf{b}}$, $\vec{\mathbf{b}}^2 = 1$, den Spin eines einzelnen Spin-1/2-Teilchens mißt, das mit Spin in Richtung $\vec{\mathbf{a}}$, $\vec{\mathbf{a}}^2 = 1$, präpariert worden ist, dann tritt nach Grundgleichung (1.1) und wegen (2.66) der Meßwert $\hbar/2$ mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{\mathbf{b}}) = |\langle \uparrow_{\vec{\mathbf{b}}} | \uparrow_{\vec{\mathbf{a}}} \rangle|^2 = \left| \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta'}{2} e^{-i(\varphi - \varphi')/2} + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} e^{+i(\varphi - \varphi')/2} \right|^2 \quad (5.25)$$

auf. Dabei sind θ und φ die Kugelkoordinaten von $\vec{a} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ und θ' und φ' die Kugelkoordinaten von $\vec{b} = (\sin \theta' \cos \varphi', \sin \theta' \sin \varphi', \cos \theta')$. Wegen

$$\begin{aligned} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta'}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta'}{2} + 2 \cos(\varphi - \varphi') \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} \cos \frac{\theta'}{2} \\ &= \frac{1}{4} \left((1 + \cos \theta)(1 + \cos \theta') + (1 - \cos \theta)(1 - \cos \theta') + 2 \cos(\varphi - \varphi') \sin \theta \sin \theta' \right) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \cos \theta \cos \theta' + \cos(\varphi - \varphi') \sin \theta \sin \theta') \end{aligned} \quad (5.26)$$

ist dies $(1 + \cos \beta)/2$, wobei β den Winkel bezeichnet, den \vec{a} mit \vec{b} einschließt. Denn das Skalarprodukt $\vec{a} \cdot \vec{b} = \cos \beta$ beträgt

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{b} &= \sin \theta \sin \theta' (\cos \varphi \cos \varphi' + \sin \varphi \sin \varphi') + \cos \theta \cos \theta' = \\ &= \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi') + \cos \theta \cos \theta' . \end{aligned} \quad (5.27)$$

Also steht bei einem Spin-1/2-Teilchen, das mit Spin in Richtung \vec{a} präpariert worden ist, der Spin bei Messung in Richtung \vec{b} mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{b}) = \frac{1}{2} (1 + \vec{a} \cdot \vec{b}) = \frac{1}{2} (1 + \cos \beta) \quad (5.28)$$

nach oben. Mit der Restwahrscheinlichkeit $1 - w(\vec{b})$ steht der Spin in Gegenrichtung $-\vec{b}$ nach oben, das heißt in Richtung \vec{b} nach unten

$$w(-\vec{b}) = 1 - w(\vec{b}) . \quad (5.29)$$

Zerfällt unter Bewahrung des Drehimpulses ein Teilchen ohne Spin isotrop, das heißt mit drehinvarianter Ortswellenfunktion, in jeweils ein Paar von Teilchen mit Spin 1/2, so entsteht der Spin-0-Zustand (5.17)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\rangle . \quad (5.30)$$

Die Wahrscheinlichkeit $w(\vec{a}, \vec{b})$, daß bei diesem Teilchenpaar beim ersten Teilchen der Spin in Richtung \vec{a} nach oben und beim zweiten Teilchen der Spin in Richtung \vec{b} nach oben gemessen wird, beträgt

$$\begin{aligned} w(\vec{a}, \vec{b}) &= \frac{1}{2} |\langle \uparrow_{\vec{a}} \uparrow_{\vec{b}} | \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left| \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} e^{i(\varphi - \varphi')/2} - \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta'}{2} e^{-i(\varphi - \varphi')/2} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta'}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta'}{2} - 2 \cos(\varphi - \varphi') \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta'}{2} \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} \right) \\ &= \frac{1}{8} \left((1 + \cos \theta)(1 - \cos \theta') + (1 - \cos \theta)(1 + \cos \theta') - 2 \cos(\varphi - \varphi') \sin \theta \sin \theta' \right) \\ &= \frac{1}{4} (1 - \cos \theta \cos \theta' - \cos(\varphi - \varphi') \sin \theta \sin \theta') . \end{aligned} \quad (5.31)$$

Also steht bei diesem Gesamtspin-0-Zustand mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{1}{4}(1 - \vec{a} \cdot \vec{b}) = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta) \quad (5.32)$$

der Spin des ersten Teilchens in Richtung \vec{a} nach oben und der Spin des zweiten Teilchens in Richtung \vec{b} nach oben.

Durch Zusammenfassen der beiden möglichen Fälle, daß am zweiten Teilchen der Spin in einer Richtung \vec{b} nach oben oder unten steht, erhalten wir hieraus die Wahrscheinlichkeit

$$w_1(\vec{a}) = w(\vec{a}, \vec{b}) + w(\vec{a}, -\vec{b}) = \frac{1}{2} \quad (5.33)$$

dafür, daß beim ersten Teilchen der Spin in Richtung \vec{a} nach oben steht. Sie ist genauso groß wie die Wahrscheinlichkeit dafür, daß er nach unten steht, und sie ist unabhängig von \vec{a} und \vec{b} . Ebenso steht beim zweiten Teilchen der Spin in jeder Richtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit $w_2(\vec{b}) = w_2(-\vec{b}) = 1/2$ nach oben oder unten.

Beschränkt man sich auf die Fälle, in denen der Spin des ersten Teilchens in Richtung \vec{a} nach unten steht, so ergibt sich mit der bedingten Wahrscheinlichkeit

$$\frac{w(-\vec{a}, \vec{b})}{w_1(-\vec{a})} = \frac{1}{2}(1 + \vec{a} \cdot \vec{b}) \quad (5.34)$$

der Wert $+\hbar/2$ bei Messung des Spins des zweiten Teilchens in Richtung \vec{b} . Dies ist dieselbe Wahrscheinlichkeit, wie sie bei (5.28) auftritt. In den Fällen, in denen die Messung des Spins in Richtung \vec{a} am ersten Teilchen der Wert $-\hbar/2$ ergibt, ist also das zweite Teilchen wie bei (5.28) präpariert, also mit Spin in Richtung \vec{a} nach oben.

Für diesen Sachverhalt gibt es die Sprechweise, daß die Messung des Spins des einen Teilchens augenblicklich das andere Teilchen des Paares, egal wie weit es entfernt sein mag, in den Zustand mit entgegengesetztem Spin versetze. Der Zustand des Paares „kollabiere“ oder werde reduziert, und das Ergebnis der Messung am ersten Teilchen werde auf das zweite Teilchen übertragen oder, beeindruckender, quantenteleportiert. Die Zustandsreduktion erfolge augenblicklich und daher mit Überlichtgeschwindigkeit.

Wer von diesen Behauptungen ungerührt bleibt, stellt einfach fest, daß die Messung an einem Teilchen nichts am anderen Teilchen bewirkt. Dort steht der Spin mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach oben oder unten, egal in welche Richtung man mißt. Durch keine Messung kann man an einem Teilchen auch nur feststellen, ob am anderen Teilchen überhaupt gemessen wurde, geschweige denn, in welche Richtung und mit welchem Ergebnis.

Daß der Spin am zweiten Teilchen in allen Fällen in Richtung \vec{a} nach oben steht, in denen er beim ersten Teilchen in dieser Richtung nach unten steht, kann man erst bestätigen, wenn man beim zweiten Teilchen weiß, in welchen Fällen der Spin des ersten Teilchens in Richtung \vec{a} nach unten stand. Diese Information ist höchstens mit Lichtgeschwindigkeit zu bekommen.

Die offensichtliche Ursache für die Zusammenhänge der beiden Spinmessungen ist die gemeinsame Präparation beider Teilchen als Teilchenpaar. Sie gelingt nur, wenn beide

Teilchen am selben Ort sind. Da sich die Teilchen nicht schneller als Licht bewegen, wirkt sich die Präparation in späteren Messungen nicht schneller als Licht aus.

Wenn man wiederholt eine Münze wirft und jeweils an einen Empfänger einen Brief mit dem Bild der Oberseite und an einen zweiten einen Brief mit dem Bild der Unterseite schickt, dann erhält jeder Empfänger mit gleicher Wahrscheinlichkeit Bilder der Kopf- oder Zahlseite. Jeder Empfänger weiß augenblicklich, wenn er seinen Brief öffnet, welches Bild der andere erhalten hat. Bei Kenntnis des Ergebnisses kollabiert die Wahrscheinlichkeit zur bedingten Wahrscheinlichkeit, in diesem Beispiel zu Gewißheit.

Ebenso ersetzt Zustandsreduktion bei Auftreten eines Meßwertes den vorherigen Zustand durch den bedingten Zustand, der zur bedingten Wahrscheinlichkeit derjenigen Ereignisse gehört, in denen dieser Meßwert auftritt.

Vor Öffnen des Briefes ist der Empfänger unsicher, welches Bild er enthält, aber der Inhalt ist eigentlich nicht unsicher, sondern nur unbekannt. Der Inhalt des Briefes liegt fest, ob man ihn nun öffnet oder nicht. Bei der Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.32) hingegen ist ausgeschlossen, daß die Ergebnisse der Spinnmessungen in allen Richtungen in jedem Einzelfall vor der Messung feststehen und daß man das Ergebnis nur deshalb nicht vorher weiß, weil die jeweiligen Ursachen unbekannt und zufällig sind.

Um diese scheinbar unwiderlegbare Vorstellung auszuwerten, betrachten wir wiederholte Messungen, die wir durch i , $i = 1, 2, \dots, N$, numerieren. Wir unterstellen, daß das Ergebnis der Spinnmessung am ersten Teilchen in Richtung \vec{a} in jedem Versuch feststehe, und bezeichnen das Ergebnis im Versuch Nummer i mit $\frac{\hbar}{2}\mathbf{a}_{1i}$, auch wenn wir es nicht kennen. In jedem Fall hat \mathbf{a}_{1i} entweder den Wert $+1$ oder -1 . Mit $\frac{\hbar}{2}\mathbf{b}_{1i}$ bezeichnen wir das Ergebnis, das sich im Versuch Nummer i ergäbe, wenn wir den Spin des ersten Teilchens in Richtung \vec{b} mäßen. Entsprechend bezeichnen wir mit $\frac{\hbar}{2}\mathbf{c}_{2j}$ das Ergebnis der Spinnmessung am zweiten Teilchen, wenn wir dort im Versuch mit Nummer j in Richtung \vec{c} den Spin messen.

Weil die Messungen für \mathbf{a}_{1i} , \mathbf{b}_{2i} und \mathbf{c}_{2i} nur die Werte 1 oder -1 ergeben, gilt in allen Fällen die Ungleichung

$$\mathbf{a}_{1i}(\mathbf{b}_{2i} - \mathbf{c}_{2i}) \leq 1 - \mathbf{b}_{2i}\mathbf{c}_{2i} , \quad (5.35)$$

denn es gibt nur den Fall $\mathbf{b}_{2i} = \mathbf{c}_{2i}$, dann verschwinden beide Seiten, und den Fall $\mathbf{b}_{2i} = -\mathbf{c}_{2i}$, dann hat die rechte Seite den Wert 2 und die linke den Wert 2 oder -2 .

In jedem Fall ist der Spin des ersten Teilchens dem Spin des zweiten Teilchens entgegengesetzt, denn wegen (5.34) gilt $w(\vec{b}, -\vec{b})/w_1(\vec{b}) = 1$. Es gilt also in allen Versuchen $\mathbf{b}_{1i} = -\mathbf{b}_{2i}$. Daher besagt die Ungleichung

$$\mathbf{a}_{1i}\mathbf{b}_{2i} - \mathbf{a}_{1i}\mathbf{c}_{2i} - \mathbf{b}_{1i}\mathbf{c}_{2i} \leq 1 . \quad (5.36)$$

Der Mittelwert $\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle$ der Produkte $\mathbf{a}_{1i}\mathbf{b}_{2i}$ der Spinmeßwerte in N Versuchen ist die Summe der einzelnen Produkte, geteilt durch N ,

$$\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{a}_{1i}\mathbf{b}_{2i} . \quad (5.37)$$

Entsprechend erhalten wir die Mittelwerte der Meßergebnisse $\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_2 \rangle$ und $\langle \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_2 \rangle$. Summieren wir die Ungleichungen (5.36), und teilen wir durch N , so erhalten wir eine Bellsche Ungleichung [3] für Mittelwerte von Produkten von Spinmeßwerten

$$\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle - \langle \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_2 \rangle - \langle \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_2 \rangle \leq 1 . \quad (5.38)$$

Zur Herleitung dieser Bellschen Ungleichung haben wir nur angenommen, daß für drei Richtungen, $\vec{\mathbf{a}}$, $\vec{\mathbf{b}}$ und $\vec{\mathbf{c}}$, für jeden Versuch Nummer i die Ergebnisse \mathbf{a}_{1i} , \mathbf{b}_{1i} , \mathbf{b}_{2i} und \mathbf{c}_{2i} real sind, daß sie also Teilcheneigenschaften sind, die nicht davon abhängen, in welcher Richtung am einen oder anderen Teilchen tatsächlich gemessen wird. In der Quantenmechanik hingegen sind, falls $\vec{\mathbf{a}}$ nicht parallel $\vec{\mathbf{b}}$ ist, die Meßwerte \mathbf{a}_{1i} und \mathbf{b}_{1i} nicht real, sie stehen nicht beide fest. Man kann sie nicht gemeinsam im selben Versuch messen, sondern kann nur \mathbf{a}_{1i} und \mathbf{b}_{1j} in verschiedenen Versuchen $i \neq j$ bestimmen. Quantenmechanische Mittelwerte unterliegen daher keiner Bellschen Ungleichung.

Den Mittelwert von $\mathbf{a}_{1i} \mathbf{b}_{2i}$ können wir auch ausrechnen, indem wir für jeden möglichen Wert, den dieses Produkt haben kann, nämlich $+1$ oder -1 , die Häufigkeit N_+ und N_- zählen, mit der er auftritt. Dann ist $N_+ - N_- = \sum_{i=1}^N \mathbf{a}_{1i} \mathbf{b}_{2i}$ und $\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle = (N_+ - N_-)/N$.

Es ist aber, wenn N genügend groß ist, die relative Häufigkeit N_+/N die Wahrscheinlichkeit dafür, daß $\mathbf{a}_{1i} \mathbf{b}_{2i}$ den Wert $+1$ hat und N_-/N die Wahrscheinlichkeit für den Wert -1 . Die Wahrscheinlichkeit, mit der $\mathbf{a}_{1i} \mathbf{b}_{2i}$ den Wert $+1$ hat, ist $w(\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}}) + w(-\vec{\mathbf{a}}, -\vec{\mathbf{b}})$, mit Wahrscheinlichkeit $w(\vec{\mathbf{a}}, -\vec{\mathbf{b}}) + w(-\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}})$ hat das Produkt den Wert -1 . Demnach gehört zur quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.32) der Mittelwert

$$\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle = \frac{1}{2}(1 - \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}) - \frac{1}{2}(1 + \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}) = -\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} = -\cos \beta . \quad (5.39)$$

Er ist also durch das Skalarprodukt der normierten Richtungsvektoren gegeben. Ebenso ist $\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_2 \rangle = -\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{c}}$ und $\langle \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_2 \rangle = -\vec{\mathbf{b}} \cdot \vec{\mathbf{c}}$.

Als Funktion der Richtung $\vec{\mathbf{c}}$ wird die Differenz

$$\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle - \langle \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_2 \rangle - \langle \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_2 \rangle = -\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} + \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{c}} + \vec{\mathbf{b}} \cdot \vec{\mathbf{c}} = -\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} + (\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{b}}) \cdot \vec{\mathbf{c}} \quad (5.40)$$

maximal, falls $\vec{\mathbf{c}}$ den Winkel zwischen $\vec{\mathbf{a}}$ und $\vec{\mathbf{b}}$ halbiert und in Richtung von $\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{b}}$ zeigt. Dann hat $(\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{b}}) \cdot \vec{\mathbf{c}}$ den Wert $|\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{b}}| = \sqrt{2 + 2\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}}$, und die Differenz ist

$$\langle \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_2 \rangle - \langle \mathbf{a}_1 \mathbf{c}_2 \rangle - \langle \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_2 \rangle = -\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} + \sqrt{2 + 2\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}} . \quad (5.41)$$

Für $\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} = -1/2$, falls der Winkel zwischen $\vec{\mathbf{a}}$ und $\vec{\mathbf{b}}$ 120 Grad beträgt, wird diese Differenz maximal und hat dann den Wert $3/2$. Er verletzt die Bellsche Ungleichung (5.38). Quantenmechanik ist nicht verträglich mit der Unterstellung, daß in jedem Fall für jede Messung das Ergebnis festliegt und unabhängig davon ist, welche Messung tatsächlich vorgenommen wird.

Daß quantenmechanische Mittelwerte mit den experimentellen Befunden übereinstimmen [4] und nicht den Bellschen Ungleichungen genügen, ist weltbilderschütternd. Die

physikalischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen können nicht durch unbekannte, zufällig unsichere Parameter verursacht sein, die im Einzelfall jedes Meßergebnis festlegen unabhängig davon, welche Messung tatsächlich durchgeführt wird. In der Quantenphysik gibt es nicht eine Ursache für jedes Meßergebnis, sondern lediglich Ursachen für Wahrscheinlichkeiten von Meßergebnissen.

5.6 Meßprozeß und Zustandsreduktion

Durchläuft ein Teilchen einen Meßapparat, so bewirkt es eine Anzeige. Bedenkt man, wie dieser Vorgang quantenmechanisch zu verstehen sei, so muß man berücksichtigen, daß sich während der Messung die Anzeige ändert, daß es sich also bei den Zuständen, die sich während der Messung ändern, nicht nur um ein Folge von Teilchenzuständen, sondern um Paarzustände des Teilchens und des Apparates handelt, bei dem sich die Anzeige ändert.

Daher fassen wir das zu vermessende Teilchen mit dem Apparat A zu einem größeren System zusammen, das wir mit Apparaten B vermessen. Vor der Messung sei das Teilchen im Zustand ψ und der Apparat A im Zustand ϕ . Zusammen bilden sie den Paarzustand $\psi \otimes \phi$, in dem alle Eigenschaften des Teilchens unabhängig vom Apparat und alle Eigenschaften des Apparates unabhängig vom Teilchen sind.

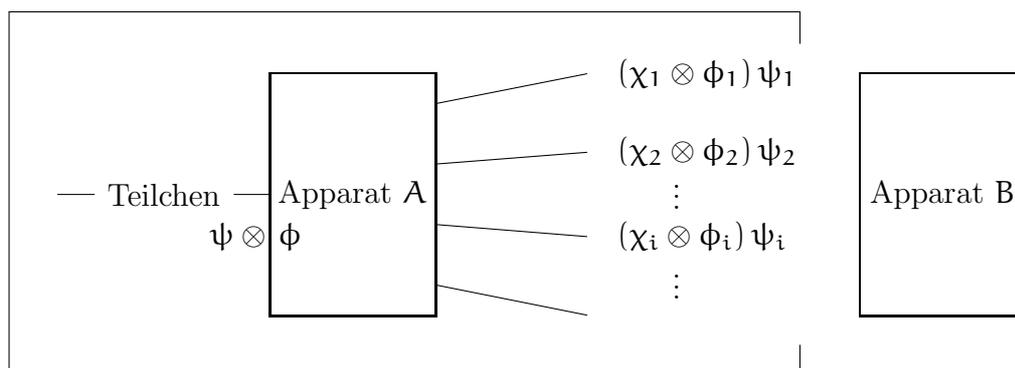


Abbildung 5.1: Meßprozeß

Durch unitäre Zeitentwicklung im Apparat entsteht hieraus am Ausgang ein Zustand, den wir mit einer orthonormalen Produktbasis $\Gamma_j \otimes \phi_i$ und Koeffizienten ψ_{ji} als

$$\mathbf{U}(\psi \otimes \phi) = \sum_{ij} (\Gamma_j \otimes \phi_i) \psi_{ji} \quad (5.42)$$

schreiben können. Die Basis sei so gewählt, daß in den Zuständen ϕ_i der Apparat mit Sicherheit den i -ten Meßwert anzeigt, daß also die $\Gamma_j \otimes \phi_i$ Eigenzustände des Apparates $B = 1 \otimes \hat{A}$ sind, der die Anzeige von A abliest.

Beispielsweise denke man bei den Zuständen ϕ_i an Photonen, mit denen man sehen kann, ob das Teilchen durch den i -ten Ausgang von A gelaufen ist.

Ist der anfängliche Teilchenzustand ein Eigenzustand Λ_i des Meßapparates A , so zeigt die Anzeige mit Sicherheit den i -ten Wert. Also gilt für die Zeitentwicklung im Apparat

$$U(\Lambda_i \otimes \phi) = \chi_i \otimes \phi_i, \quad (5.43)$$

wobei der jeweilige Teilchenzustand χ_i normiert ist, da U unitär ist und ϕ_i , Λ_i und ϕ normiert sind. Zerlegen wir den Teilchenzustand $\psi = \sum_i \Lambda_i \langle \Lambda_i | \psi \rangle$ in diese Eigenbasis der Λ_i mit komplexen Koeffizienten $\psi_i \in \mathbb{C}$, so erhalten wir, weil U linear ist,

$$U(\psi \otimes \phi) = \sum_i (\chi_i \otimes \phi_i) \langle \Lambda_i | \psi \rangle. \quad (5.44)$$

Es ist $\psi_i = \langle \Lambda_i | \psi \rangle = \langle \Lambda_i \otimes \phi | \psi \otimes \phi \rangle = \langle \chi_i \otimes \phi_i | U(\psi \otimes \phi) \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude und $|\psi_i|^2$ die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des i -ten Meßwertes.

Die Zeitentwicklung im Meßapparat verschränkt den Teilchenzustand mit der Anzeige des Apparats.

Damit der Apparat A ein Meßapparat ist, ist nicht erforderlich, daß die χ_i zueinander orthogonal sind. Insbesondere ist nicht erforderlich, daß es sich um eine nichtstörende (quantum non demolition) Messung handelt, die aus jedem anfänglichen Eigenzustand Λ_i den Eigenzustand $\chi_i = \Lambda_i$ zur erneuten Messung präpariert.

Viele Meßapparate präparieren nicht Eigenzustände zur erneuten Messung. Dies gilt insbesondere bei jeder Messung der Zahl von Photonen, die eine Detektorfläche innerhalb einer Nachweisdauer durchströmen: Photoschichten und Photomultiplier zählen Photonen, indem sie sie vernichten.

Falls die Zustände χ_i zueinander orthogonal sind, kann man durch späteres Messen des Teilchens den Wert der Anzeige \hat{A} sicher bestimmen. Dann sind die Teilchenzustände und die Eigenzustände der Anzeige \hat{A} bis auf Wahl der Phasen eine Basis der Schmidtzerlegung (5.6) von $U(\psi \otimes \phi)$.

Wenn man den Zustand, nachdem er den Apparat A durchlaufen hat, anschließend mit einem Apparat $B = C \otimes 1$ mißt, der unempfindlich vom Apparat A ist, und dabei die Anzeige \hat{A} abliest, so gehören zu diesem kombinierten Meßapparat $C \otimes \hat{A}$ Eigenzustände $\Gamma_k \otimes \phi_i$. Nach Grundgleichung ergibt sich der k -te Meßwert von C und die Anzeige i des Meßapparates A mit der Wahrscheinlichkeit

$$w((k, i), C \otimes \hat{A}, U(\psi \otimes \phi)) = |\langle \Gamma_k \otimes \phi_i | U(\psi \otimes \phi) \rangle|^2 = |\langle \Gamma_k | \chi_i \rangle \psi_i|^2. \quad (5.45)$$

Insbesondere ist für jede anschließende Messung C am Teilchen die *bedingte* Wahrscheinlichkeit, den k -ten Meßwert unter der Bedingung zu erhalten, daß \hat{A} den i -ten Meßwert anzeigt,

$$w((k, i), C \otimes \hat{A}, U(\psi \otimes \phi)) / w(i, A, \psi) = |\langle \Gamma_k | \chi_i \rangle|^2 = w(k, C, \chi_i), \quad (5.46)$$

als hätte der Apparat den Zustand χ_i präpariert.

Durch keine Messung C an den Teilchen, die den i -ten Meßwert ergeben haben, kann man den ursprünglichen Zustand ψ erschließen, aus dem χ_i präpariert worden ist.

Diese Reduktion des ursprünglichen Teilchenzustandes ψ bei Auftreten der i -ten Anzeige von A erfolgt nicht dynamisch durch eine geheimnisvoll unverständliche Zeitentwicklung, die von unitärer Zeitentwicklung verschieden wäre, sondern durch Beschränkung auf Messungen $C \otimes \hat{A}$ und durch Beschränkung der Betrachtung auf die Untermenge der Ereignisse, in denen \hat{A} den i -ten Wert anzeigt.

Werden alle Ausgänge des Apparates A nach der Messung zu einem neuen Strahl zusammengefaßt, so ist für jede anschließende Messung C am Teilchen die Wahrscheinlichkeit den k -ten Meßwert zu erhalten, egal was A anzeigt,

$$w(k, C, \rho) = \sum_i |\langle \Gamma_k | \chi_i \rangle \psi_i|^2 = \langle \Gamma_k | \rho \Gamma_k \rangle, \quad \text{mit} \quad \rho = \sum_i |\psi_i|^2 |\chi_i\rangle \langle \chi_i|, \quad (5.47)$$

durch die Dichtematrix ρ gegeben, als hätte der Meßapparat A aus einem reinen Teilchenzustand ψ ein Gemisch $\sum_i |\psi_i|^2 |\chi_i\rangle \langle \chi_i|$ erzeugt. Die dazugehörige Entropie entsteht nicht durch die unitäre Zeitentwicklung, sondern durch unvollständige Messung und Verwerfen der Kenntnisse, die man über die Anzeige des Apparates A haben kann.

Für die Dekohärenz der Teilstrahlen $(\chi_i \otimes \phi_i) \psi_i$ ist nicht entscheidend, ob der Meßapparat mit \hat{A} abgelesen wird, sondern daß die Zustände χ_i mit Zuständen ϕ_i verschränkt sind, die ein Ablesen ermöglichen.

6 Grundlagen der Thermodynamik

6.1 Entropie

Die Entropie einer Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt bei wiederholten Messungen die Unkenntnis der genauen Reihenfolge der verschiedenen auftretenden Ergebnisse.

Sei $n = \sum n_i$ die Gesamtzahl der Versuche und n_i die Häufigkeit des i -ten Ergebnisses, $i = 1, \dots, N$, dann strebt n_i/n mit zunehmender Gesamtzahl n gegen die Wahrscheinlichkeit $p_i \neq 0$. Für diese Häufigkeiten gibt es

$$\frac{n!}{n_1!n_2! \dots n_N!} \quad (6.1)$$

verschiedene Reihenfolgen der Ergebnisse. Der Kehrwert dieser Anzahl ist die Sicherheit, mit der wir die einzelne Reihenfolge voraussagen können. Er strebt gemäß der Stirling'schen Formel

$$n! = \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} f(n), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} f(n) = 1, \quad (6.2)$$

für zunehmendes n bis auf einen Faktor, der gegen Eins geht, gegen

$$\sqrt{2\pi n}^{N-1} \left(\frac{n_1}{n}\right)^{(n_1+\frac{1}{2})} \dots \left(\frac{n_N}{n}\right)^{(n_N+\frac{1}{2})} \rightarrow \sqrt{2\pi}^{N-1} \sqrt{p_1 \dots p_N} e^{-nS+(N-1)/2 \ln n}. \quad (6.3)$$

Der im Exponenten bei n auftretende Koeffizient ist die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i. \quad (6.4)$$

Die Entropie ist nichtnegativ, da die Wahrscheinlichkeiten p_i zwischen Null und Eins variieren. Falls allgemeiner einige p_i verschwinden, sei $p_i \ln p_i$ stetig durch Null ergänzt.

Bei einem Gemisch sind fehlende Polarisation oder Größen wie $1 - (\text{tr } \rho^2)$ ein Maß dafür, wie sehr das präparierte Gemisch ρ von einem reinen Zustand abweicht. Aber ein günstigeres Maß für die Unkenntnis über den präparierten Zustand ist die Entropie des Gemisches.

Wir definieren sie als Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte von solchen Apparaten A mit nichtentarteten Meßwerten, deren Eigenzustände auch Eigenzustände der Dichtematrix ρ sind,¹ $w(i, A, \rho) = \langle \Upsilon_i | \rho \Upsilon_i \rangle = \rho_i$,

$$S = - \sum_i \rho_i \ln \rho_i = - \text{tr } \rho \ln \rho, \quad \rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i. \quad (6.5)$$

¹Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

Die Entropie eines reinen Zustands verschwindet. Sie addiert sich beim unabhängigen Zusammensetzen zweier Systeme, ändert sich nicht während der Schrödingerschen Zeitentwicklung und nimmt beim Mischen und bei zufälligen Störungen zu. Mißt man das Gemisch ρ mit einem Apparat B , dessen Meßwerte nicht entartet sind und der nicht mit ρ vertauscht, so ist die Entropie ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilung größer als die Entropie des Gemisches selbst. Diese Eigenschaften zeigen wir mit den folgenden Betrachtungen.

Ist ein Gemisch unabhängig aus zwei Teilen zusammengesetzt

$$\rho = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho} , \quad (6.6)$$

so sind die Eigenzustände Produktzustände $\hat{\Upsilon}_i \otimes \tilde{\Upsilon}_j$ von Eigenzuständen der Dichtematrizen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$. Die Eigenwerte der zusammengesetzten Dichtematrix sind die Produkte der Eigenwerte der einzelnen Dichtematrizen

$$\rho_{ij} = \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j , \quad \sum_i \hat{\rho}_i = 1 , \quad \sum_j \tilde{\rho}_j = 1 . \quad (6.7)$$

Daher addiert sich die Entropie unabhängig zusammengesetzter Systeme.

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{ij} \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln(\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j) = - \sum_{ij} (\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \hat{\rho}_i + \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j) \\ &= - \left(\sum_j \tilde{\rho}_j \right) \sum_i \hat{\rho}_i \ln \hat{\rho}_i - \left(\sum_i \hat{\rho}_i \right) \sum_j \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j = \hat{S} + \tilde{S} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Die Dichtematrix ändert sich im Laufe der Zeit (4.7), allerdings ändern sich nicht die Eigenwerte ρ_i durch die Schrödingersche Zeitentwicklung. Überträgt man in (2.79) angemessen die Notation, so folgt nämlich aus (2.79), (4.7) und der Eigenwertgleichung $\rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i$, daß $\partial_t \rho_i(t) = 0$ ist, denn in Eigenzuständen eines hermiteschen Operators ρ verschwindet der Erwartungswert jedes Kommutators $[H, \rho]$.

$$i\hbar \partial_t \rho_i(t) = i\hbar \langle \Upsilon_i | \partial_t \rho(t) | \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho - \rho H) | \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho_i - \rho_i H) | \Upsilon_i \rangle = 0 \quad (6.9)$$

Demnach bleibt die Entropie unverändert, solange sich die Zustände im Gemisch nach der Schrödingergleichung entwickeln.

Bei echtem Mischen von Gemischen wächst die Entropie. Ist ein Gemisch $\rho(\lambda)$ aus verschiedenen Gemischen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho} \neq \tilde{\rho}$, gemischt

$$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad \text{mit} \quad 0 < \lambda < 1 , \quad (6.10)$$

so ist Entropie $S(\rho(\lambda))$ um die Mischungsentropie größer als die anteilige Summe der Entropien.

$$S(\rho(\lambda)) > \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda) S(\tilde{\rho}) . \quad (6.11)$$

Bevor wir diese Behauptung zeigen, zwei Vorbemerkungen:

Wenn $\hat{\rho} \neq \tilde{\rho}$ und $\lambda \neq \lambda'$ ist, so ist auch $\rho(\lambda) \neq \rho(\lambda')$.

Der Nullraum von $\rho(\lambda)$ hängt für $0 < \lambda < 1$ nicht von λ ab. Für jedes gewählte λ verschwinden nämlich im Nullraum von $\rho(\lambda)$ auch $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$ und demnach auch $\rho(\lambda')$,

$$\begin{aligned} \langle \Lambda | (\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) \Lambda \rangle = 0 &\Rightarrow \langle \Lambda | \hat{\rho} \Lambda \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \Lambda | \tilde{\rho} \Lambda \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \hat{\rho} \Lambda = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{\rho} \Lambda = 0 . \end{aligned} \quad (6.12)$$

Die erste Folgerung gilt, weil λ und $(1 - \lambda)$ größer Null und Hauptdiagonalelemente von Dichtematrizen nichtnegativ (1.42) sind. Die zweite Folgerung ist richtig, weil Hauptdiagonalelemente $\langle \Lambda | \rho \Lambda \rangle$ einer Dichtematrix ρ nur verschwinden, wenn $\rho \Lambda = 0$ ist (1.43).

Nach diesen Vorbemerkungen beweisen wir für verschiedene Dichtematrizen ρ und ρ' , $\rho \neq \rho'$, wobei ρ' nichtverschwindende Eigenwerte habe, den Hilfssatz

$$\text{tr } \rho \ln \rho' < \text{tr } \rho \ln \rho . \quad (6.13)$$

Werten wir nämlich die Spur in der Eigenbasis Υ_i von ρ aus und schieben wir eine Zerlegung der Eins mit den Eigenzuständen Υ'_i von ρ' ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \text{tr } \rho (\ln \rho' - \ln \rho) &= \sum_{ij} \langle \Upsilon_i | \rho \Upsilon'_j \rangle \langle \Upsilon'_j | (\ln \rho' - \ln \rho) \Upsilon_i \rangle \\ &= \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i (\ln \rho'_j - \ln \rho_i) \\ &= \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i \ln \frac{\rho'_j}{\rho_i} . \end{aligned} \quad (6.14)$$

Es gilt für positive x die Abschätzung $\ln x \leq (x - 1)$, wobei Gleichheit nur für $x = 1$ auftritt. Wenn die Matrizen ρ und ρ' verschieden sind, gibt es mindestens ein Paar von Eigenwerten ρ'_j und ρ_i , $\rho'_j \neq \rho_i$, mit Eigenvektoren Υ'_j und Υ_i , deren Skalarprodukt nicht verschwindet.

Also folgt der Hilfssatz

$$\begin{aligned} \text{tr } \rho (\ln \rho' - \ln \rho) &< \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i \left(\frac{\rho'_j}{\rho_i} - 1 \right) = \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 (\rho'_j - \rho_i) = \\ &= \sum_{ij} \langle \Upsilon'_j | \rho' \Upsilon_i \rangle \langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle - \sum_{ij} \langle \Upsilon'_j | \rho \Upsilon_i \rangle \langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle = \text{tr } \rho' - \text{tr } \rho = 0 . \end{aligned} \quad (6.15)$$

Wenn $\hat{\rho} \neq \tilde{\rho}$ und $0 < \lambda < 1$ ist, so ist auch $\hat{\rho} \neq \rho(\lambda) \neq \tilde{\rho}$. Wir verwenden den Hilfssatz, wobei wir für ρ' die Dichtematrix $\rho(\lambda)$ einsetzen und für ρ die Matrizen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$. Dabei nehmen wir die Spur über den Unterraum, der orthogonal zum Nullraum von $\rho(\lambda)$ ist.

Aus dem Hilfssatz folgen dann die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \text{tr } \hat{\rho} \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) &< \text{tr } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} , \\ \text{tr } \tilde{\rho} \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) &< \text{tr } \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} . \end{aligned} \quad (6.16)$$

Multiplizieren wir die erste Ungleichung mit λ , $0 < \lambda < 1$, und die zweite mit $(1 - \lambda)$ und addieren wir, so erhalten wir

$$\text{tr}(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) < \lambda \text{tr } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} + (1 - \lambda) \text{tr } \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} \quad (6.17)$$

Drehen wir schließlich das Vorzeichen um, so erhalten wir für die Entropie von Mischungen von $\hat{\rho}$ mit $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho} \neq \tilde{\rho}$, für $0 < \lambda < 1$

$$S(\rho(\lambda)) > \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda)S(\tilde{\rho}) . \quad (6.18)$$

Die Entropie eines Gemisches ist größer als die anteilige Summe der Entropien der Bestandteile. Entropie nimmt durch Mischen zu.

Das Gemisch $\rho(\lambda)$ läßt sich aus Gemischen $\rho(\lambda_1)$ und $\rho(\lambda_2)$ mit benachbarten Mischungsparametern $0 \leq \lambda_1 < \lambda < \lambda_2 \leq 1$ mischen.

$$\rho(\lambda) = \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_1) + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_2) \quad (6.19)$$

Demnach ist die Entropie $S(\rho(\lambda))$ eine konkave Funktion des Mischungsparameters λ .

$$S(\rho(\lambda)) > \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} S(\rho(\lambda_1)) + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} S(\rho(\lambda_2)) \quad (6.20)$$

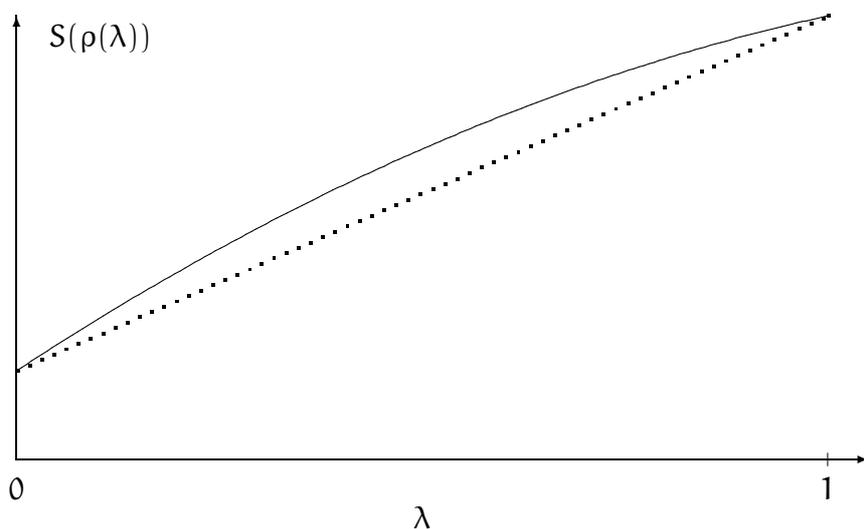


Abbildung 6.1: Entropie als konkave Funktion des Mischungsparameters

Zufällige Störung der Zeitentwicklung ist ein Mischprozeß und erhöht die Entropie. Stellen wir uns in Abbildung (1.1) vor, daß die Teilchen im Strahl durch ein unvollkommenes Vakuum fliegen, und berücksichtigen wir nur die beiden Alternativen, daß mit Wahrscheinlichkeit λ kein Atom des Restgases den Strahl stört und daß mit Wahrscheinlichkeit $(1 - \lambda)$ ein Atom den Strahl stört. Bezeichnen wir die Gemische, die sich ohne und mit Störung entwickeln als $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$, so liegt am Eingang des Meßapparates das Gemisch $\lambda\hat{\rho} + (1 - \lambda)\tilde{\rho}$ vor, falls die Störung durch das Restatom zufällig, also unabhängig von der Präparation in der Quelle, erfolgt.

Mißt man das Gemisch ρ mit einem Apparat B, dessen Meßwerte nicht entartet sind und der nicht mit ρ vertauscht, so ist die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung

dieser Werte größer als die Entropie des Gemisches selbst. Denn bezeichne Λ_i die Eigenzustände von B , so tritt der i -te Meßwert mit Wahrscheinlichkeit p_i auf,

$$p_i = \langle \Lambda_i | \rho | \Lambda_i \rangle = \sum_n \rho_n P_{in} , \quad P_{in} = |\langle \Lambda_i | \Upsilon_n \rangle|^2 . \quad (6.21)$$

Das ist die Wahrscheinlichkeit P_{in} , daß der i -te Meßwert auftritt, falls Υ_n vermessen wird, mal der Wahrscheinlichkeit ρ_n , daß Υ_n im Gemisch $\rho = \sum_n \rho_n |\Upsilon_n\rangle \langle \Upsilon_n|$ vorliegt.

Die dabei auftretenden Koeffizienten P_{in} sind Matrixelemente einer doppelt stochastischen Matrix P , deren Zeilen und deren Spalten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind, das heißt, ihre Matrixelemente sind nicht negativ und sind für jedes n eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Werten von i und für jedes i eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Werten von n ,

$$\sum_i P_{in} = 1 , \quad \sum_n P_{in} = 1 . \quad (6.22)$$

Die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der nichtentarteten Meßwerte von B , die sich bei Vermessen des Gemisches ρ ergibt, ist $S(B, \rho) = -\sum_i p_i \ln p_i$. Um zu zeigen, daß sie größer ist als die Entropie, wenn wir dasselbe Gemisch mit einem Apparat vermessen, dessen nichtentartete Eigenzustände die Eigenzustände von ρ sind, $S(A, \rho) = -\sum_n \rho_n \ln \rho_n$, untersuchen wir die Differenz, verwenden $p_i = \sum_n \rho_n P_{in}$,

$$S(B, \rho) - S(A, \rho) = -\sum_i p_i \ln p_i + \sum_n \rho_n \ln \rho_n = \sum_n \rho_n \left(-\sum_i P_{in} \ln p_i + \ln \rho_n \right)$$

schieben im zweiten Term $\sum_i P_{in} = 1$ ein,

$$= \sum_{in} \rho_n P_{in} (-\ln p_i + \ln \rho_n) = \sum_{in} \rho_n P_{in} \ln(\rho_n/p_i) ,$$

und schätzen den Logarithmus nach unten durch $\ln x \geq 1 - 1/x$ ab,

$$\begin{aligned} &\geq \sum_{in} P_{in} (\rho_n - p_i) = \sum_n (\rho_n \sum_i P_{in}) - \sum_i (p_i \sum_n P_{in}) \\ &= \sum_n \rho_n - \sum_i p_i = 1 - 1 = 0 . \end{aligned} \quad (6.23)$$

Also ist, wie behauptet, die Entropie des Gemisches eine untere Schranke für die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung jeder nichtentarteten Messung, die am Gemisch vorgenommen wird.

6.2 Gleichgewicht

Wenn in Abbildung (1.1) das zu vermessende System vor der Messung wieder und wieder gestört worden ist, hängen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Meßwer-

te $w(i, \mathcal{A}, \rho(t))$ nicht mehr davon ab, wann gemessen wird. Nach der von-Neumann-Gleichung (4.7) vertauscht in solch einer Situation die Dichtematrix ρ mit dem Hamiltonoperator

$$i\hbar\partial_t\rho(t) = [H, \rho] = 0 \quad (6.24)$$

und beide haben gemeinsame Eigenzustände Λ_i

$$H\Lambda_i = E_i\Lambda_i, \quad \rho\Lambda_i = \rho_i\Lambda_i. \quad (6.25)$$

Da bei jeder vorhergehenden Störung die Entropie zugenommen hat, erwartet man, solche Gemische ρ zu finden, in denen die Entropie so groß wie möglich geworden ist. Solche zeitunabhängige Gemische, deren Entropie so groß wie möglich ist, definieren thermodynamisches Gleichgewicht.

Wird zum Beispiel Energie des Gemisches mit der Umgebung so ausgetauscht, daß der Mittelwert den festen Wert $\langle E \rangle$ hat – solch eine Umgebung nennt man ein Wärmebad – so ist im thermodynamischen Gleichgewicht die Entropie als Funktion der Eigenwerte ρ_i maximal, wobei die Eigenwerte ρ_i den Nebenbedingungen $\sum_i \rho_i = 1$ und $\sum_i \rho_i E_i = \langle E \rangle$ unterworfen sind. Wir berücksichtigen die Nebenbedingungen mit Lagrangeschen Multiplikatoren α und β und maximieren

$$S = - \sum_j \rho_j \ln \rho_j + \alpha(1 - \sum_j \rho_j) + \beta(\langle E \rangle - \sum_j \rho_j E_j). \quad (6.26)$$

Ableiten nach α und β ergibt die Nebenbedingungen und Ableiten nach ρ_i führt auf

$$0 = -(\ln \rho_i + 1) - \alpha - \beta E_i. \quad (6.27)$$

Demnach ist ρ_i durch die Boltzmannverteilung gegeben.

$$\rho_{\text{Boltzmann } i} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (6.28)$$

Den Normierungsfaktor Z bestimmt man aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i = 1$. Er ist die Zustandssumme.

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (6.29)$$

Die Zustandssumme ist die Laplacetransformierte der Dichte der Energieeigenzustände. Der Parameter β ist die inverse Temperatur

$$\beta = \frac{1}{T}, \quad (6.30)$$

die man aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i E_i = \langle E \rangle$ als Funktion des Energieerwartungswertes $\langle E \rangle$ implizit bestimmen kann.

$$\langle E \rangle = \sum_i \rho_i E_i = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} E_i = -\frac{1}{Z} \partial_\beta \sum_i e^{-\beta E_i} = -\partial_\beta \ln Z(\beta) \quad (6.31)$$

Der Logarithmus der Zustandssumme als Funktion von β ist eine Funktion, deren Ableitung den Energieerwartungswert bestimmt.

Die Entropie der Boltzmannverteilung hängt eng mit der Zustandssumme und dem Energiemittel zusammen.

$$S = - \sum_i \rho_i \ln \rho_i = - \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} (-\beta E_i - \ln Z) = \beta \langle E \rangle + \ln Z \quad (6.32)$$

Mit der freien Energie $F = \langle E \rangle - TS$ gilt daher

$$Z = e^{-\beta F} \quad (6.33)$$

und die Boltzmannverteilung schreibt sich als

$$\rho_i = e^{-\beta(E_i - F)} . \quad (6.34)$$

Die Wahrscheinlichkeiten ρ_i hängen nur von Energiedifferenzen und nicht vom absoluten Wert der Energie ab. Auch thermodynamisch ist der Wert der Grundzustandsenergie irrelevant. Die Behauptung „Kaltes Helium verfestigt sich nicht, weil die Grundzustandsenergie nicht verschwindet“ ist falsch.

Wenn kein Wärmebad den mittleren Energieinhalt des Systems ρ einstellt, fehlt in Gleichung (6.26) der Lagrangesche Multiplikator mit β und die Überlegungen laufen so ab wie mit $\beta = 0$. Die Entropie wird maximal bei Gleichverteilung $\rho_i = 1/N$, wobei N die Dimension des Hilbertraumes ist. Dann hat die Entropie den Wert

$$S = \ln N . \quad (6.35)$$

Ist die Dimension N unendlich, gibt es keinen Zustand maximaler Entropie.

Wichtige Spezialfälle von Systemen im thermischen Gleichgewicht sind der harmonische Oszillator und das Zweizustandssystem. Wählt man eine verschwindende Grundzustandsenergie, so lautet die Energieformel für den harmonischen Oszillator

$$E_n = n\mathcal{E} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.36)$$

Für das Zweizustandssystem hat E_n dieselbe Form, aber n durchläuft nur die Werte 0 und 1. Dies sind die Energien von freien, identischen Bosonen und Fermionen. $\mathcal{E} = \hbar\omega$ ist die Energie eines Teilchens. Ein Zustand mit mehreren Teilchen hat die mehrfache Einteilchenenergie, da die Teilchen frei sind. Das Pauli-Verbot verbietet $n \geq 2$ bei Fermionen.

Die Zustandssumme des harmonischen Oszillators ist eine geometrische Reihe,

$$Z_{\text{Boson}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \mathcal{E} n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \mathcal{E}}} , \quad (6.37)$$

die Zustandssumme des Zweizustandssystems ist so einfach, wie sie nicht einfacher sein kann,

$$Z_{\text{Fermion}} = 1 + e^{-\beta \mathcal{E}} . \quad (6.38)$$

Den Energieerwartungswert bestimmt man mit (6.31),

$$\langle E \rangle_{\text{Boson}} = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta \mathcal{E}} - 1}, \quad \langle E \rangle_{\text{Fermion}} = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta \mathcal{E}} + 1}. \quad (6.39)$$

Kompliziertere Systeme bestehen oft aus mehreren, verschiedenen Bosonen und Fermionen, zum Beispiel aus Photonen mit unterschiedlichem Wellenvektor \vec{k} , die wechselwirkungsfrei aus Teilsystemen zusammengesetzt sind.

Wir bezeichnen genauer ein System als frei zusammengesetzt, wenn der Hilbertraum ein Produktraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist und wenn der Hamiltonoperator $H = H_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_2$ sich aus Hamiltonoperatoren der Teilräume zusammensetzt. Dann gibt es Energieeigenzustände $\Lambda_{\mathbf{i}, \alpha}$, wobei \mathbf{i} eine Basis von \mathcal{H}_1 und α eine Basis von \mathcal{H}_2 abzählt, deren Energie sich aus den Teilenergien zusammensetzt.

$$E_{\mathbf{i}, \alpha} = E_1(\mathbf{i}) + E_2(\alpha) \quad (6.40)$$

Die Zustandssumme des Gesamtsystems ist in solch einem Fall das Produkt der einzelnen Zustandssummen

$$Z = \sum_{\mathbf{i}, \alpha} e^{-\beta(E_1(\mathbf{i}) + E_2(\alpha))} = \sum_{\mathbf{i}} e^{-\beta E_1(\mathbf{i})} \sum_{\alpha} e^{-\beta E_2(\alpha)} = Z_1 Z_2, \quad (6.41)$$

und die Energieerwartungswerte addieren sich.

$$\langle E \rangle = \langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle \quad (6.42)$$

7 Zerfall eines instabilen Teilchens

7.1 Lorentzresonanz

Wir betrachten einen Hamiltonoperator mit kontinuierlichen Energien und kontinuierlich normierten Energieeigenzuständen $\Lambda_{E,p}$

$$H\Lambda_{E,p} = E\Lambda_{E,p} \quad \langle \Lambda_{E,p} | \Lambda_{E',p'} \rangle = \delta(E - E')\delta(p - p') . \quad (7.1)$$

Die Variable p unterscheidet energieentartete Zustände. Stellen wir Zustände $\Psi(t)$, die die Schrödingergleichung erfüllen, als Linearkombination dieser kontinuierlichen Basis dar, so hat $\Psi(t)$ folgende Form

$$\Psi(t) = \int dE dp \Lambda_{E,p} \psi(E,p) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad \psi(E,p) = \langle \Lambda_{E,p} | \Psi(0) \rangle . \quad (7.2)$$

Ein Meßapparat, der nachprüft, ob der normierte Anfangszustand $\Psi(0)$ vorhanden ist, findet zur Zeit t diesen Zustand mit der Wahrscheinlichkeit

$$w(t) = |a(t)|^2 , \quad (7.3)$$

$$a(t) = \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = \int dE F(E)^2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} , \quad (7.4)$$

wobei wir mit

$$F(E)^2 = \int dp |\langle \Lambda_{E,p} | \Psi(0) \rangle|^2 \quad (7.5)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte bezeichnen, bei Energiemessung den Wert E zu erhalten.

Diese Wahrscheinlichkeit nimmt mit der Zeit t exponentiell ab, wenn es sich bei dem Zustand um eine Lorentzresonanz handelt.

$$F_{\text{Lorentz}}(E) = \left| \sqrt{\frac{\Gamma}{2\pi}} \frac{1}{(E - E_0) + i\frac{\Gamma}{2}} \right| \quad (7.6)$$

Es sind E_0 die Resonanzenergie und $\Gamma \geq 0$ die Breite der Resonanzkurve.

Allerdings sind Resonanzenergie und Breite nicht als Energieerwartungswert $\langle H \rangle$ und Energieunschärfe ΔH definiert. Diese Größen divergieren, weil die Funktion $F(E)$ nicht schnell genug abfällt (vergleiche Abschnitt (2.2)). Es erfüllt $\Psi(t) = \exp(-iHt/\hbar)\Psi(0)$ die integrierte Schrödingergleichung, aber $\Psi(t)$ ist zu keinem Zeitpunkt differenzierbar, $\|H\Psi(t)\|$ divergiert.

Man kann die Amplitude

$$\mathbf{a}_{\text{Lorentz}}(\mathbf{t}) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int dE \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (7.7)$$

mit dem Residuensatz auswerten, weil man für positive (negative) Zeiten den Integrationsweg in der unteren (oberen) komplexen Halbebene schließen kann, und erhält

$$\mathbf{a}_{\text{Lorentz}}(\mathbf{t}) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t} e^{-\frac{|\Gamma t|}{2\hbar}}. \quad (7.8)$$

Es nimmt also die Wahrscheinlichkeit $w(\mathbf{t})$, zur Zeit $t > 0$ die Lorentzresonanz noch vorzufinden, exponentiell ab.

$$w_{\text{Lorentz}}(\mathbf{t}) = e^{-t/\tau} \quad \text{für } t > 0 \quad (7.9)$$

Die Lebensdauer ist die inverse Breite, $\tau = \hbar/\Gamma$, was als Unschärferelation

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar/2 \quad (7.10)$$

gelesen wird. Diese Unschärferelation ist allerdings problematisch: ΔE divergiert und nicht t wird gemessen sondern die Eigenschaft, zur Zeit t noch die Lorentzresonanz $\Psi(0)$ zu sein.

Die Breite Γ ist die Zerfallsrate des exponentiell zerfallenden Zustandes

$$\Gamma = -\hbar \frac{1}{w(\mathbf{t})} \frac{d}{dt} w(\mathbf{t}). \quad (7.11)$$

Der Gleichung (7.4) entnimmt man, daß die Phase von $\psi(E, \mathbf{p})$ ohne Bedeutung ist. Dies ist verständlich, denn jede kontinuumsnormierte Basis $\Lambda'_{E, \mathbf{p}} = e^{i\varphi(E, \mathbf{p})} \Lambda_{E, \mathbf{p}}$ mit beliebiger, reeller Funktion $\varphi(E, \mathbf{p})$ hätte ebenso gut verwendet werden können. Es gibt nämlich, anders als bei Ort und Impuls, keinen zum Hamiltonoperator konjugierten Operator T mit Vertauschungsrelation $[T, H] = i\hbar$. Solch ein Operator wäre in einer Energiebasis $T = i\hbar \partial_E$ und würde die relativen Phasen der Basis $\Lambda_{E, \mathbf{p}}$ fixieren.

Ebenso ist das Vorzeichen von Γ ohne Bedeutung, wie man an (7.7) sieht. Die Zerfallsrate ist $|\Gamma|$.

7.2 Abweichungen vom exponentiellen Zerfall

Streng genommen gibt es keine Lorentzresonanz, weil jeder realistische Hamiltonoperator ein nach unten beschränktes Spektrum hat ($\psi(E, \mathbf{p}) = 0$ für $E < E_{\min}$), und weil der Energieerwartungswert endlich sein muß. Die Lorentzresonanz ist also für kleine und große Energien unrealistisch. Es gibt auch streng genommen keinen exponentiellen Zerfall.

Es gibt keine Zustände, die der differentiellen Schrödingergleichung $i\hbar \partial_t \Psi = H\Psi$ genügen und die zu allen Zeiten einem exponentiellen Zerfallsgesetz genügen. Es ist nämlich

$w(t)$ eine Wahrscheinlichkeit, die differenzierbar ist, wenn $\Psi(t)$ differenzierbar ist, und die zur Zeit $t = 0$ maximal ist, $w(0) = 1$. Daher verschwindet dann ihre Zeitableitung

$$\frac{d}{dt}w(t)|_{t=0} = 0 \quad (7.12)$$

und exponentieller Zerfall ist für kleine Zeiten unmöglich.

Alle Abweichungen vom exponentiellen Zerfall beruhen darauf, daß die Zerfallsprodukte wieder den ursprünglichen Zustand aufbauen. Dies sieht man mit folgender Zerlegung der Amplitude

$$\alpha(t + t') = \langle \Psi(0) | \Psi(t + t') \rangle = \langle \Psi(0) | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \Psi(0) \rangle . \quad (7.13)$$

Schiebt man zwischen die e-Funktionen eine Zerlegung der Eins¹

$$\mathbb{1} = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)| + \sum_n |\Upsilon_n\rangle\langle\Upsilon_n| , \quad (7.14)$$

wobei die Zustände Υ_n den Anfangszustand $\Psi(0)$ zu einer Orthonormalbasis ergänzen und für die Zerfallsprodukte stehen, so sieht man

$$\alpha(t + t') = \alpha(t)\alpha(t') + \sum_n \langle \Psi(0) | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon_n \rangle \langle \Upsilon_n | e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \Psi(0) \rangle . \quad (7.15)$$

Der letzte Term ist die Amplitude für Zerfall und Wiedererzeugung des Anfangszustandes. Verschwände dieser letzte Term, so ergäbe sich die Relation $\alpha(t + t') = \alpha(t)\alpha(t')$, aus der exponentieller Zerfall folgte. Da die Zerfallsprodukte den Ort des Geschehens verlassen und da dabei ihre Dichte abnimmt, sollte man bei lokalen Wechselwirkungen vermuten, daß Abweichungen vom exponentiellen Zerfall nur bei Zeitauflösungen zu beobachten sind, die klein gegen die Flugdauer sind, innerhalb derer sich die Zerfallsprodukte so verdünnen, daß die Wiedererzeugung vernachlässigbar wird.

Auch für große Zeiten muß es Abweichungen vom exponentiellen Zerfall geben, falls der zerfallende Zustand durch Wirkung des Hamiltonoperators H während der Zeiten $t < 0$ erzeugt worden ist. Die Forderung, daß die Schrödingergleichung auch zu negativen Zeiten gelolten hat, ist allerdings nicht zwingend: was bei Präparation und Messung geschieht, hängt vom Aufbau der Quelle und des Meßapparates ab und wird nicht unbedingt durch den Hamiltonoperator H beschrieben (vergleiche Abschnitt (5.6)).

Akzeptieren wir aber (7.2) für alle Zeiten, so ist der Betrag der Amplitude $\alpha(t)$ für positive Zeiten genau dann exponentiell abfallend und durch $Ce^{-t/\tau}$ mit positiven Konstanten C und τ beschränkt, wenn $|\alpha(t)| < Ce^{-|t|/\tau}$ zu allen Zeiten gilt. In diesem Fall ist die Fouriertransformierte

$$\tilde{\alpha}(E) = \int \frac{dt}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \alpha(t) \quad (7.16)$$

eine analytische Funktion komplexer Energien E im Streifen $|\Im(E)| < \hbar/\tau$, die zudem für reelle Energien $E = E^* < E_{\min}$ unterhalb der Minimalenergie verschwindet, wenn

¹Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

die Energie nach unten beschränkt ist. Daher muß $\tilde{\alpha}(E)$ verschwinden. Dies steht aber im Widerspruch zu $\alpha(t) = \int \frac{dE}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}Et} \tilde{\alpha}(E)$ und $\alpha(0) = 1$. Daher kann der Betrag der Amplitude $\alpha(t)$ nicht exponentiell beschränkt sein sondern muß für große Zeiten langsamer abfallen.

7.3 Goldene Regel

Ein Energieeigenzustand kann nicht zerfallen, da aus $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(0)$ für reelle Energie E sich $w(t) = 1$ ergibt. Herleitungen des exponentiellen Zerfallsgesetzes für einen Zustand, dem eine definierte Energie zugeschrieben wird, widersprechen sich daher selbst. Auch kann die Energie E keinen negativen Imaginärteil $\Gamma/2$ haben. Dies würde zwar zu $w(t) = e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}}$ führen und wird verwendet, um zerfallende Zustände zu parametrisieren ohne die Zerfallsprodukte beschreiben zu müssen. Ein Hamiltonoperator, der die Zeitentwicklung eines zerfallenden Zustandes vollständig beschreibt, muß aber auch die Zerfallsprodukte und ihre Zeitentwicklung beschreiben. Er muß hermitesch sein, damit $\Psi(t)$ zu allen Zeiten normiert bleibt, und kann nur reelle Eigenwerte haben.

Betrachten wir einen Hilbertraum, der von einem normierten Zustand Υ und von dazu orthogonalen, kontinuumsnormierten Basiszuständen $\Lambda_{E,p}$ mit $E \geq E_{\min}$ aufgespannt wird

$$\langle \Upsilon | \Upsilon \rangle = 1, \quad \langle \Upsilon | \Lambda_{E,p} \rangle = 0, \quad \langle \Lambda_{E,p} | \Lambda_{E',p'} \rangle = \delta(E - E') \delta(p - p'). \quad (7.17)$$

Diese Basis sei der Zerlegung

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \quad (7.18)$$

des Hamiltonoperators angepaßt und so gewählt, daß Υ ein normierter H_0 -Eigenzustand mit Eigenwert $E_0 > E_{\min}$ im Kontinuum ist und daß $\Lambda_{E,p}$ zum Kontinuum von H_0 gehörende, verallgemeinerte Eigenzustände mit einem Entartungsindex p sind

$$H_0 \Upsilon = E_0 \Upsilon, \quad H_0 \Lambda_{E,p} = E \Lambda_{E,p}, \quad E \geq E_{\min}. \quad (7.19)$$

Konkreter kann man bei Υ an ein angeregtes Atom denken und bei $\Lambda_{E,p}$ an die Zweiteilchenzuständen aus abgeregtem Atom und Photon. Die Energie E ist kontinuierlich, weil die möglichen Energien von Photonen, $E = \hbar\omega = c|\vec{p}|$, kontinuierlich sind. Die Zweiteilchenzustände $\Lambda_{E,p}$ von Atom und Photon sind Energie-entartet, denn das Photon kann in alle möglichen Richtungen auslaufen.

Wir betrachten die Amplitude

$$\langle \Lambda_{E,p} | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \Upsilon \rangle \quad (7.20)$$

für den Übergang des normierten H_0 -Eigenzustands Υ in dazu orthogonale, kontinuumsnormierte H_0 -Eigenzustände $\Lambda_{E,p}$ in niedrigster Ordnung in der Wechselwirkung H_{int} und entwickeln zu diesem Zweck $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ in eine Taylorreihe in tH_{int} . Die Koeffizienten der Reihe entnehmen wir durch wiederholtes Differenzieren der Relation

$$\partial_\lambda e^{A(\lambda)} = \int_0^1 dz e^{zA(\lambda)} \partial_\lambda A e^{(1-z)A(\lambda)}. \quad (7.21)$$

Diese Relation beweist man durch Entwickeln beider Seiten

$$\sum_n \frac{1}{n!} \sum_{l=0}^{n-1} A^{n-l-1} (\partial_\lambda A) A^l = \sum_k \frac{1}{k!} \sum_l \frac{1}{l!} \int dz z^k (1-z)^l A^k (\partial_\lambda A) A^l \quad (7.22)$$

mit der kombinatorischen Formel

$$\int_0^1 dz z^k (1-z)^l = \frac{k! l!}{(k+l+1)!} . \quad (7.23)$$

Entwickeln wir mit (7.21) den Zeitentwicklungsoperator $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ nach $H_{\text{int}} t$, so verschwindet die Übergangsamplitude in niedrigster Ordnung und ist bis auf Terme höherer Ordnung gegeben durch

$$\langle \Lambda_{E,p} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \rangle = -\frac{i}{\hbar} t \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle \int_0^1 dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t E} e^{-\frac{i}{\hbar} (1-z) t E_0} + \dots . \quad (7.24)$$

Hierbei haben wir die H_0 -Eigenwertgleichungen verwendet.

In dieser Ordnung wird die Wiedererzeugung von Υ aus den Zerfallsprodukten und die Wechselwirkung der Zerfallsprodukte nicht erfaßt.

Die z -Integration ergibt

$$\langle \Lambda_{E,p} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \rangle = \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E t} - e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}}{E - E_0} + \dots . \quad (7.25)$$

Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t einen Zustand $\Lambda_{E,p}$ im H_0 -Energiebereich Δ vorzufinden, ist durch das Betragsquadrat dieser Amplitude bestimmt und niedrigster Ordnung durch

$$w(\Delta, t) = \int_{\Delta} dE dp |\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{t}{\hbar} \frac{E-E_0}{2}\right)}{\left(\frac{E-E_0}{2}\right)^2} \quad (7.26)$$

gegeben. Wegen (B.3) gilt für genügend große Zeiten t etwa

$$\frac{w(\Delta, t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE dp |\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \delta(E - E_0) . \quad (7.27)$$

Allerdings darf nicht der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ genommen werden, weil sonst höhere Potenzen von $t H_{\text{int}}$ nicht mehr vernachlässigt werden können. Insbesondere muß die Zeit t klein gegen die Lebensdauer des zerfallenden Zustandes bleiben: für größere Zeiten nimmt die Wahrscheinlichkeit, Zerfallsprodukte zu finden nicht mehr linear mit der Zeit zu. Für kleine Zeiten t , die groß genug für die Näherung (B.3) sind, deuten wir $\frac{w(\Delta, t)}{t}$ als Ableitung $-\frac{dw}{dt}$ der Wahrscheinlichkeit, den zerfallenden Zustand noch vorzufinden, und lesen die Zerfallsrate ab.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dE dp |\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \delta(E - E_0) \quad (7.28)$$

Die Zerfallsrate setzt sich additiv aus partiellen Zerfallsraten $d\Gamma$ von verschiedenen Prozessen zusammen

$$d\Gamma = 2\pi \delta(E - E_0) |\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 dE dp . \quad (7.29)$$

Bei dieser Standardherleitung der Goldenen Regel ist die Zeit t genügend groß, denn kein quantenmechanisches System kann für kleine Zeiten exponentiell zerfallen (siehe Abschnitt (7.2)). Zusätzlich ist diese Zeit t klein gegen die Lebensdauer τ . Es ist bemerkenswert, wie gehorsam die Textbuchherleitung der Goldenen Regel von Studenten akzeptiert und von Dozenten vorgetragen wird. Die Annahmen über t schließen sich im Grenzfall gegenseitig aus und Fehler, die man für mittlere Zeiten macht, die sowohl genügend groß als auch genügend klein sind, sind nicht leicht abzuschätzen.

7.4 Zerfall ins Kontinuum

Man kann die Zeitentwicklung des zerfallenden Zustandes ohne Näherungen exakt durch Integrale angeben. Die Goldene Regel ergibt sich im Grenzfall kleiner und nichtresonanter Übergangsamplituden.

Ein allgemeiner Zustand schreibt sich mit einem Entwicklungskoeffizienten $\psi_0 = \langle \Upsilon | \Psi \rangle$ und einer Wellenfunktion $\psi(E, p) = \langle \Lambda_{E,p} | \Psi \rangle$ in der Basis (7.17) als Linearkombination

$$\Psi = \Upsilon \psi_0 + \int dE dp \Lambda_{E,p} \psi(E, p) , \quad \psi(E, p) = 0 \text{ für } E < E_{\text{min}} . \quad (7.30)$$

Die Wahrscheinlichkeit $w_0(\Delta, \Psi)$, bei einer Messung von Ψ die zu H_0 gehörende Energie im offenen Intervall Δ zu finden, beträgt

$$w_0(\Delta, \Psi) = \begin{cases} \int_{\Delta} dE dp |\psi(E, p)|^2 & \text{falls } E_0 \notin \Delta \\ |\psi_0|^2 + \int_{\Delta} dE dp |\psi(E, p)|^2 & \text{falls } E_0 \in \Delta \end{cases} . \quad (7.31)$$

Es trägt also der Anteil $\Upsilon \psi_0$ zur Wahrscheinlichkeitsdichte der Energie eine scharfe Linie bei E_0 bei, die schärfer als jede Detektorauflösung Δ ist und deren Fläche $|\psi_0|^2$ beträgt.

Die Wechselwirkung $H_{\text{int}} = H_{\text{int}}^\dagger$ bewirkt Übergänge vom normierten H_0 -Eigenzustand Υ ins Kontinuum und umgekehrt

$$H_{\text{int}} \Upsilon = \int dE dp \Lambda_{E,p} v(E, p) , \quad H_{\text{int}} \Lambda_{E,p} = v^*(E, p) \Upsilon , \quad (7.32)$$

$$v(E, p) = \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle . \quad (7.33)$$

Die Matrixelemente $\langle \Upsilon | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ und $\langle \Lambda_{E',p'} | H_{\text{int}} \Lambda_{E,p} \rangle$ verschwinden in unserer Rechnung. Dies ist keine wesentliche Einschränkung, wir können uns solch einen Teil der Wechselwirkung in H_0 absorbiert vorstellen. Ebenso verschwindet $v(E, p) = \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ für $E < E_{\text{min}}$.

Der Operator H_{int} ist auf Υ nur definiert, falls $\|H_{\text{int}} \Upsilon\| < \infty$ ist.

$$\int dE dp |v(E, p)|^2 < \infty \quad (7.34)$$

Wie klein die Amplitude $v(E, \mathbf{p})$ für Übergänge ins Kontinuum auch ist, wenn sie bei einer Energie E_1 nicht für alle \mathbf{p} verschwindet, so gibt es keinen normierbaren H-Eigenzustand mit dieser Energie. Die Gleichung $(H - E_1)\Psi = 0$ bestimmt nämlich die Energiewellenfunktion

$$\psi(E, \mathbf{p}) = -\frac{v(E, \mathbf{p})}{E - E_1} \psi_0 \quad (7.35)$$

und die Energie E_1 durch die gap-Gleichung (Energilückengleichung)

$$E_1 - E_0 = - \int_{E_{\min}}^{\infty} dE d\mathbf{p} \frac{|v(E, \mathbf{p})|^2}{E - E_1}. \quad (7.36)$$

Nur wenn $\int d\mathbf{p} |v(E_1, \mathbf{p})|^2$ verschwindet, ist $\psi(E, \mathbf{p})$ eine quadratintegrierte Funktion.

Ist die Wechselwirkung $v(E, \mathbf{p})$ genügend groß, so gibt es unterhalb der kontinuierlichen Energien, dort verschwindet $v(E, \mathbf{p})$, einen normierbaren H-Eigenzustand, denn die Energilückengleichung (7.36) hat für $E_1 < E_{\min}$ genau eine Lösung, wenn

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{E_{\min}}^{\infty} dE d\mathbf{p} \frac{|v(E, \mathbf{p})|^2}{E - E_{\min} + \varepsilon} \geq E_0 - E_{\min} \quad (7.37)$$

ist. Es ist nämlich die linke Seite von (7.36) eine monoton steigende Funktion von E_1 und die rechte Seite fällt monoton ab. Zudem ist für stark negative E_1 die linke Seite von (7.36) kleiner als die rechte, für $E_1 = E_{\min}$ ist die linke Seite größer als die rechte, wenn die Wechselwirkung $v(E, \mathbf{p})$ genügend groß ist.

Wir untersuchen nun die Zeitentwicklung des Zustandes $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon$, der zur Zeit $t = 0$ als normierter Eigenzustand Υ des ungestörten Hamiltonoperators H_0 präpariert worden ist. Die Amplitude $\alpha(t)$ dafür, daß bei Messung zur Zeit t der Anfangszustand gefunden wird, ist das Matrixelement

$$\alpha(t) = \langle \Upsilon | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \rangle. \quad (7.38)$$

Wir nutzen den Residuensatz und stellen $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ als Wegintegral über einen Weg Γ dar, der das Spektrum von H in der komplexen Ebene im Gegenuhrzeigersinn umläuft.

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} t z} \frac{1}{z - H} \quad (7.39)$$

Die Formel kann mit dem Residuensatz für den Fall eines diskreten Spektrums $H \Lambda_n = E_n \Lambda_n$ mit $\Psi(0) = \sum_n \Lambda_n \psi_n$ leicht bestätigt werden

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \sum_n \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - H} \Lambda_n \psi_n = \\ & = \frac{1}{2\pi i} \sum_n \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - E_n} \Lambda_n \psi_n = \sum_n \Lambda_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \end{aligned}$$

und gilt auch für kontinuierliches Spektrum.

Die negative Resolvente $(z - H)^{-1}$ kann als geometrische Reihe geschrieben werden. Es gilt nämlich für Operatoren A und V , wenn A und $A - V$ invertierbar sind,

$$(A - V)^{-1} = (A(\mathbb{1} - A^{-1}V))^{-1} = (\mathbb{1} - A^{-1}V)^{-1}A^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (A^{-1}V)^n A^{-1} \quad (7.40)$$

auf Zuständen, auf denen die Reihe konvergiert. Wir schreiben daher

$$\frac{1}{z - H} = \frac{1}{z - H_0 - H_{\text{int}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \right)^n \frac{1}{z - H_0}. \quad (7.41)$$

Die Potenzen von $(z - H_0)^{-1} H_{\text{int}}$ sind auf Υ leicht anzuwenden, da Υ Eigenzustand zu $((z - H_0)^{-1} H_{\text{int}})^2$ ist. Mit der Notation

$$|V(E)|^2 = \int dp |\nu(E, p)|^2 \quad (7.42)$$

gilt

$$\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \Upsilon = \int dE dp \Lambda_{E,p} \frac{\nu(E, p)}{z - E} \quad (7.43)$$

$$\left(\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \right)^2 \Upsilon = \frac{1}{z - E_0} \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E} \Upsilon. \quad (7.44)$$

Zum Matrixelement $\langle \Upsilon | (z - H)^{-1} \Upsilon \rangle$ tragen demnach nur die geraden Potenzen von $(z - H_0)^{-1} H_{\text{int}}$ bei.

$$\begin{aligned} \langle \Upsilon | \frac{1}{z - H} \Upsilon \rangle &= \sum_n \left(\frac{1}{z - E_0} \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E} \right)^n \frac{1}{z - E_0} \\ &= (z - E_0 - \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E})^{-1} \end{aligned} \quad (7.45)$$

Für $\mathbf{a}(t)$ folgt dann wegen (7.38) und (7.39)

$$\mathbf{a}(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E - z}}. \quad (7.46)$$

Wir wählen den Integrationsweg Γ im Gegenzeigersinn um das Spektrum so, daß wir mit festem Imaginärteil $\varepsilon > 0$ die Punkte $z = x + i\varepsilon$ von $x = \infty$ zu $x = -\infty$ durchlaufen und danach die Punkte $z = x - i\varepsilon$ von $x = -\infty$ bis $x = \infty$. Dann ist das komplexe Wegintegral die Differenz zweier Integrale über die reelle Achse.

Das Integral hängt nicht von ε ab und wir werten es im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0+$ aus.

$$\mathbf{a}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{i}{2\pi} \int_{E_{\min}}^{\infty} dx (e^{-\frac{i}{\hbar} t(x+i\varepsilon)} \frac{1}{x+i\varepsilon - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E-x-i\varepsilon}} - (\varepsilon \rightarrow -\varepsilon)) \quad (7.47)$$

Wie in Anhang A gezeigt, hat der Nenner

$$f(x) = x + i\varepsilon - E_0 + \int dE' \frac{|V(E)|^2}{E - x - i\varepsilon} \quad (7.48)$$

für $\varepsilon \rightarrow 0+$ den Grenzwert

$$f(x) = x - E_0 + \int dE' \frac{|V(E' + x)|^2}{E'} + i\pi|V(x)|^2, \quad (7.49)$$

wobei \int das Hauptwertintegral bezeichnet.

Falls $V(x)$ genügend klein ist, so daß kein gebundener Zustand existiert, der die gap-Gleichung (7.36) löst, so verschwindet der Nenner f nirgends.

Der zweite Beitrag zu $\mathbf{a}(t)$, den man durch die Ersetzung von ε durch $-\varepsilon$ erhält, ergibt den konjugiert komplexen Nenner f^* . Daher ist der Integrand von der Form

$$e^{-\frac{i}{\hbar}tx} \left(\frac{1}{f} - \frac{1}{f^*} \right) = e^{-\frac{i}{\hbar}tx} \left(\frac{f^* - f}{ff^*} \right) \quad (7.50)$$

und $\mathbf{a}(t)$ ist

$$\mathbf{a}(t) = \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |F(E)|^2 \quad (7.51)$$

$$F(E) = \frac{V(E)}{E - E_0 + \int dE' \frac{|V(E'+E)|^2}{E'} + i\pi|V(E)|^2}. \quad (7.52)$$

Der zerfallende Zustand ist durch die Ankopplung an das Kontinuum nicht länger ein Energieeigenzustand, sondern eine Resonanz ähnlich der Lorentzresonanz, denn für kleine Übergangsamplitude $V(E)$ ist $F(E)$ nahezu die in (7.6) gegebene Funktion $F_{\text{Lorentz}}(E)$. Die Abweichungen von der Lorentzresonanz führen zu Abweichungen vom exponentiellen Zerfall.

Im Nenner von $F(E)$ dominiert der Realteil

$$\Re f(E) = E - E_0 + \int dE' \frac{|V(E' + E)|^2}{E'} \quad (7.53)$$

außer in einer kleinen Umgebung der Nullstelle \hat{E} von $\Re f(E)$. Der Zähler $V(E)$ beseitigt die unphysikalischen Züge der Lorentzresonanz. Er sorgt dafür, daß die Energiewellenfunktion für $E < E_{\text{min}}$ verschwindet und verbessert das Hochenergieverhalten, so daß $H\Upsilon$ endliche Norm hat. Es existieren dann $\langle H \rangle$ und Δ_H , allerdings hängen diese Größen vom Verhalten von $V(E)$ für $E \neq \hat{E}$ ab und brauchen nicht mit der Resonanzenergie und der Breite übereinstimmen.

Wenn sich in der Umgebung der Nullstelle von $\Re f(E)$ der Imaginärteil des Nenners von $F(E)$ nicht stark verändert, können wir ihn dort durch $\pi|V(\hat{E})|^2$ nähern und erhalten ungefähr

$$F(E) \approx \frac{V(\hat{E})}{(E - \hat{E})(1 + \partial_{\hat{E}} \int dE' \frac{|V(E'+\hat{E})|^2}{E'}) + i\pi|V(\hat{E})|^2} \quad (7.54)$$

mit der Resonanzenergie \hat{E} , die durch die Energielückengleichung $\Re f(\hat{E}) = 0$ implizit definiert ist, und der Breite

$$\Gamma = \frac{2\pi \int dp |v(\hat{E}, p)|^2}{1 + \partial_{\hat{E}} \int dE' dp \frac{|v(E' + \hat{E}, p)|^2}{E'}}. \quad (7.55)$$

In niedrigster Ordnung ist dies die Goldene Regel.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dE dp \delta(E - \hat{E}) |\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \quad (7.56)$$

Die Zerfallsrate eines Zustands, der durch Übergänge in ein Kontinuum von Energiezuständen zerfällt, ist das 2π -fache des Integrals der Betragsquadrate der Übergangsamplitude $v(\hat{E}, p)$ bei der Resonanzenergie \hat{E} mal einer Deltafunktion für Energieerhaltung. Genauer zeigt Gleichung (7.52), daß der zerfallende Zustand kein Energieeigenzustand, sondern eine Resonanz ähnlich der Lorentzresonanz ist.

Diese Herleitung der Goldenen Regel zeigt, daß eine genaue Berechnung der Übergangsamplitude $\langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ in höherer Ordnung Störungstheorie durch eine genaue Berechnung des Zeitverhaltens des zerfallenden Zustands ergänzt werden muß. Die Goldene Regel gilt in niedrigster Ordnung der Übergangsamplitude.

Die Approximation (7.54) unterstellt nicht nur, daß $V(E)$ klein ist, sondern auch, daß $V(E)$ glatt ist und nicht selbst eine Lorentzresonanz mit Resonanzenergie E_1 und Breite Γ_1 ist. Sonst unterdrückt zwar in (7.52) der Nenner $f(E_1) \approx (E_1 - E_0)$ den Beitrag der Resonanz bei E_1 , wenn aber die Breite Γ_1 klein gegen $2\pi |V(\hat{E})|^2$ ist, so zerfällt zunächst der Zustand Υ schnell als Resonanz mit Energie \hat{E} bis auf einen kleinen, längerlebigen Rest der Resonanz mit Energie E_1 und Breite Γ_1 .

7.5 Allgemeingültigkeit

Wir haben in (7.51,7.52) ganz allgemein die Amplitude dafür ausgerechnet, daß irgendein normierbarer Zustand $\Psi(t)$, der als Wellenpaket aus kontinuierlichen Energieeigenzuständen zusammengesetzt ist, mit dem Zustand $\Psi(0)$ übereinstimmt. Sei nämlich der normierte Anfangszustand $\Upsilon = \Psi(0)$ aus kontinuierlichen Energieeigenzuständen des Hamiltonoperators H zusammengesetzt. Der Projektor

$$P = |\Upsilon\rangle\langle\Upsilon|, \quad P^2 = P, \quad \mathbb{1} = P + (\mathbb{1} - P), \quad (7.57)$$

werde zur Definition des ungestörten Hamiltonoperators

$$H_0 = PHP + (\mathbb{1} - P)H(\mathbb{1} - P) \quad (7.58)$$

verwendet. Der Zustand $\Upsilon = P\Upsilon$ ist ein normierter Eigenzustand zu H_0

$$H_0\Upsilon = PHP\Upsilon = \Upsilon\langle\Upsilon|H\Upsilon\rangle = E_0\Upsilon \quad (7.59)$$

mit Eigenwert $E_0 = \langle\Upsilon|H\Upsilon\rangle$, der im Kontinuum der Eigenwerte von H_0 liegt.

Die Wechselwirkung

$$H_{\text{int}} = H - H_0 = PH(\mathbb{1} - P) + (\mathbb{1} - P)HP \quad (7.60)$$

macht Übergänge von Υ zu dazu orthogonalen Zuständen.

Jeder Zustand Υ und jeder Hamiltonoperator H mit kontinuierlichem Spektrum erfüllen also die Annahmen, die wir in Abschnitt (7.4) gemacht haben. Durch Wahl des beliebigen Zustand Υ kann die Funktion $F(E)$ in (7.51) mit den Einschränkungen $F(E) = 0$ für $E < E_{\text{min}}$ und $\int dE |F(E)|^2 = 1$ beliebig vorgegeben werden. Die Amplitude $\alpha(t)$ nimmt daher normalerweise nicht exponentiell ab.

Der Zustand zerfällt exponentiell, wenn die Amplitude $v(E, p)$ für den Zerfall in das Kontinuum der Zerfallsprodukte klein ist und nicht selbst resonantes Verhalten zeigt.

7.6 Zerfall bewegter Teilchen

In relativistischer Quantenmechanik ist der Hamiltonoperator $H = cP^0$ eine Komponente des Viererimpulses. Zu Lorentztransformationen Λ , die $\Lambda^0_0 \geq 1$ erfüllen und daher die Zeitrichtung nicht umdrehen, gehören unitäre Operatoren $U(\Lambda)$, die auf Zuständen mit ganzzahligem Spin die Lorentztransformationen darstellen.

$$U(\Lambda_2\Lambda_1) = U(\Lambda_2)U(\Lambda_1) \quad (7.61)$$

Für halbzahligen Spin und für Lorentztransformationen, die die Zeitrichtung spiegeln, sind die Verhältnisse verwickelter [5, Kapitel 2]: Zeitumkehr ist als antiunitäre Transformation realisiert und auf Zuständen mit halbzahligen Spin ist die Überlagerungsgruppe $SL(2, \mathbb{C})$ der Lorentzgruppe dargestellt. Diese Komplikationen wirken sich aber hier nicht aus.

Die unitären Transformationen bewirken zeitrichtungstreue Lorentztransformationen der Viererimpulse

$$U^{-1}(\Lambda)P^m U(\Lambda) = \Lambda^m_n P^n . \quad (7.62)$$

Auf einen Viererimpulseigenzustand Φ_p mit $P^m \Phi_p = p^m \Phi_p$ angewendet ergibt $U(\Lambda)$ daher einen Eigenzustand mit lorentztransformiertem Viererimpuls.

$$P^m U(\Lambda) \Phi_p = U(\Lambda) \Lambda^m_n P^n \Phi_p = \Lambda^m_n p^n U(\Lambda) \Phi_p \quad (7.63)$$

Für zerfallende Teilchen, die sich mit Geschwindigkeit v bewegen, folgt hieraus, daß ihre Lebensdauer τ_v durch Zeitdilatation vergrößert ist.

$$\tau_v = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tau_0 \quad (7.64)$$

Die Relation ist aus quantenmechanischen Gründen nicht mathematisch exakt. Es kann nämlich streng genommen kein Teilchen in Ruhe präpariert werden, dazu würde eine konstante, und daher nicht normierbare Ortswellenfunktion gehören. Arbeitet man, um die

Lokalisationsenergie klein zu halten, mit Wellenfunktionen, die in einem großen Raumgebiet konstant sind und außerhalb des Gebiets schnell gegen Null gehen, so sieht ein lorentztransformierter Beobachter in diesem großen Raumgebiet den Zustand vor langer Zeit und nach langer Zeit. Hat man schon die Idealisierung vollzogen, daß der Zustand exponentiell zerfällt, so entspricht diesem Zerfall für einen lorentztransformierten Beobachter eine Wellenfunktion, die entgegen der Geschwindigkeitsrichtung exponentiell anwächst. Ähnlichen Schwierigkeiten begegnet man, wenn man einen zerfallenden Zustand als Impulseigenzustand und als Eigenzustand eines nichthermiteschen Hamiltonoperators beschreiben will. Hat die Energie einen negativen Imaginärteil, so hat der lorentztransformierte Zustand einen komplexen Impulseigenwert. Die entsprechende Wellenfunktion wächst dann in einer Richtung exponentiell an.

Betrachtet man Wellenpakete und arbeitet man mit normierten Zuständen, so ist die Amplitude $\alpha(\mathbf{t})$ (7.4) schon für stabile Teilchen zeitabhängig. Denn Wellenpakete freier, massiver Teilchen zerfließen, weil sie aus Anteilen mit unterschiedlichen Impulsen und daher unterschiedlichen Geschwindigkeiten zusammengesetzt sind. Abgesehen davon ist die Amplitude

$$\langle \Psi_{\mathbf{v}}(0) | \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{t}) \rangle \quad (7.65)$$

eines mit Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegten Zustands aber einfach deshalb zeitabhängig, weil er sich mit Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegt und daher weniger und weniger mit dem Wellenpaket zur Zeit $\mathbf{t} = 0$ überlappt. Um für ein nahezu monochromatisches Wellenpaket die Amplitude dafür zu bestimmen, daß der Zustand noch zur Zeit \mathbf{t} vorhanden ist, muß daher $\Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{t})$ mit dem um $\mathbf{x} = \mathbf{v}\mathbf{t}$ verschobenen Zustand (3.25) $e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{P}} \mathbf{v} \mathbf{t}} \Psi_{\mathbf{v}}(0)$ verglichen werden.

$$\alpha_{\mathbf{v}}(\mathbf{t}) = \langle e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{P}} \mathbf{v} \mathbf{t}} \Psi_{\mathbf{v}}(0) | \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{t}) \rangle = \langle \Psi_{\mathbf{v}}(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{P}} \mathbf{v} \mathbf{t}} e^{-\frac{i}{\hbar} H \mathbf{t}} \Psi_{\mathbf{v}}(0) \rangle \quad (7.66)$$

Die mit Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegten Zustände $\Psi_{\mathbf{v}}$ erhält man aus ruhenden Zuständen Ψ_0 , sie sind Eigenzustände des räumlichen Impulses $\vec{\mathbf{P}} \Psi_0 = 0$, durch die unitäre Transformation

$$\Psi_{\mathbf{v}} = \mathbf{U}(\Lambda(\mathbf{v})) \Psi_0, \quad (7.67)$$

die zur drehungsfreien Lorentztransformation $\Lambda(\mathbf{v})$ gehört, zum Beispiel

$$\Lambda(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{v}{c} \\ \frac{v}{c} & 1 \end{pmatrix} & \\ & \mathbf{1} \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (7.68)$$

für einen in \mathbf{x} -Richtung bewegten Zustand. $\Psi_{\mathbf{v}}$ ist kein Impulseigenzustand, wenn Ψ_0 instabil ist, da Ψ_0 kein Energieeigenzustand ist.

Setzen wir (7.67) in (7.66) ein und verwenden wir (7.62) so ergibt sich mit $\mathbf{u}_m = (c\mathbf{t}, -\mathbf{v}\mathbf{t}, 0, 0)$

$$\langle \Psi_0 | \mathbf{U}^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{u}_m \mathbf{P}^m} \mathbf{U} \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{u}_m \mathbf{U}^{-1} \mathbf{P}^m \mathbf{U}} \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{u}_m \Lambda^m_n \mathbf{P}^n} \Psi_0 \rangle \quad (7.69)$$

Wegen $u_m \Lambda^m_n P^n = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} t c P^0$ und $c P^0 = H$ erhalten wir

$$a_v(t) = \langle \Psi_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} t H} | \Psi_0 \rangle = a_0 \left(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} t \right). \quad (7.70)$$

Es zerfällt also das bewegte Teilchen langsamer als das ruhende. Nimmt die Überlebenswahrscheinlichkeit des ruhenden Teilchens exponentiell mit einer Lebensdauer τ ab, gilt also $|a_0(t)|^2 = e^{-\frac{t}{\tau}}$, so gilt für das bewegte Teilchen $|a_v(t)|^2 = e^{-\frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} t}{\tau}}$. Es hat also eine Lebensdauer von

$$\tau_v = \frac{\tau}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (7.71)$$

Auf die Frage, ob Beschleunigung die Lebensdauer beeinflusst oder ob quantenmechanische Teilchen ideale Uhren sind und die Weglänge der Weltlinie messen, gibt es keine universelle Antwort. Man muß erwarten, daß die Art der Beschleunigung wesentlich ist. So greift zum Beispiel ein Magnetfeld in die Energieverhältnisse von atomaren Niveaus ein und Beschleunigung in einem Magnetfeld ändert den Gang von Uhren, die Zeit mit atomaren Übergängen messen. Vergegenwärtigt man sich, daß der Begriff Eigenzeit von der Lokalisation der Uhr auf eine Weltlinie Gebrauch macht, daß solch eine Lokalisation zu verschiedenen Zeiten aber im Widerspruch zur Quantenmechanik steht, erkennt man, daß schon die Frage, ob quantenmechanische Uhren die Weglänge längs einer Weltlinie messen, problematisch ist.

8 Das Wigner-Theorem

8.1 Wahrscheinlichkeitstreue und unitäre Abbildungen

Da die Wahrscheinlichkeit $w(i, O, \Psi)$ dafür, daß der i -te Meßwert a_i auftritt, wenn der Zustand $\Psi \sim e^{i\alpha}\Psi$ mit dem Apparat O vermessen wird, durch (1.1)

$$w(i, O, \Psi) = |\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2, \quad O \Lambda_i = a_i \Lambda_i, \quad (8.1)$$

gegeben ist, läßt jede unitäre Abbildung U , $U^\dagger = U^{-1}$, der Hilbertraumvektoren Ψ und Λ_i auf $U\Psi$ und $U\Lambda_i$ sowie der Operatoren auf UOU^{-1} alle Wahrscheinlichkeiten invariant, denn alle Skalarprodukte und Eigenwertgleichungen bleiben ungeändert

$$\langle U\Lambda | U\Psi \rangle = \langle \Lambda | \Psi \rangle. \quad (8.2)$$

Ebenso bleiben alle Wahrscheinlichkeiten durch jede antiunitäre Abbildung A erhalten, das heißt, durch jede invertierbare Abbildung des Hilbertraumes, die

$$\langle A\Lambda | A\Psi \rangle = \langle \Psi | \Lambda \rangle \quad \forall \Lambda, \Psi \quad (8.3)$$

erfüllt. Da das Skalarprodukt im linken Argument antilinear ist,

$$\langle A\Lambda | A\alpha\Psi \rangle = \langle \alpha\Psi | \Lambda \rangle = \alpha^* \langle \Psi | \Lambda \rangle = \alpha^* \langle A\Lambda | A\Psi \rangle = \langle A\Lambda | \alpha^* A\Psi \rangle, \quad (8.4)$$

ist A nicht linear, sondern antilinear,

$$A(\alpha\Psi) = \alpha^* A\Psi, \quad A(\Psi + \Lambda) = (A\Psi) + (A\Lambda). \quad (8.5)$$

Das Wigner-Theorem besagt: Zu jeder invertierbaren Abbildung T von Zuständen auf Zustände, also von Strahlen im Hilbertraum $\Psi \sim \lambda\Psi$, $\lambda \in \mathbb{C} - \{0\}$, auf Strahlen

$$\Psi \mapsto T\Psi, \quad \lambda\Psi \mapsto \hat{\lambda}T\Psi, \quad (8.6)$$

die alle Wahrscheinlichkeiten erhält,

$$\frac{|\langle T\Psi | T\chi \rangle|^2}{\langle T\Psi | T\Psi \rangle \langle T\chi | T\chi \rangle} = \frac{|\langle \Psi | \chi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle \langle \chi | \chi \rangle} \quad \forall \Psi, \chi, \quad (8.7)$$

gehört (falls der Hilbertraum mindestens dreidimensional ist) eine unitäre Abbildung U oder eine antiunitäre Abbildung A des Hilbertraumes. Dabei ist U oder A durch T bis auf eine Phase, $U' = e^{i\alpha}U$ oder $A' = e^{i\alpha}A$, eindeutig festgelegt.

Man beachte, daß T eine Selbstabbildung der Menge der Strahlen ist, während U oder A eine Selbstabbildung des Hilbertraums ist.

Beim folgenden Beweis des Wigner-Theorems wählen wir jeweils normierte Repräsentanten der Strahlen, $\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle T\Psi | T\Psi \rangle = 1$. Wir betrachten eine Orthonormalbasis χ_l . Die Strahlen $T\chi_l = \chi'_l e^{i\alpha_l}$ definieren, bis auf die Phasen $e^{i\alpha_l}$ eindeutig, eine Orthonormalbasis. Denn aus den Beträgen der Skalarprodukte $|\langle \chi'_k | \chi'_l \rangle| = |\langle \chi_k | \chi_l \rangle| = \delta^{kl}$ können die Skalarprodukte

$$\langle \chi'_k | \chi'_l \rangle = \delta^{kl} \quad (8.8)$$

eindeutig abgelesen werden, da $z = 0$ aus $|z| = 0$ folgt und sich, weil Längenquadrate positiv sind, $\langle \chi'_k | \chi'_k \rangle = 1$ aus $|\langle \chi'_k | \chi'_k \rangle| = 1$ ergibt.

Weil T invertierbar ist, sind die Vektoren χ'_k nicht nur ein Orthonormalsystem, sondern eine Basis. Anderenfalls gäbe es einen Vektor Ψ' , der senkrecht auf allen χ'_k stünde, und ein Urbild hätte, $\Psi' = T\Psi$. Dann verschwänden aber alle $|\langle \Psi | \chi_k \rangle| = |\langle \Psi' | \chi'_k \rangle| = 0$, und die χ_k wären keine Basis.

Für $k = 2, 3, \dots$, legen wir die Phasen von χ'_k relativ zu χ'_1 durch das Transformierte von $\Upsilon_k = (\chi_1 + \chi_k)/\sqrt{2}$ fest. Die Komponenten c_{lk} von $T\Upsilon_k$ sind durch

$$T\Upsilon_k = \Upsilon'_k = e^{i\beta_k} \sum_l \chi'_l c_{lk} \quad (8.9)$$

bis auf Phasen $e^{i\beta_k}$ eindeutig bestimmt. Insbesondere ist für $k \neq l \neq 1$

$$|\langle \chi'_k | \Upsilon'_l \rangle| = |\langle \chi_k | \Upsilon_l \rangle| = 0 \quad (8.10)$$

und

$$\begin{aligned} |c_{1k}| &= |\langle \chi'_1 | \Upsilon'_k \rangle| = |\langle \chi_1 | \Upsilon_k \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ |c_{kk}| &= |\langle \chi'_k | \Upsilon'_k \rangle| = |\langle \chi_k | \Upsilon_k \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (8.11)$$

also

$$\Upsilon'_k = \frac{e^{i\beta_k}}{\sqrt{2}} (\chi'_1 e^{i\alpha_1} + \chi'_k e^{i\alpha_k}). \quad (8.12)$$

Wir wählen die Phasen der Basis χ'_1, χ'_2, \dots so, daß

$$\Upsilon'_k = \frac{e^{i\beta_k}}{\sqrt{2}} (\chi'_1 + \chi'_k) \quad (8.13)$$

gilt. Diese Wahl läßt eine gemeinsame Phase aller χ'_k , $k = 1, 2, \dots$, unbestimmt.

Ein beliebiger Strahl $\Psi = \sum_k \chi_k \psi_k$ wird von T auf einen Strahl $\Psi' = e^{i\beta} \sum_k \chi'_k \psi'_k$ abgebildet. Hierbei sind die Beträge der Komponenten ψ_k und ψ'_k gleich, denn

$$|\psi_k| = |\langle \chi_k | \Psi \rangle| = |\langle \chi'_k | \Psi' \rangle| = |\psi'_k|. \quad (8.14)$$

Weiter gilt

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\psi_1 + \psi_k| = |\langle \Upsilon_k | \Psi \rangle| = |\langle \Upsilon'_k | \Psi' \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi'_1 + \psi'_k|. \quad (8.15)$$

Wir untersuchen spezieller den Fall $\psi_1 \neq 0$ und multiplizieren mit $\sqrt{2}/|\psi_1| = \sqrt{2}/|\psi'_1|$

$$|1 + \mathbf{a}| = |1 + \mathbf{a}'|, \quad |\mathbf{a}|^2 = |\mathbf{a}'|^2, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{a} = \frac{\psi_k}{\psi_1}, \quad \mathbf{a}' = \frac{\psi'_k}{\psi'_1}. \quad (8.16)$$

Wegen $|1 + \mathbf{a}|^2 = 1 + |\mathbf{a}|^2 + 2\Re\mathbf{a}$ besagt dies zusammen mit $|\mathbf{a}|^2 = |\mathbf{a}'|^2$

$$\Re\mathbf{a} = \Re\mathbf{a}', \quad \text{und} \quad (\Im\mathbf{a} = \Im\mathbf{a}' \quad \text{oder} \quad \Im\mathbf{a} = -\Im\mathbf{a}'). \quad (8.17)$$

Für jedes k gilt also, falls $\psi_1 \neq 0$,

$$\frac{\psi_k}{\psi_1} = \frac{\psi'_k}{\psi'_1} \quad \text{oder} \quad \frac{\psi_k}{\psi_1} = \frac{\psi'^*_k}{\psi'^*_1}. \quad (8.18)$$

Gruppieren wir die beiden Fälle, so gilt insgesamt

$$\Gamma\Psi = e^{i\beta} \left(\sum_k' \chi'_k \frac{\psi'_1}{\psi_1} \psi_k + \sum_l'' \chi'_l \frac{\psi'_1}{\psi'^*_1} \psi'^*_l \right) = e^{i\beta} \psi'_1 \left(\sum_k' \chi'_k \frac{\psi_k}{\psi_1} + \sum_l'' \chi'_l \frac{\psi'^*_l}{\psi'^*_1} \right). \quad (8.19)$$

Dabei erstrecken sich die Summen über diejenigen Werte von k oder l , für die die eine oder andere Alternative gilt.

Tatsächlich kann aber für alle k nur eine der Alternative gelten, wenn sie sich unterscheiden. Gäbe es nämlich ein Paar k und l mit

$$\frac{\psi'_k}{\psi'_1} = \frac{\psi_k}{\psi_1} \neq \frac{\psi'^*_k}{\psi'^*_1} \quad \text{und} \quad \frac{\psi'_l}{\psi'_1} = \frac{\psi'^*_l}{\psi'^*_1} \neq \frac{\psi_l}{\psi_1}, \quad (8.20)$$

dann wäre der Betrag des Skalarproduktes mit

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_1 + \chi_k + \chi_l) \quad (8.21)$$

nicht invariant unter Γ . Gemäß (8.19) wird ϕ von Γ auf $\phi' = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{3}}(\chi'_1 + \chi'_k + \chi'_l)$ abgebildet. Aus

$$\sqrt{3}|\langle\phi|\Psi\rangle| = |\psi_1 + \psi_k + \psi_l| = \sqrt{3}|\langle\phi'|\Psi'\rangle| = |\psi'_1 + \psi'_k + \psi'_l| \quad (8.22)$$

ergäbe sich nach Ausklammern von $|\psi_1| = |\psi'_1|$

$$|1 + \mathbf{a} + \mathbf{b}|^2 = |1 + \mathbf{a} + \mathbf{b}^*|^2, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{a} = \frac{\psi_k}{\psi_1} \neq \mathbf{a}^* \quad \text{und} \quad \mathbf{b} = \frac{\psi_l}{\psi_1} \neq \mathbf{b}^*. \quad (8.23)$$

Ausmultiplizieren ergibt

$$1 + |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\Re\mathbf{a} + 2\Re\mathbf{b} + 2\Re(\mathbf{a}\mathbf{b}^*) = 1 + |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\Re\mathbf{a} + 2\Re\mathbf{b}^* + 2\Re(\mathbf{a}\mathbf{b}), \quad (8.24)$$

das heißt

$$\Re(\mathbf{a}\mathbf{b}^*) = \Re(\mathbf{a}\mathbf{b}) \Leftrightarrow \Re\mathbf{a}\Re\mathbf{b} + \Im\mathbf{a}\Im\mathbf{b} = \Re\mathbf{a}\Re\mathbf{b} - \Im\mathbf{a}\Im\mathbf{b} \Leftrightarrow \Im\mathbf{a}\Im\mathbf{b} = 0 \quad (8.25)$$

im Widerspruch zur Annahme $\mathbf{a} \neq \mathbf{a}^*$ und $\mathbf{b} \neq \mathbf{b}^*$.

Es gilt also für jedes Ψ

$$\mathbb{T}\Psi = e^{i\beta} \sum_{\mathbf{k}} \chi'_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \quad \text{oder} \quad \mathbb{T}\Psi = e^{i\beta'} \sum_{\mathbf{k}} \chi'_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^*. \quad (8.26)$$

Von beiden Alternativen muß bei allen Strahlen $\Lambda_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 + i\chi_{\mathbf{k}})$, $\mathbf{k} = 2, 3, \dots$, dieselbe realisiert sein, sonst gäbe es ein \mathbf{k} und ein \mathbf{l} mit

$$\mathbb{T}\Lambda_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 + i\chi'_{\mathbf{k}}), \quad \mathbb{T}\Lambda_{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 - i\chi'_{\mathbf{l}}). \quad (8.27)$$

Der Strahl $\Gamma = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_1 + i\chi_{\mathbf{k}} + i\chi_{\mathbf{l}})$ wird auf $\Gamma' = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{3}}(\chi'_1 + i\chi'_{\mathbf{k}} + i\chi'_{\mathbf{l}})$ abgebildet oder auf $\Gamma' = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{3}}(\chi'_1 - i\chi'_{\mathbf{k}} - i\chi'_{\mathbf{l}})$. Im ersten Fall ist der Betrag des Skalarproduktes mit $\Lambda_{\mathbf{l}}$ nicht invariant,

$$\sqrt{6}|\langle \Gamma | \Lambda_{\mathbf{l}} \rangle| = |\langle \chi_1 + i\chi_{\mathbf{k}} + i\chi_{\mathbf{l}} | \chi_1 + i\chi_{\mathbf{l}} \rangle| = 2 \neq \sqrt{6}|\langle \Gamma' | \Lambda'_{\mathbf{l}} \rangle| = |\langle \chi'_1 + i\chi'_{\mathbf{k}} + i\chi'_{\mathbf{l}} | \chi'_1 - i\chi'_{\mathbf{l}} \rangle| = 0 \quad (8.28)$$

im zweiten Fall der Betrag des Skalarproduktes mit $\Lambda_{\mathbf{k}}$. In jedem Fall müssen Γ und alle $\Lambda_{\mathbf{k}}$ linear oder antilinear transformieren.

Dann aber müssen alle Strahlen Ψ genauso linear oder antilinear transformieren wie die $\Lambda_{\mathbf{k}}$. Denn gäbe es ein Ψ mit $\Psi' = e^{i\alpha} \psi'_1 \sum_{\mathbf{l}} \chi'_{\mathbf{l}} (\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1})^*$ mit einem $\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1} \neq (\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1})^*$, während $\Lambda'_{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 + i\chi'_{\mathbf{l}})$ gilt, dann ergäbe sich

$$\sqrt{2}|\langle \Lambda_{\mathbf{l}} | \Psi \rangle| = |\psi_1 - i\psi_{\mathbf{l}}| = |\psi_1| |1 - i\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1}| = \sqrt{2}|\langle \Lambda'_{\mathbf{l}} | \Psi' \rangle| = |\psi'_1 - i\psi'_{\mathbf{l}}| = |\psi'_1| |1 - i(\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1})^*|, \quad (8.29)$$

also $|1 + \mathbf{a}|^2 = |1 - \mathbf{a}^*|^2$ mit $\mathbf{a} = -i\psi_{\mathbf{l}}/\psi_1$, und demnach $1 + |\mathbf{a}|^2 + 2\Re\mathbf{a} = 1 + |\mathbf{a}|^2 - 2\Re\mathbf{a}$, also $0 = \Re\mathbf{a} = \Im(\psi_{\mathbf{l}}/\psi_1)$ im Widerspruch zur Annahme $(\frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1})^* \neq \frac{\psi_{\mathbf{l}}}{\psi_1}$.

Ebenso untersucht man die verbleibenden Fälle mit $\psi_1 = 0$.

Wir haben damit das Wigner-Theorem bewiesen: Zu jeder invertierbaren, wahrscheinlichkeitstreuen Abbildung von Strahlen auf Strahlen gehört eine unitäre Abbildung \mathbb{U} oder eine antiunitäre Abbildung \mathbb{A} von Hilbertraumvektoren,

$$\begin{aligned} \Psi = \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} &\mapsto \mathbb{U}\Psi = \sum_{\mathbf{k}} \chi'_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \\ \text{oder} \quad \Psi = \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} &\mapsto \mathbb{A}\Psi = \sum_{\mathbf{k}} \chi'_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^*. \end{aligned} \quad (8.30)$$

Die Selbstabbildung des Hilbertraumes, \mathbb{U} oder \mathbb{A} , ist bis auf eine gemeinsame Phase aller $\chi'_{\mathbf{k}}$ eindeutig durch die wahrscheinlichkeitstreue Selbstabbildung \mathbb{T} des Zustandsraumes bestimmt.

Es ist \mathbb{U} linear, $\mathbb{U}(\mathbf{a}\Psi + \mathbf{b}\Lambda) = \mathbf{a}(\mathbb{U}\Psi) + \mathbf{b}(\mathbb{U}\Lambda)$, und unitär, $\langle \mathbb{U}\Lambda | \mathbb{U}\Psi \rangle = \langle \Lambda | \Psi \rangle$, während \mathbb{A} antilinear, $\mathbb{A}(\mathbf{a}\Psi + \mathbf{b}\Lambda) = \mathbf{a}^*(\mathbb{A}\Psi) + \mathbf{b}^*(\mathbb{A}\Lambda)$, und antiunitär ist, $\langle \mathbb{A}\Lambda | \mathbb{A}\Psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \Lambda_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^* = \langle \Psi | \Lambda \rangle$.

Da A^2 linear und unitär ist, gehören zu Transformationen T , die sich als Quadrat $T = T'^2$ schreiben lassen, unitäre Operatoren U im Hilbertraum, denn auch wenn T' antiunitär realisiert wäre, wäre das Quadrat dieser Realisierung unitär. Insbesondere gehören zu allen Transformationen, die sich wie Translationen und Drehungen durch wiederholtes Anwenden infinitesimaler Transformationen erzeugen lassen, wenn sie alle Wahrscheinlichkeiten invariant lassen, unitäre Operatoren im Hilbertraum.

In endlichdimensionalen Räumen hat jede lineare Abbildung einen Eigenvektor. Da die Transformation A^2 unitär ist, haben ihre Eigenwerte den Betrag 1 und ein Eigenvektor erfüllt $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$.

Wenn $A^2\hat{\chi} = \hat{\chi}$ ist, so wird $\hat{\chi} + A\hat{\chi}$ auf sich abgebildet. Falls zudem $A\hat{\chi} = -\hat{\chi}$ ist, definieren wir den Hilbertraumvektor als $\chi = i\hat{\chi}$, falls nicht als $\chi = \hat{\chi} + A\hat{\chi}$. Er ist nicht Null und wird von A invariant gelassen

$$A\chi = \chi . \quad (8.31)$$

Wenn der Eigenwert $e^{2i\alpha}$ nicht 1 ist, dann bezeichnen wir $A\hat{\chi}$ als $e^{-i\alpha}\bar{\chi}$, und A wirkt wegen $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$ auf diese Zustände durch

$$A\hat{\chi} = e^{-i\alpha}\bar{\chi} , \quad A\bar{\chi} = e^{i\alpha}\hat{\chi} . \quad (8.32)$$

Der Zustand $\hat{\chi}$ steht senkrecht auf $\bar{\chi}$, denn A ist antiunitär, $\langle\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle = \langle A(A\hat{\chi})|A\hat{\chi}\rangle$, und wegen $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$ folgt $(1 - e^{-2i\alpha})\langle\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle = 0$. Zudem haben $\hat{\chi}$ und $\bar{\chi}$ dieselbe Norm, $\langle\hat{\chi}|\hat{\chi}\rangle = \langle A\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle$.

Der Unterraum der Vektoren Λ , die senkrecht auf χ oder $\hat{\chi}$ und $\bar{\chi}$ stehen, wird durch A auf sich abgebildet, da A antiunitär ist,

$$\begin{aligned} \langle\chi|\Lambda\rangle = 0 &\Leftrightarrow \langle A\Lambda|A\chi\rangle = 0 \Leftrightarrow \langle A\Lambda|\chi\rangle = 0 , \quad \text{und ebenso} \\ (\langle\hat{\chi}|\Lambda\rangle = 0 \text{ und } \langle\bar{\chi}|\Lambda\rangle = 0) &\Leftrightarrow (\langle A\Lambda|A\hat{\chi}\rangle = 0 \text{ und } \langle A\Lambda|A\bar{\chi}\rangle = 0) \\ &\Leftrightarrow (\langle A\Lambda|\bar{\chi}\rangle = 0 \text{ und } \langle A\Lambda|\hat{\chi}\rangle = 0) . \end{aligned} \quad (8.33)$$

Da in diesem Unterraum wiederum ein Eigenzustand zu A^2 existiert, auf dem A durch (8.31) oder (8.32) wirkt, finden wir so durch vollständige Induktion eine Orthonormalbasis, $\chi_k, \hat{\chi}_i, \bar{\chi}_i$, in der A auf Singulettts χ_k oder auf Doublettts $\hat{\chi}_i, \bar{\chi}_i$ wirkt. Auf einen beliebigen Zustand Ψ mit Komponenten $\psi_k, \hat{\psi}_i, \bar{\psi}_i$ wirkt A als

$$A : \Psi = \sum_k \chi_k \psi_k + \sum_i (\hat{\chi}_i \hat{\psi}_i + \bar{\chi}_i \bar{\psi}_i) \mapsto \sum_k \chi_k \psi_k^* + \sum_i (\hat{\chi}_i e^{i\alpha_i} \bar{\psi}_i^* + \bar{\chi}_i e^{-i\alpha_i} \hat{\psi}_i^*) . \quad (8.34)$$

Mit den entsprechenden Überlegungen zeigt man, daß in endlichdimensionalen Räumen die Eigenvektoren χ_k jeder unitäre Abbildung U , $U\chi_k = e^{i\alpha_k}\chi_k$, als Orthonormalbasis gewählt werden können und daß U folgendermaßen wirkt

$$U : \Psi = \sum_k \chi_k \psi_k \mapsto \sum_k \chi_k e^{i\alpha_k} \psi_k . \quad (8.35)$$

8.2 Nichtlineare Schrödingergleichung

Nichtlineare Zeitentwicklung verletzt den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, daß die Entropie eines abgeschlossenen Systems im Laufe der Zeit in keinem Fall abnimmt.

Dies folgt durch Betrachtung von Gemischen ρ zweier normierter Zustände, $|\mathbf{u}\rangle$ und $|\mathbf{v}\rangle$,

$$\rho = \frac{1}{2}|\mathbf{u}\rangle\langle\mathbf{u}| + \frac{1}{2}|\mathbf{v}\rangle\langle\mathbf{v}| \quad (8.36)$$

die nicht notwendig senkrecht aufeinander stehen.

Da 2ρ den Vektor $|\mathbf{u}\rangle$ auf $2\rho|\mathbf{u}\rangle = |\mathbf{u}\rangle + |\mathbf{v}\rangle\langle\mathbf{v}|\mathbf{u}\rangle$ und $|\mathbf{v}\rangle$ auf $2\rho|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{u}\rangle\langle\mathbf{u}|\mathbf{v}\rangle + |\mathbf{v}\rangle$ abbildet, gehört zu ρ in dieser Basis des von $|\mathbf{u}\rangle$ und $|\mathbf{v}\rangle$ aufgespannten Unterraumes die Matrix

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \langle\mathbf{u}|\mathbf{v}\rangle \\ \langle\mathbf{v}|\mathbf{u}\rangle & 1 \end{pmatrix} \quad (8.37)$$

mit den Eigenwerten $\rho_{\pm} = (1 \pm \alpha)/2$, $\alpha = |\langle\mathbf{u}|\mathbf{v}\rangle|$, $0 \leq \alpha \leq 1$.

Die Entropie (6.5) dieses Gemisches, $S = -\frac{1}{2}((1+\alpha)\ln(1+\alpha) + (1-\alpha)\ln(1-\alpha) - 2\ln 2)$, ist maximal, wenn $|\mathbf{u}\rangle$ senkrecht auf $|\mathbf{v}\rangle$ steht, $\alpha = 0$, und nimmt monoton auf Null ab, wenn α auf Eins anwächst. Damit die Entropie mit fortlaufender Zeit $t > t'$ in keinem Fall abnimmt, muß also für jedes Paar von Zuständen zur Zeit t und t' die Ungleichung

$$|\langle\mathbf{u}(t)|\mathbf{v}(t)\rangle| \leq |\langle\mathbf{u}(t')|\mathbf{v}(t')\rangle| \quad (8.38)$$

gelten. Insbesondere müssen Paare aufeinander senkrechter Zustände im Laufe der Zeit senkrecht bleiben, und jede Orthonormalbasis $\Lambda_i(t')$ wird eine Orthonormalbasis $\Lambda_i(t)$.

Aber dann erzwingt die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit (1.28), daß sich kein Betrag eines Skalarproduktes mit der Zeit ändert. Denn zerlegen wir den Zustand $\mathbf{v}(t')$ in eine Orthonormalbasis $\Lambda_i(t')$ mit $\Lambda_1(t') = \mathbf{u}(t')$ und $\mathbf{v}(t)$ in die Basis $\Lambda_i(t)$, die sich daraus im Laufe der Zeit entwickelt, so gilt

$$1 = \sum_i |\langle\Lambda_i(t)|\mathbf{v}(t)\rangle|^2 \leq \sum_i |\langle\Lambda_i(t')|\mathbf{v}(t')\rangle|^2 = 1. \quad (8.39)$$

Da keiner der Summanden zunimmt und die Summe gleich bleibt, bleibt jeder Term ungeändert, insbesondere ist $|\langle\mathbf{u}(t)|\mathbf{v}(t)\rangle| = |\langle\mathbf{u}(t')|\mathbf{v}(t')\rangle|$.

Demnach ist, wenn die Entropie (6.5) im Laufe der Zeit in keinem Fall abnimmt, die Zeitentwicklung eine wahrscheinlichkeitstreue Abbildung (8.7) von Strahlen des Hilbertraumes, zu der nach Wignertheorem eine unitäre oder antiunitäre Abbildung des Hilbertraumes gehört. Da das Produkt zweier antiunitärer Abbildungen unitär ist und sich jede Zeitentwicklung als hintereinander folgende Entwicklungen in Teilzeiten schreiben läßt, ist Zeitentwicklung unitär und die Schrödingergleichung linear.

Dennoch wird die Zeitentwicklung von beispielsweise einem geladenen Teilchen, das in leitenden Flächen seine Spiegelladung erzeugt, zutreffend von einer nichtlinearen Schrödingergleichung beschrieben, in der die influenzierte Ladung durch die Wellenfunktion des Teilchens ausgedrückt ist. Die Entropie eines Gemisches solcher geladenen Teilchen darf durchaus abnehmen, nur nicht die Entropie des abgeschlossenen Gesamtsystems, das auch die Spiegelladungen umfaßt. Die Schrödingergleichung des Gesamtsystems ist linear.

9 Relativistische Quantenmechanik

Relativistisch ist Quantenmechanik, in deren Hilbertraum eine unitäre Darstellung der Überlagerung derjenigen Poincaré-Transformationen existiert, die stetig mit der Identität zusammenhängen. Dabei ist der Hamiltonoperator H die Erzeugende der Zeittranslation.

9.1 Poincaré- und Lorentztransformationen

Poincaré-Transformationen $T_{\Lambda, \mathbf{a}}$ sind linear inhomogene Transformationen der Raumzeit

$$T_{\Lambda, \mathbf{a}} : \begin{cases} \mathbb{R}^4 & \rightarrow & \mathbb{R}^4 \\ \mathbf{x} & \mapsto & \mathbf{x}' = \Lambda \mathbf{x} + \mathbf{a} \end{cases} . \quad (9.1)$$

Dabei können \mathbf{x}' , \mathbf{x} und $\mathbf{a} = (a^0, a^1, a^2, a^3)$ als Spaltenvektoren gelesen werden, die wir im laufenden Text aber als Zeilenvektoren schreiben, und Λ als 4×4 Matrix. Der Vierervektor \mathbf{a} bewirkt eine Verschiebung oder Translation, Λ ist definitionsgemäß eine Lorentztransformation, also eine Transformation, die Skalarprodukte

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u^0 v^0 - u^1 v^1 - u^2 v^2 - u^3 v^3 \quad (9.2)$$

invariant läßt

$$(\Lambda \mathbf{u}) \cdot (\Lambda \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} , \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} . \quad (9.3)$$

Weil das Skalarprodukt in Matrixschreibweise die Form

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^T \eta \mathbf{v} \quad (9.4)$$

hat, wobei η die Matrix

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

ist, erfüllen Lorentztransformationen die Matrixgleichung

$$\Lambda^T \eta \Lambda = \eta . \quad (9.6)$$

Zum Beispiel ist in einer Zerlegung in $(1 + 3) \times (1 + 3)$ -Blöcke die drehungsfreie Lorentztransformation $L_{\vec{v}}$, die die durch s parametrisierte Weltlinie $\Gamma : s \mapsto \mathbf{x}(s) =$

$(s, 0, 0, 0)$ eines im Ursprung ruhenden Teilchens auf die Weltlinie $\Gamma' : s \mapsto x'(s) = \frac{s}{\sqrt{1-v^2}}(1, \vec{v})$ eines Teilchens abbildet, das sich mit Geschwindigkeit \vec{v} , $v^2 < 1$, bewegt:

$$L_{\vec{v}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{\vec{v}^T}{\sqrt{1-v^2}} \\ \frac{\vec{v}}{\sqrt{1-v^2}} & \mathbf{1}_{3 \times 3} + \frac{a(v)}{v^2} \vec{v} \vec{v}^T \end{pmatrix}, \quad \text{mit} \quad a(v) = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} - 1. \quad (9.7)$$

Sie bildet den Vektor $e_0 = (1, 0, 0, 0)$ auf $\frac{1}{\sqrt{1-v^2}}(1, \vec{v})$ ab und läßt die Vektoren w invariant, die senkrecht auf e_0 und $L_{\vec{v}} e_0$ stehen, also nur einen räumlichen Anteil haben, der zudem senkrecht auf \vec{v} steht.

Hier und im folgenden verwenden wir Einfachheit halber Maßsysteme mit $c = 1$.

Drehungen sind Lorentztransformationen, die die Zeit unverändert lassen, $x'^0 = x^0$. Die Poincaré-Transformationen bilden eine Gruppe, denn hintereinander ausgeführte oder invertierte Poincaré-Transformationen sind wieder Poincaré-Transformationen

$$\begin{aligned} T_{\Lambda_2, a_2} T_{\Lambda_1, a_1}(x) &= T_{\Lambda_2, a_2}(\Lambda_1 x + a_1) = \Lambda_2(\Lambda_1 x + a_1) + a_2 = T_{\Lambda_2 \Lambda_1, a_2 + \Lambda_2 a_1}(x), \\ (T_{\Lambda, a})^{-1} &= T_{\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1} a}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Die Lorentzgruppe besteht aus vier Zusammenhangskomponenten. Mit dem Determinantenproduktsatz $\det(AB) = (\det A)(\det B)$ und wegen $\det \Lambda^T = \det \Lambda$ folgt nämlich aus $\Lambda^T \eta \Lambda = \eta$ die Gleichung $(\det \Lambda)^2 = 1$, also

$$\det \Lambda = 1 \quad \text{oder} \quad \det \Lambda = -1. \quad (9.9)$$

Zudem folgt aus der 0-0-Komponente von $\Lambda^T \eta \Lambda = \eta$,

$$(\Lambda^0_0)^2 - (\Lambda^1_1)^2 - (\Lambda^2_2)^2 - (\Lambda^3_3)^2 = 1, \quad (9.10)$$

die Ungleichung $(\Lambda^0_0)^2 \geq 1$, also

$$\Lambda^0_0 \geq 1 \quad \text{oder} \quad \Lambda^0_0 \leq -1. \quad (9.11)$$

Daher können nicht die $\mathbf{1}$ -Matrix, die Raumspiegelung \mathcal{P} und die Zeitumkehr \mathcal{T} ,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T} = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (9.12)$$

sowie ihr Produkt \mathcal{PT} durch stetige Abänderung ihrer Matrixelemente innerhalb der Lorentzmatrizen ineinander verformt werden, denn Λ^0_0 und $\det \Lambda$ sind stetige Funktionen der Matrixelemente.

Jede Lorentztransformation ist entweder von der Form

$$\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{T}\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{P}\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{TP}\Lambda, \quad (9.13)$$

wobei Λ eine eigentliche Lorentztransformation ist, das heißt, sie ist orientierungstreu, $\det \Lambda = 1$, und zeitrichtungstreu, $\Lambda^0_0 \geq 1$.

Jede eigentliche Lorentztransformation Λ läßt sich als Produkt einer Drehung \mathbf{R} , die $\mathbf{R}^0_0 = 1$ und $\det \mathbf{R} = 1$ erfüllt, mit einer drehungsfreien Lorentztransformation $\mathbf{L}_{\vec{v}}$ (9.7) schreiben [6, Anhang D]

$$\Lambda = \mathbf{L}_{\vec{v}} \mathbf{R} . \quad (9.14)$$

Denn $\mathbf{w} = \Lambda \mathbf{e}_0$ definiert einen räumlichen Vektor $\vec{v} = \frac{\mathbf{w}}{w^0}$ und eine drehungsfreie Lorentztransformation $\mathbf{L}_{\vec{v}}$, die ebenfalls \mathbf{e}_0 auf \mathbf{w} abbildet, $\mathbf{L}_{\vec{v}} \mathbf{e}_0 = \Lambda \mathbf{e}_0$. Demnach ist $\mathbf{L}_{\vec{v}}^{-1} \Lambda = \mathbf{R}$ eine Lorentztransformation, die \mathbf{e}_0 invariant läßt, also eine Drehung. Diese Zerlegung $\Lambda = \mathbf{L}_{\vec{v}} \mathbf{R}$ ist bei gegebenem \mathbf{e}_0 , $(\mathbf{e}_0)^2 > 0$, eindeutig.

Da sich jedes $\mathbf{L}_{\vec{v}}$ und jede Drehung \mathbf{R} mit $\det \mathbf{R} = 1$ als Exponentialreihe einer Matrix ω mit

$$\eta \omega = -(\eta \omega)^T \quad (9.15)$$

schreiben läßt, hängen die eigentlichen Lorentztransformationen stetig mit der $\mathbf{1}$ -Matrix zusammen. Umgekehrt ist jedes

$$\Lambda = e^\omega \quad (9.16)$$

eine Lorentztransformation, wenn (9.15) erfüllt ist. Denn es gilt $(\omega^n)^T = (\omega^T)^n$ für jede Potenz von ω und folglich für die Exponentialreihe $(e^\omega)^T = e^{(\omega^T)}$. Zudem gilt $\eta \omega = -\omega^T \eta$ und daher $\eta \omega^n = (-1)^n (\omega^T)^n \eta$ und für die Exponentialreihe $\eta e^\omega = e^{-\omega^T} \eta$, also erfüllt e^ω die definierende Relation (9.6) von Lorentzmatrizen, $(e^\omega)^T \eta (e^\omega) = e^{\omega^T} e^{-\omega^T} \eta = \eta$.

Jede Translation $\mathbf{T}_{1,\alpha}$ läßt sich als Exponentialreihe ¹

$$\mathbf{T}_{1,\alpha} = e^{\alpha^m \partial_m} \quad (9.17)$$

von infinitesimalen Transformationen ∂_m

$$\partial_m x^n = \delta_m^n \quad (9.18)$$

schreiben, wie man elementar durch Anwenden der Reihe auf Funktionen $f(x)$ bestätigt, $e^{\alpha^m \partial_m} f(x) = f(x + \alpha)$.

9.2 Basiszustände und Wellenfunktionen

Eine unitäre Darstellung der Poincaré-Transformationen im Hilbertraum \mathcal{H} ordnet jeder Transformation $\mathbf{T}_{\Lambda,\alpha}$ einen unitären oder antiunitären Operator $\mathbf{U}_{\Lambda,\alpha} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ zu, wobei das Produkt der unitären Operatoren dem Hintereinanderausführen der Poincaré-Transformationen entspricht

$$\mathbf{U}_{\Lambda_2,\alpha_2} \mathbf{U}_{\Lambda_1,\alpha_1} = \mathbf{U}_{\Lambda_2 \Lambda_1, \alpha_2 + \Lambda_2 \alpha_1} . \quad (9.19)$$

Die Transformationen $\mathbf{U}_{\Lambda,0}$ schreiben wir kurz als \mathbf{U}_Λ , die zu Translationen gehörigen $\mathbf{U}_{1,\alpha}$ als \mathbf{U}_α .

¹Wir verwenden die Einsteinsche Summationskonvention: ein in einem Term doppelt vorkommender Index enthält die Anweisung, über seinen Laufbereich zu summieren.

Da sich jede drehungsfreie Lorentztransformation als Quadrat $\Lambda = (e^{\frac{\omega}{2}})^2$ schreiben läßt und da das Produkt von zwei antiunitären Operatoren unitär ist, gehören zu drehungsfreien Lorentztransformationen unitäre Operatoren U_{L_v} . Aus gleichen Grund gehören zu Drehungen R und zu Translationen unitäre Operatoren. Lediglich zur Raumspiegelung \mathcal{P} oder zur Zeitumkehr \mathcal{T} kann ein antiunitärer Operator Π oder T gehören.

Da sich Translationen, Drehungen und drehungsfreie Lorentztransformationen als Exponentialreihen schreiben lassen, lassen sich die zugehörigen unitären Operatoren als Exponentialreihe mit hermiteschen Operatoren $P^m = P^{m\dagger}$ und $M^{mn} = M^{mn\dagger}$, den Erzeugenden von Translationen, Drehungen und drehungsfreien Lorentztransformationen, schreiben

$$U_a = e^{-ia \cdot P} \quad , \quad U_\Lambda = e^{\frac{i}{2} \omega_{mn} M^{mn}} \quad . \quad (9.20)$$

Hierbei verwenden wir einfachheitshalber Maßsysteme mit $\hbar = 1$. Die Erzeugenden P^i , $i = 1, 2, 3$, der räumlichen Translationen sind definitionsgemäß die drei Komponenten des Impulsoperators, die Erzeugende der Zeittranslation ist der Hamiltonoperator.

$$H = P^0 \quad (9.21)$$

Die Koeffizienten $\omega_{mn} = \eta_{ml} \omega^l{}_n = -\omega_{nm}$ sind die Matrixelemente der antisymmetrischen Matrix $\eta\omega$ (9.15), wobei $\Lambda = e^\omega$ gilt. Wegen $\omega_{mn} = \eta_{ml} \omega^l{}_n = -\omega_{nm}$ gilt auch $M^{mn} = -M^{nm}$, ein eventueller symmetrischer Anteil würde in der Doppelsumme $\omega_{mn} M^{mn}$ nicht beitragen. Die Operatoren M^{0i} erzeugen drehungsfreie Lorentztransformationen, die Operatoren $M^{12} = -J_z$, $M^{23} = -J_x$ und $M^{31} = -J_y$ erzeugen Drehungen und sind definitionsgemäß die drei Komponenten des Drehimpulsoperators \vec{J} .

Weil Translationen vertauschen, $U_a U_b = U_{a+b} = U_b U_a$, vertauschen die Komponenten des Viererimpulses

$$[P^m, P^n] = 0 \quad (9.22)$$

und die Operatoren P^m haben gemeinsame Eigenzustände $\chi_{p\sigma}$

$$P^m \chi_{p\sigma} = p_m \chi_{p\sigma} \quad , \quad (9.23)$$

die eine Basis des Hilbertraumes aufspannen. Der Index σ ist ein Entartungsindex, den wir im Vorgriff auf das Ergebnis unserer Betrachtung als Spin des Zustandes $\chi_{p\sigma}$ mit Impuls p bezeichnen.

Mit Lorentztransformationen werden Translationen transformiert,

$$U_\Lambda U_a U_\Lambda^{-1} = U_{\Lambda a} \quad (9.24)$$

denn es gilt $U_{\Lambda,0} U_{1,a} U_{\Lambda^{-1},0} \stackrel{9.19}{=} U_{\Lambda, \Lambda a} U_{\Lambda^{-1},0} \stackrel{9.19}{=} U_{1, \Lambda a}$, und für den Viererimpuls P folgt $U_\Lambda e^{-ia \cdot P} U_\Lambda^{-1} = U_{\Lambda a} = e^{-i(\Lambda a) \cdot P} = e^{-i(\Lambda a) \cdot (\Lambda \Lambda^{-1} P)} \stackrel{9.3}{=} e^{-ia \cdot (\Lambda^{-1} P)}$. Weil für jede Potenzreihe $Uf(P)U^{-1} = f(U P U^{-1})$ gilt, folgt also $e^{(-ia \cdot U_\Lambda P U_\Lambda^{-1})} = e^{-ia \cdot (\Lambda^{-1} P)}$ oder, für die inverse Lorentztransformation ausgeschrieben,

$$U_\Lambda^{-1} P^m U_\Lambda = \Lambda^m{}_n P^n \quad . \quad (9.25)$$

Daher ist $\mathbf{U}_\Lambda \chi_{p\sigma}$ ein Zustand mit Viererimpuls Λp .

$$\mathbf{P}^m(\mathbf{U}_\Lambda \chi_{p\sigma}) = \mathbf{U}_\Lambda (\mathbf{U}_\Lambda^{-1} \mathbf{P}^m \mathbf{U}_\Lambda) \chi_{p\sigma} = \mathbf{U}_\Lambda \Lambda^m_n \mathbf{P}^n \chi_{p\sigma} = \Lambda^m_n \mathbf{p}^n (\mathbf{U}_\Lambda \chi_{p\sigma}) \quad (9.26)$$

Im letzten Schritt ist die Eigenwertgleichung (9.23) verwendet worden, und die Multiplikation mit den Zahlen $\Lambda^m_n \mathbf{p}^n$ ist mit der unitären Transformation \mathbf{U}_Λ vertauscht worden. Weil der Zustand $(\mathbf{U}_\Lambda \chi_{p\sigma})$ Vierimpuls Λp hat, ist er eine Linearkombination von Basiszuständen mit diesem Impuls

$$\mathbf{U}_\Lambda \chi_{p\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{(\Lambda p)\sigma'} M_{\sigma'\sigma} \quad (9.27)$$

Wenn es, wie wir im weiteren unterstellen wollen, Zustände $\chi_{\text{Ruhe}\sigma}$ gibt, die zu einem ruhenden Teilchen gehören, dessen Energie seine Masse ist, $p^0 = m$, und dessen Impuls $\vec{p} = 0$ verschwindet, dann gibt es auch Zustände $\mathbf{U}_{L_{\vec{v}}} \chi_{\text{Ruhe}\sigma}$ des bewegten Teilchens mit Energie $p^0 = \frac{m}{\sqrt{1-v^2}}$ und Impuls $\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2}}$, $\mathbf{p} = (p^0, \vec{p}^T)^T = L_{\vec{v}}(m, 0, 0, 0)^T$, die man durch drehungsfreie Lorentztransformation (9.7) des ruhenden Teilchens erhält. Dabei ist m eine feste Zahl und nicht ein Eigenwert aus einem Kontinuum möglicher Energien, die Mehrteilchenzustände mit verschwindendem Gesamtimpuls \vec{p} haben können. Die möglichen Eigenwerte \mathbf{p} , die dieses Teilchen haben kann, bilden die Massenschale

$$p^2 = p^{02} - \vec{p}^2 = m^2. \quad (9.28)$$

Auf diesen Einteilchenzuständen wirkt H als der Operator

$$H = p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}. \quad (9.29)$$

Weil das Spektrum von \vec{P} dreidimensional kontinuierlich ist, können die Eigenzustände nicht normierbar sein, sondern müssen kontinuierlich normiert sein. Wir verlangen daher

$$\langle \chi_{p\sigma} | \chi_{p'\sigma'} \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') \delta_{\sigma\sigma'} \quad (9.30)$$

und setzen aus den Basiszuständen normierbare Wellenpakete zusammen

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3p \chi_{p\sigma} \tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{p}). \quad (9.31)$$

Dabei ist $\tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{p})$ die Impulswellenfunktion für Spin σ , das heißt, die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Zustandes $|\Psi\rangle$ den Spin σ zu messen und dabei den Impuls \vec{p} in einem Bereich Δ_p zu finden, ist

$$w(\sigma, \Delta_p, \Psi) = \int_{\Delta_p} d^3p |\tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{p})|^2. \quad (9.32)$$

Ist Δ_p ein kleiner Bereich bei \vec{p} von der Größe d^3p , so gilt näherungsweise

$$w(\sigma, \vec{p}, d^3p, \Psi) = |\tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{p})|^2 d^3p. \quad (9.33)$$

Die Ortswellenfunktion $\Psi_\sigma(\vec{x}) = \langle \Lambda_{x\sigma} | \Psi \rangle$ ist das Skalarprodukt des Ortseigenzustandes $\Lambda_{x\sigma}$ mit Spin σ mit dem Zustand Ψ . Es ergibt sich aus den Ortswellenfunktionen der Impulszustände

$$\langle \Lambda_{x\sigma} | \chi_{p\sigma'} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \delta_{\sigma\sigma'} e^{i\vec{p}\vec{x}} \quad (9.34)$$

als

$$\psi_\sigma(\vec{x}) = \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{x}} \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) . \quad (9.35)$$

Daß die Ortswellenfunktion die Fouriertransformierte der Impulswellenfunktion ist (3.53), gilt immer, wenn die Orts- und Impulsoperatoren die Heisenbergschen Vertauschungsrelation $[X, P] = i$ (2.31) erfüllen. Wir verwenden diese Vertauschungsrelation, die daraus folgt, daß \vec{P} Translationen von \vec{X} erzeugt, um den Ortsoperator in relativistischer Quantenmechanik zu definieren.

Es läßt sich in relativistischer Quantenmechanik kein Operator X^0 definieren, der die Zeit mißt und mit den anderen Orts- und Impulsoperatoren Heisenbergsche Vertauschungsrelationen

$$[X^m, P^n] = -i\eta^{mn} \quad (9.36)$$

erfüllt. Solche Relationen sind zwar verträglich damit, daß X und P unter Lorentztransformationen wie Vektoren transformieren, sie hätten aber zur Folge, daß das Spektrum von H so wie das Spektrum der Operatoren P_x , P_y und P_z kontinuierlich ist und auch bei festgehaltenen Werten der anderen Impulsoperatoren aus allen reellen Zahlen besteht. Das Spektrum möglicher Energien wäre also nach unten unbeschränkt. Zudem wäre (9.36) unverträglich mit $P^0 = \sqrt{m^2 + \vec{P}^2}$ (9.29), denn $P^0(\vec{P})$ vertauscht mit X^0 , wenn X^0 mit \vec{P} vertauscht.

Da kovariante String-Theorien die Relation (9.36) enthalten, sind sie meiner Einschätzung nach physikalisch unhaltbar. Zwar enthalten sie eine Auswahlregel, daß für physikalische Zustände $p^2 = m^2$ gelten muß, wobei für m^2 eine diskrete Menge von Zahlen zulässig ist. Es lassen sich aber aus kontinuumsnormierten Basiszuständen $\langle \chi_p | \chi_{p'} \rangle = \delta^4(p - p')$, wie sie zur Realisierung von (9.36) erforderlich wären, keine normierbaren Wellenpakete zusammensetzen, deren Impulswellenfunktionen $\tilde{\psi}(p)$ nur bei $p^2 = m^2$ von Null verschieden sind: Durch Abändern des Funktionswertes der Wellenfunktion in einzelnen Punkten eines Kontinuums ändert man den Zustand nicht, denn alle Skalarprodukte bleiben unverändert. Folglich gehört eine Wellenfunktion, die nur für $p^2 = m^2$ von Null verschieden ist und im übrigen in einem vierdimensionalen Kontinuum von Impulswerten verschwindet, zum Nullvektor des Hilbertraumes \mathcal{H} und nicht zu einem physikalischen Zustand. Enthielte die Wellenfunktion eine Deltafunktion $\tilde{\psi}(p) = \delta(p^0 - \sqrt{m^2 + \vec{p}^2})f(\vec{p})$, so wäre $\langle \Psi | \Psi \rangle$ nicht Null sondern unendlich und gehörte wiederum nicht zu einem physikalischen Zustand. Das Problem wird von String-Theoretikern ignoriert.

Wegen $H = \sqrt{m^2 + \vec{P}^2}$ (9.29) ist die Zeitentwicklung von Einteilchenzuständen und

ihrer Ortswellenfunktion einfach

$$|\Psi(\mathbf{t})\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{p} |\chi_{\mathbf{p}\sigma}\rangle e^{-i\sqrt{m^2+\vec{p}^2}t} \tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{\mathbf{p}}) , \quad (9.37)$$

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}}) = \int d^3\mathbf{p} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{\mathbf{p}}\vec{\mathbf{x}}-p^0t)} \tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{\mathbf{p}}) . \quad (9.38)$$

Auch wenn hier $\vec{\mathbf{x}}$ und \mathbf{t} im Lorentzinvarianten Skalarprodukt auftreten, so haben sie doch wesentlich verschiedene Eigenschaften: $\vec{\mathbf{x}}$ sind mögliche Meßwerte von Ortsoperatoren $\vec{\mathbf{X}}$, \mathbf{t} parametrisiert die Zustände im Ablauf der Zeit. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand $\Psi(\mathbf{t})$ mit Spinwert σ in einem örtlichen Bereich Δ zu finden, ist

$$w(\sigma, \Delta, \Psi) = \int_{\Delta} d^3\mathbf{x} |\psi_{\sigma}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})|^2 . \quad (9.39)$$

Auch in relativistischer Quantenmechanik sind Ort und Zeit konzeptionell grundverschieden.

Durch inverse Fouriertransformation läßt sich die Impulswellenfunktion durch die Ortswellenfunktion ausdrücken

$$\tilde{\psi}_{\sigma}(\vec{\mathbf{p}}) = \int d^3\mathbf{x} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i(\vec{\mathbf{p}}\vec{\mathbf{x}}-p^0t)} \psi_{\sigma}(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}}) . \quad (9.40)$$

Dies gilt für alle Zeiten \mathbf{t} . In (9.38) eingesetzt ergibt sich ($\mathbf{x} = (\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})$, $\mathbf{y} = (\mathbf{y}^0, \vec{\mathbf{y}})$)

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{y} D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi_{\sigma}(\mathbf{y}) \quad \text{mit} \quad D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int d^3\mathbf{p} \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{\mathbf{p}}(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{y}})-\sqrt{m^2+\vec{p}^2}(x^0-y^0))} . \quad (9.41)$$

Die Funktion $D(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ verschwindet nicht, wenn \mathbf{x} raumartig zu \mathbf{y} liegt. Sie hängt nur von $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ ab und schreibt sich mit dem Lorentzinvarianten Integrationsmaß

$$\tilde{d}\mathbf{p} = \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2p^0} , \quad p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} \quad (9.42)$$

als Ableitung

$$D(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} 2p^0 e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} = 2 \frac{\partial}{\partial x^0} (-i) \int \tilde{d}\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} . \quad (9.43)$$

Im Anhang zeigen wir, daß das Integral für große raumartige Abstände \mathbf{r} wie $e^{-m\mathbf{r}}$ abnimmt.

Daß $D(\mathbf{x})$ für raumartige Abstände nicht verschwindet, besagt nur, daß man in relativistischer Quantenmechanik Zustände höchstens zu einem Zeitpunkt strikt lokalisieren kann. Das Problem ist die Zeitableitung der Ortswellenfunktion. Wenn die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt außerhalb eines Gebietes verschwindet, so ist in diesem Augenblick schon die Zeitableitung der Wellenfunktion auch außerhalb dieses Gebietes von Null verschieden. Könnte man nämlich zu einer Zeit $\mathbf{t} = 0$ die Ortswellenfunktion $\psi(0, \vec{\mathbf{x}})$ und ihre Zeitableitung $\dot{\psi}(0, \vec{\mathbf{x}})$ auf ein Gebiet lokalisieren, so wäre $\psi(\mathbf{t}, \vec{\mathbf{x}})$ eine Lösung

der Klein-Gordon-Gleichung $(\square + m^2)\psi = 0$ mit lokalisierten Anfangsbedingungen und diese Lösungen verschwinden außerhalb des Vorwärts- und Rückwärtslichtkegels des Lokalisierungsgebietes.

Das Problem der Lokalisierung relativistischer Einteilchenzustände zeigt sich auch beim Wahrscheinlichkeitsstrom. Auch wenn wegen der Schrödingergleichung die Wahrscheinlichkeit erhalten ist, so gehören dennoch zu den Ortswahrscheinlichkeitsdichten

$$\rho_\sigma(t, \vec{x}) = |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 \quad (9.44)$$

keine lokalen Ströme $\vec{j}_\sigma(t, \vec{x})$, die Kontinuitätsgleichungen $\dot{\rho}_\sigma + \text{div}\vec{j}_\sigma = 0$ erfüllen und zu lokaler Erhaltung von Wahrscheinlichkeiten gehören. Es ist nämlich definitionsgemäß ein lokaler Strom aus den Funktionen $\psi_\sigma(t, \mathbf{x})$, $\psi_\sigma^*(t, \mathbf{x})$ und endlich vielen ihrer Ableitungen gebildet. Er muß, wenn er zu ρ_σ gehört, linear in Ableitungen von ψ_σ und linear in Ableitungen von ψ_σ^* sein und ist dann wegen (9.38) von der Form

$$\vec{j}_\sigma(\mathbf{x}) = \int d^3p' d^3p \frac{1}{(2\pi)^3} e^{-i(p-p')\cdot\mathbf{x}} \tilde{\psi}_\sigma^*(\vec{p}') \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) \vec{J}_\sigma(\vec{p}', \vec{p}) . \quad (9.45)$$

Der Strom ist lokal und macht nur Gebrauch von endlich vielen Ableitungen von ψ_σ und ψ_σ^* , wenn \vec{J}_σ polynomial von \vec{p} und \vec{p}' abhängt. Dann ist auch $\text{div}\vec{j}_\sigma$ von dieser Form

$$\text{div}\vec{j}_\sigma(\mathbf{x}) = \int d^3p' d^3p \frac{i}{(2\pi)^3} e^{-i(p-p')\cdot\mathbf{x}} \tilde{\psi}_\sigma^*(\vec{p}') \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) (\vec{p} - \vec{p}') \vec{J}_\sigma(\vec{p}', \vec{p}) \quad (9.46)$$

und $(\vec{p} - \vec{p}') \vec{J}_\sigma(\vec{p}', \vec{p})$ ist polynomial in \vec{p} und \vec{p}' . Es ist aber in

$$\dot{\rho}_\sigma(\mathbf{x}) = \int d^3p' d^3p \frac{-i}{(2\pi)^3} e^{-i(p-p')\cdot\mathbf{x}} \tilde{\psi}_\sigma^*(\vec{p}') \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) (p^0 - p'^0) \quad (9.47)$$

die Größe $p^0 - p'^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} - \sqrt{m^2 + \vec{p}'^2}$ nichtpolynomial und der Strom mit

$$\vec{J}_\sigma(\vec{p}, \vec{p}') = (\vec{p} + \vec{p}') \frac{\sqrt{m^2 + \vec{p}^2} - \sqrt{m^2 + \vec{p}'^2}}{\vec{p}^2 - \vec{p}'^2} \quad (9.48)$$

erfüllt zwar eine Kontinuitätsgleichung, ist aber nichtlokal.

Diese unausweichlichen Schlußfolgerungen sind hinzunehmen. Genau betrachtet gibt es in der Quantenmechanik keinen Operator im Hilbertraum, der zur Messung eines Wahrscheinlichkeitsstromes gehört. Auch in nichtrelativistischer Quantenmechanik gehört zum Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \overleftrightarrow{\partial} \psi) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\partial} \psi - (\vec{\partial} \psi^*) \psi) \quad (9.49)$$

kein hermitescher Operator. Gemessen werden Impulse, daraus werden Geschwindigkeiten und Ströme rekonstruiert. Die quantenmechanische Impulsmessung aber ist nichtlokal.

9.3 Unitäre Darstellung der Stabilitätsgruppe

Die Untergruppe $H_{\mathbf{p}}$ aller Lorentztransformationen, die einen Impuls \mathbf{p} invariant lassen, $H_{\mathbf{p}} = \{\Lambda : \Lambda \mathbf{p} = \mathbf{p}\}$, nennen wir Stabilitätsgruppe von \mathbf{p} oder auch kleine Gruppe.

Weil zu Lorentztransformationen gehörige unitäre Transformationen U_{Λ} Zustände $\chi_{\mathbf{p}\sigma}$ mit Impuls \mathbf{p} auf Zustände mit Impuls $\Lambda \mathbf{p}$ abbilden (9.27), werden die Unterräume von Zuständen mit festem Impuls \mathbf{p} durch die zur Stabilitätsgruppe $H_{\mathbf{p}}$ gehörigen unitären Transformationen auf sich abgebildet.

Die Stabilitätsgruppe des Viererimpulses ruhender Teilchen $\underline{\mathbf{p}} = (\mathbf{m}, 0, 0, 0)$ besteht aus Drehungen \mathbf{R} . Die zugehörigen unitären Transformationen drehen die Basiszustände $\chi_{\text{Ruhe } \sigma}$ in Linearkombinationen

$$U_{\mathbf{R}} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe } \sigma'} D_{\sigma' \sigma}(\mathbf{R}) . \quad (9.50)$$

Die hierbei auftretenden Entwicklungskoeffizienten $D_{\sigma' \sigma}(\mathbf{R})$ sind die Matrixelemente einer unitären Darstellung der Gruppe der Drehungen!

Denn für hintereinander ausgeführte Drehungen gilt

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{R}_1} U_{\mathbf{R}_2} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} &= U_{\mathbf{R}_1} \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe } \sigma'} D_{\sigma' \sigma}(\mathbf{R}_2) = \sum_{\sigma'' \sigma'} \chi_{\text{Ruhe } \sigma''} D_{\sigma'' \sigma'}(\mathbf{R}_1) D_{\sigma' \sigma}(\mathbf{R}_2) \\ &= U_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = \sum_{\sigma''} \chi_{\text{Ruhe } \sigma''} D_{\sigma'' \sigma}(\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2) , \end{aligned} \quad (9.51)$$

und $D(\mathbf{R})$ ist folglich eine Darstellung

$$\sum_{\sigma'} D_{\sigma'' \sigma'}(\mathbf{R}_1) D_{\sigma' \sigma}(\mathbf{R}_2) = D_{\sigma'' \sigma}(\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2) . \quad (9.52)$$

Die Darstellungsmatrizen $D(\mathbf{R})$ sind unitär, denn $U_{\mathbf{R}}$ ist unitär und läßt Skalarprodukte invariant

$$\begin{aligned} \delta^3(\vec{\mathbf{p}}') \delta_{\sigma' \sigma} &\stackrel{9.30}{=} \langle U_{\mathbf{R}} \chi_{\mathbf{p}' \sigma'} | U_{\mathbf{R}} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} \rangle \stackrel{9.27}{=} \sum_{\nu' \nu} \langle \chi_{\mathbf{R} \mathbf{p}' \nu'} | \chi_{\text{Ruhe } \nu} \rangle M_{\nu' \sigma'}^* D_{\nu \sigma}(\mathbf{R}) \\ &= \sum_{\nu' \nu} \delta^3(\mathbf{R} \vec{\mathbf{p}}') \delta_{\nu' \nu} M_{\nu' \sigma'}^* D_{\nu \sigma}(\mathbf{R}) . \end{aligned} \quad (9.53)$$

Wegen $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$ können wir den Faktor bei $\delta^3(\mathbf{R} \vec{\mathbf{p}}')$ bei $\vec{\mathbf{p}}' = \mathbf{0}$ auswerten. Dort ist $M_{\nu' \sigma'} = D_{\nu' \sigma'}(\mathbf{R})$ (9.50). Zudem ist $\delta^3(\mathbf{R} \vec{\mathbf{p}}') = \delta^3(\vec{\mathbf{p}}') / |\det \mathbf{R}| = \delta^3(\vec{\mathbf{p}}')$. Vergleichen wir nun die Koeffizienten der Deltafunktion, so lesen wir ab, daß $D_{\nu \sigma}$ Matrixelemente einer Matrix sind, die $D^\dagger D = 1$ erfüllt, also unitär ist

$$\delta_{\sigma' \sigma} = \sum_{\nu} D_{\nu \sigma'}^*(\mathbf{R}) D_{\nu \sigma}(\mathbf{R}) = (D^{*T} D)_{\sigma' \sigma} . \quad (9.54)$$

Daß die Darstellung der Drehgruppe unitär sein muß, schränkt sie nicht wesentlich ein. Denn da die Drehgruppe kompakt ist, ist jede ihrer irreduziblen Darstellungen in geeigneter Basis unitär.

Der Unterraum der Zustände des ruhenden Teilchens zerfällt in Drehimpulsmultipletts. Da verschiedene Multipletts nicht ineinander transformieren, reicht es, jeweils nur ein Multiplett zu betrachten, also einfachheitshalber zu unterstellen, daß \mathbf{D} eine Darstellung mit Spin s ist mit $2s + 1$ Basiszuständen. Diese Basiszustände wählen wir als Eigenzustände von J_z und bezeichnen sie mit ihrem Spin in z -Richtung (2.46)

$$J_z \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = \sigma \chi_{\text{Ruhe } \sigma} , \quad \sigma \in \{s, s-1, \dots, -s\} . \quad (9.55)$$

Die Leiteroperatoren $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ erhöhen und erniedrigen den Spin in z -Richtung

$$J_{\pm} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = \sqrt{(s \mp \sigma)(s \pm \sigma + 1)} \chi_{\text{Ruhe } \sigma \pm 1} . \quad (9.56)$$

Mit $J_x = (J_+ + J_-)/2$ und $J_y = (J_+ - J_-)/(2i)$ läßt sich durch Auswertung der Exponentialreihe $e^{-i\vec{\alpha}\vec{J}} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe } \sigma'} \mathbf{D}_{\sigma'\sigma}(\mathbf{R})$ die Darstellungsmatrix derjenigen Drehung \mathbf{R} bestimmen, die um die Achse $\vec{\alpha}/|\vec{\alpha}|$ um den Winkel $|\vec{\alpha}|$ dreht.

9.4 Induzierte Darstellung

Die Darstellung \mathbf{D} der Stabilitätsgruppe H_p auf den Zuständen mit festem Impuls \mathbf{p} induziert die Darstellung \mathbf{U}_{Λ} aller Lorentztransformationen. Sie wirkt auf dem Hilbertraum, der von Zuständen aufgespannt wird, deren Impulse auf der zu \mathbf{p} gehörigen Massenschale liegen, also aus \mathbf{p} durch Lorentztransformationen hervorgehen.

Um dies zu zeigen, betrachten wir die drehungsfreie Lorentztransformation L_p , die den Viererimpuls $\underline{\mathbf{p}} = (m, 0, 0, 0)$ des ruhenden Teilchens auf \mathbf{p} abbildet

$$L_p \underline{\mathbf{p}} = \mathbf{p} . \quad (9.57)$$

Sie ist durch $L_{\vec{v}}$ (9.7) mit $\vec{v} = \vec{p}/p^0$ gegeben. In einer Zerlegung in $(1+3) \times (1+3)$ -Blöcke ist sie

$$L_p = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} p^0 & p^j \\ p^i & m\delta^{ij} + \frac{p^i p^j}{p^0 + m} \end{pmatrix} , \quad \text{wobei } p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} . \quad (9.58)$$

Hierbei zählen i und j , $i, j \in \{1, 2, 3\}$, die räumlichen Zeilen und Spalten ab. Eine Drehung \mathbf{R} hat in derselben Zerlegung die Form

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{R}} \end{pmatrix} , \quad \mathbf{R}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{R}}^T \end{pmatrix} , \quad (9.59)$$

wobei $\hat{\mathbf{R}}$ eine dreidimensionale Drehung ist, $\hat{\mathbf{R}}^T = \hat{\mathbf{R}}^{-1}$. Man rechnet elementar nach

$$\mathbf{R} L_p \mathbf{R}^{-1} = L_{\mathbf{R}\mathbf{p}} . \quad (9.60)$$

Der zur Lorentztransformation L_p gehörige Operator \mathbf{U}_{L_p} transformiert die Basis $\chi_{\text{Ruhe } \sigma}$ der Zustände in Ruhe in eine Basis der Zustände mit Impuls \mathbf{p} . Wir denken uns

die Basis $\chi_{p\sigma}$ schon so gewählt, daß sie bis auf positive Normierungsfaktoren $N(p, \sigma)$ mit $U_{L_p} \chi_{\text{Ruhe } \sigma}$ übereinstimmt

$$\chi_{p\sigma} = N(p, \sigma) U_{L_p} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} . \quad (9.61)$$

Wie U_Λ auf diese Basis wirkt, ist vollständig durch die Lorentzgruppe, ihre Wirkung auf p und die Darstellung D der Stabilitätsgruppe $H_{\underline{p}}$ festgelegt.

$$U_\Lambda \chi_{p\sigma} = N(p, \sigma) U_\Lambda U_{L_p} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = N(p, \sigma) U_{L_{\Lambda p}} U_{L_{\Lambda p}}^{-1} U_\Lambda U_{L_p} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} \quad (9.62)$$

Die Operatoren U_Λ sind eine Darstellung, folglich ist $U_{L_{\Lambda p}}^{-1} U_\Lambda U_{L_p} = U_W$ mit

$$W(\Lambda, p) = L_{\Lambda p}^{-1} \Lambda L_p . \quad (9.63)$$

Es ist aber $W(\Lambda, p)$ eine Lorentztransformation, die \underline{p} zunächst mit L_p auf p abbildet, dann auf Λp und schließlich drehungsfrei mit $L_{\Lambda p}^{-1}$ zurück auf \underline{p} . Sie läßt also \underline{p} invariant und ist eine Drehung, die sogenannte Wigner-Rotation.

Drehungen W werden durch $D(W)$ dargestellt

$$U_\Lambda \chi_{p\sigma} = N(p, \sigma) U_{L_{\Lambda p}} U_W \chi_{\text{Ruhe } \sigma} = N(p, \sigma) U_{L_{\Lambda p}} \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe } \sigma'} D_{\sigma'\sigma}(W) \quad (9.64)$$

und mit (9.61) ergibt sich

$$U_\Lambda \chi_{p\sigma} = \sum_{\sigma'} \frac{N(p, \sigma)}{N(\Lambda p, \sigma')} \chi_{\Lambda p \sigma'} D_{\sigma'\sigma}(W(\Lambda, p)) . \quad (9.65)$$

Aus der Normierungsbedingung (9.30) folgen die Normierungsfaktoren $N(p, \sigma)$

$$\begin{aligned} \delta^3(\vec{q} - \vec{p}) \delta_{\nu\sigma} &= \langle \chi_{q\nu} | \chi_{p\sigma} \rangle = \langle \chi_{q\nu} | U_{L_p} \chi_{\text{Ruhe } \sigma} \rangle N(p, \sigma) = N(p, \sigma) \langle U_{L_p}^{-1} \chi_{q\nu} | \chi_{\text{Ruhe } \sigma} \rangle \\ &= \sum_{\nu'} \frac{N(p, \sigma) N(q, \nu)}{N(L_p^{-1} q, \nu')} \langle \chi_{L_p^{-1} q \nu'} | \chi_{\text{Ruhe } \sigma} \rangle D_{\nu'\nu}^*(W(L_p^{-1}, q)) \\ &= \delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1} q}) \frac{N(p, \sigma) N(q, \nu)}{N(L_p^{-1} q, \nu)} D_{\sigma\nu}^*(W(L_p^{-1}, q)) \end{aligned} \quad (9.66)$$

Wegen $f(\underline{x})\delta(\underline{x}) = f(0)\delta(\underline{x})$ kann der Faktor bei der δ -Funktion dort ausgewertet werden, wo $\overrightarrow{L_p^{-1} q}$ verschwindet, also bei $q = p$. Dort ist die Wigner-Rotation $W(L_p^{-1}, p)$ wegen $L_p^{-1} p = \underline{p}$ die Identität, $L_{L_p^{-1} p} L_p^{-1} L_p = L_{L_p^{-1} p} = L_{\underline{p}} = \mathbf{1}$. Sie wird durch $D(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$ dargestellt, $D_{\sigma\nu}^*(W(L_p^{-1}, p)) = \delta_{\sigma\nu}$.

Die Normierungsfaktoren vereinfachen sich bei $q = p$ zu $N(p, \sigma)^2$, denn $N(\underline{p}, \nu) = 1$.

Vom Argument der δ -Funktion ziehen wir $\vec{0} = \vec{p} = \overrightarrow{L_p^{-1} p}$ ab

$$\delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1} q} - \overrightarrow{L_p^{-1} p}) = \delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1} (q - p)}) = \frac{1}{|\det J|} \delta^3(\vec{q} - \vec{p}) \quad (9.67)$$

Dabei ist J die 3×3 -Matrix der partiellen Ableitungen von $\overrightarrow{L_p^{-1}(\mathbf{q} - \mathbf{p})}$ nach den Komponenten von \vec{q} bei $\mathbf{q} = \mathbf{p}$. Sie hat die Matrixelemente (9.58)

$$J^i_j = \delta^i_j - \frac{p^i p^j}{p^0(p^0 + m)} \quad (9.68)$$

Ihre Determinante ist das Produkt ihrer Eigenwerte. Von denen sind zwei 1, denn Vektoren, die senkrecht auf \vec{p} stehen, werden durch J auf sich abgebildet. Zudem ist \vec{p} Eigenvektor, $J\vec{p} = -\frac{m}{p^0}\vec{p}$. Die Determinante von J hat also den Betrag $\frac{m}{p^0}$.

Für $N(\mathbf{p}, \sigma)$ erhalten wir schließlich

$$N(\mathbf{p}, \sigma) = \sqrt{\frac{m}{p^0}}. \quad (9.69)$$

Die Wirkung von eigentlichen Lorentztransformationen und Translationen auf Einteilchenzuständen

$$U_{\Lambda} \chi_{p\sigma} = \sqrt{\frac{(\Lambda p)^0}{p^0}} \sum_{\sigma'} \chi_{\Lambda p \sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\mathcal{W}(\Lambda, \mathbf{p})), \quad U_a \chi_{p\sigma} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}} \chi_{p\sigma} \quad (9.70)$$

ist, wie behauptet, vollständig durch die Masse und den Spin des Teilchens festgelegt.

Wegen (9.60) ist die Wigner-Rotation, die zu einer Drehung R gehört, unabhängig von \mathbf{p} und einfach R selbst

$$\mathcal{W}(R, \mathbf{p}) = L_{R\mathbf{p}}^{-1} R L_{\mathbf{p}} = L_{R\mathbf{p}}^{-1} (R L_{\mathbf{p}} R^{-1}) R = L_{R\mathbf{p}}^{-1} L_{\mathbf{p}} R = R, \quad (9.71)$$

und die Wirkung von Drehungen R auf Basiszustände vereinfacht sich zu

$$U_R \chi_{p\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{R\mathbf{p} \sigma'} D_{\sigma'\sigma}(R). \quad (9.72)$$

Die Ortswellenfunktionen $\psi_{\sigma}(t, \vec{x}) = \langle \Lambda_{\vec{x}\sigma} | \Psi(t) \rangle$ normierbarer Wellenpakete (9.31)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3p |\chi_{p\sigma}\rangle \tilde{\psi}_{\sigma}(p) e^{-ip^0 t} \quad (9.73)$$

werden unabhängig vom Spin durch Translation verschoben

$$|U_a \Psi(t)\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3p |\chi_{p\sigma}\rangle \tilde{\psi}_{\sigma}(p) e^{-ip \cdot a} e^{-ip^0 t}, \quad (9.74)$$

$$(U_a \psi)_{\sigma}(t, \vec{x}) = \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}_{\sigma}(p) e^{-ip \cdot a} e^{-ip^0 t} = \psi_{\sigma}(t + \mathbf{a}^0, \vec{x} + \vec{\mathbf{a}})$$

und durch Drehungen R im Spin und Ort gedreht

$$\begin{aligned} |U_R \Psi(t)\rangle &= \sum_{\sigma' \sigma} \int d^3p |\chi_{R\mathbf{p} \sigma'}\rangle D_{\sigma'\sigma}(R) \tilde{\psi}_{\sigma}(p) e^{-ip^0 t}, \\ (U_R \psi)_{\sigma'}(t, \vec{x}) &= \sum_{\sigma} D_{\sigma'\sigma}(R) \int d^3p \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(R\vec{p}) \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}_{\sigma}(p) e^{-ip^0 t} \\ &= \sum_{\sigma} D_{\sigma'\sigma}(R) \psi_{\sigma}(t, R^{-1} \vec{x}), \end{aligned} \quad (9.75)$$

wobei wir verwendet haben, daß sich das Skalarprodukt unter Drehungen nicht ändert $(\mathbf{R}\vec{p})\vec{x} = (\mathbf{R}\vec{p})(\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1}\vec{x}) = \vec{p}(\mathbf{R}^{-1}\vec{x})$.

Lorentztransformationen wirken nicht in dieser einfachen Form

$$(\mathbf{U}_\Lambda \psi)_\sigma(\Lambda \mathbf{x}) \neq \sum_{\sigma'} M_{\sigma\sigma'}(\Lambda) \psi_{\sigma'}(\mathbf{x}) , \quad (9.76)$$

wobei $M(\Lambda)$ Darstellungen der Lorentzgruppe sind, sondern sind nichtlokal. Um dies zu zeigen, schreiben wir den Einteilchenzustand

$$\Psi = \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{p} \chi_{\mathbf{p},\sigma} \tilde{\psi}_{\sigma}(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma\sigma'} \int \tilde{d}\mathbf{p} \hat{\chi}_{\mathbf{p},\sigma} D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{L}_{\mathbf{p}}) \check{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{p}) \quad (9.77)$$

mit dem Lorentzinvarianten Maß $\tilde{d}\mathbf{p}$ (9.42) als Superposition reskalierter Basiszustände

$$\hat{\chi}_{\mathbf{p},\sigma} = \sqrt{(2\pi)^3 2\mathbf{p}^0} \chi_{\mathbf{p},\sigma} , \quad \langle \hat{\chi}_{\mathbf{p}',\sigma'} | \hat{\chi}_{\mathbf{p},\sigma} \rangle = (2\pi)^3 2\mathbf{p}^0 \delta^3(\vec{\mathbf{p}}' - \vec{\mathbf{p}}) , \quad (9.78)$$

die einfacher transformieren

$$\mathbf{U}_\Lambda \hat{\chi}_{\mathbf{p},\sigma} = \sum_{\sigma'} \hat{\chi}_{\Lambda\mathbf{p},\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\mathbf{W}(\Lambda, \mathbf{p})) . \quad (9.79)$$

Wir unterstellen, daß es sich bei den Darstellungsmatrizen \mathbf{D} der Drehgruppe um die Einschränkung einer Darstellung der Lorentzgruppe auf die Untergruppe der Drehungen handelt und spalten zudem die Matrixelementen $D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{L}_{\mathbf{p}})$ von den Amplituden ab. Dann hat Ψ Koeffizientenfunktionen

$$\check{\psi}_{\sigma}(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma'} \sqrt{(2\pi)^3 2\mathbf{p}^0} D_{\sigma\sigma'}(\mathbf{L}_{\mathbf{p}}) \tilde{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{p}) . \quad (9.80)$$

Diese Funktionen $\check{\psi}$ transformieren wie Felder, $(\mathbf{U}_\Lambda \check{\psi})_\sigma(\mathbf{p}) = D_{\sigma\sigma'}(\Lambda) \check{\psi}_{\sigma'}(\Lambda^{-1}\mathbf{p})$. Denn es gilt

$$\mathbf{U}_\Lambda \Psi = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''} \int \tilde{d}\mathbf{p} \hat{\chi}_{\Lambda\mathbf{p},\sigma} D_{\sigma\sigma'}(\mathbf{W}(\Lambda, \mathbf{p})) D_{\sigma'\sigma''}^{-1}(\mathbf{L}_{\mathbf{p}}) \tilde{\psi}_{\sigma''}(\mathbf{p}) . \quad (9.81)$$

Das Produkt der Darstellungsmatrizen ist nach Definition der Wignerrotation gleich $\mathbf{D}(\mathbf{L}_{\Lambda\mathbf{p}}^{-1}) \mathbf{D}(\Lambda)$. Integrieren wir statt über \mathbf{p} über $\mathbf{p}' = \Lambda\mathbf{p}$, so ändert sich das Integrationsmaß nicht und wir erhalten, wenn wir zudem den Strich ' weglassen,

$$\mathbf{U}_\Lambda \Psi = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''} \int \tilde{d}\mathbf{p} \hat{\chi}_{\mathbf{p},\sigma} D_{\sigma\sigma'}(\mathbf{L}_{\mathbf{p}}^{-1}) D_{\sigma'\sigma''}(\Lambda) \tilde{\psi}_{\sigma''}(\Lambda^{-1}\mathbf{p}) , \quad (9.82)$$

woraus wir das Transformationsgesetz der Koeffizientenfunktion ablesen

$$(\mathbf{U}_\Lambda \check{\psi})_\sigma(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\Lambda) \check{\psi}_{\sigma'}(\Lambda^{-1}\mathbf{p}) . \quad (9.83)$$

Die Fouriertransformierte Koeffizientenfunktion

$$\check{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \check{\psi}_\sigma(\mathbf{p}) \quad (9.84)$$

transformiert folglich lokal, $(\mathbf{U}_\Lambda \check{\psi})_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\Lambda) \check{\psi}_{\sigma'}(\Lambda^{-1}\mathbf{x})$. Aber sie ist nicht die Ortswellenfunktion (9.38), sondern die Ortswellenfunktion ist die Fouriertransformierte der Impulswellenfunktion $\tilde{\psi}$

$$\psi_\sigma(\mathbf{t}, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \tilde{\psi}_\sigma(\mathbf{p}) = \int \tilde{d}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \sqrt{2p^0} D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{L}_\mathbf{p}) \check{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{p}) \quad (9.85)$$

also die Fouriertransformierte eines Produktes und demnach ein Faltungsintegral der lokal transformierenden Funktion $\check{\psi}$ mit der Fouriertransformierten der Funktion $\sqrt{2p^0} D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{L}_\mathbf{p})$.

Da Ortswellenfunktionen unter Lorentztransformationen nichtlokal transformieren, muß es sich bei Feldern mit einem Transformationsgesetz

$$\mathbf{T}_\Lambda \Phi_\alpha(\mathbf{x}) = D_{\alpha\beta}(\Lambda) \Phi_\beta(\Lambda^{-1}\mathbf{x}) \quad (9.86)$$

um etwas anderes handeln.

9.5 Zeitumkehr und Raumspiegelung

Die Zeitumkehr muß, wenn überhaupt, im Hilbertraum als antiunitäre Operation \mathbf{T} realisiert sein, wenn der Hamiltonoperator ein nach unten beschränktes und nach oben unbeschränktes Spektrum hat.

Wegen (9.24) gilt nämlich

$$\mathbf{T} \mathbf{U}_\alpha \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{U}_{\mathcal{T}\alpha}, \quad \mathbf{T} e^{-i\alpha \cdot \mathbf{P}} \mathbf{T}^{-1} = e^{\mathbf{T}(-i\alpha \cdot \mathbf{P})\mathbf{T}^{-1}} = e^{-i(\mathcal{T}\alpha) \cdot \mathbf{P}} = e^{-i\alpha \cdot (\mathcal{T}\mathbf{P})} \quad (9.87)$$

also

$$\mathbf{T}(i\mathbf{P}^0)\mathbf{T}^{-1} = -i\mathbf{P}^0, \quad \mathbf{T}(i\vec{\mathbf{P}})\mathbf{T}^{-1} = i\vec{\mathbf{P}}. \quad (9.88)$$

Falls nun \mathbf{T} linear wäre, würde $\mathbf{T}\mathbf{P}^0\mathbf{T}^{-1} = -\mathbf{P}^0$ folgen. Zu jedem Energieeigenzustand χ_E mit Energie E , $\mathbf{P}^0\chi_E = E\chi_E$, gäbe es dann den Zustand $\mathbf{T}\chi_E$ mit Energie $-E$.

$$\mathbf{P}^0(\mathbf{T}\chi_E) = -(\mathbf{T}\mathbf{P}^0\mathbf{T}^{-1})(\mathbf{T}\chi_E) = -\mathbf{T}\mathbf{P}^0\chi_E = -E(\mathbf{T}\chi_E) \quad (9.89)$$

Wenn das Energiespektrum nicht spiegelsymmetrisch zu Null ist, wie das in allen physikalisch akzeptablen Theorien der Fall ist, so ist \mathbf{T} antilinear

$$\mathbf{T}(c\Psi) = c^*(\mathbf{T}\Psi), \quad \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}. \quad (9.90)$$

und erfüllt in relativistischer Quantenmechanik

$$\mathbf{T}\mathbf{P}^0\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{P}^0, \quad \mathbf{T}\vec{\mathbf{P}}\mathbf{T}^{-1} = -\vec{\mathbf{P}}. \quad (9.91)$$

Die Zeitumkehr dreht also Impulse um und läßt Energien unverändert.

Wegen $\mathbf{U}_{\Lambda_1} \mathbf{U}_{\Lambda_2} = \mathbf{U}_{\Lambda_1 \Lambda_2}$ folgt $\mathbf{T} \mathbf{U}_{\Lambda} \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{U}_{\mathcal{T} \Lambda \mathcal{T}^{-1}}$ und damit das Transformationsverhalten der Erzeugenden M^{0i} und M^{ij} von drehungsfreien Lorentztransformationen und Drehungen. In beiden Fällen ist $\mathbf{U}_{\Lambda} = e^{\frac{i}{2} \omega_{mn} M^{mn}}$ wobei Λ die Matrix e^{ω} ist. Einerseits gilt $\mathcal{T} \Lambda \mathcal{T}^{-1} = e^{\mathcal{T} \omega \mathcal{T}^{-1}} = e^{(\omega^t)}$ mit $\omega_{0i}^t = -\omega_{0i}$ und $\omega_{ij}^t = \omega_{ij}$ und andererseits $\mathbf{T} e^{\frac{i}{2} \omega_{mn} M^{mn}} \mathbf{T}^{-1} = e^{\mathbf{T} \frac{i}{2} \omega_{mn} M^{mn} \mathbf{T}^{-1}} = e^{-\frac{i}{2} \omega_{mn} \mathbf{T} M^{mn} \mathbf{T}^{-1}}$, da \mathbf{T} antilinear ist, und folglich

$$\mathbf{T} M^{0i} \mathbf{T}^{-1} = M^{0i}, \quad \mathbf{T} M^{ij} \mathbf{T}^{-1} = -M^{ij}. \quad (9.92)$$

Es werden also Spins umgedreht, nicht aber Boostoperatoren. Daß die Geschwindigkeit von drehungsfreien Lorentztransformationen $L_{\vec{v}}$ umgedreht wird, folgt aus der Antilinearität von \mathbf{T} .

unvollständig

Anhang

$$\mathbf{A} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathbf{PV} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Um den Grenzwert $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon}$ zu untersuchen, wenden wir $\frac{1}{x+i\varepsilon} = \frac{x-i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$ auf eine reelle Testfunktionen $t(x)$ an.

Der Imaginärteil wird durch Variablensubstitution identifiziert.

$$\int dx t(x) \frac{-\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = - \int \frac{dx}{\varepsilon} t\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \frac{1}{1 + \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2} = -\text{sign}(\varepsilon) \int dx t(\varepsilon x) \frac{1}{1 + x^2}$$

Bei stetigen, beschränkten Testfunktionen $t(x)$ strebt dies für $\varepsilon \rightarrow 0+$ gegen

$$-t(0) \int \frac{dx}{1+x^2} = -\pi t(0) = - \int dx t(x) \pi\delta(x) . \quad (\text{A.1})$$

Der Realteil $\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}$ ist eine ungerade Funktion von x . Auf eine Testfunktion $t(x)$ angewendet, die für große x genügend schnell abfällt, trägt daher nur deren ungerader Anteil $x\hat{t}(x)$ bei.

$$t(x) - t(-x) = 2x \hat{t}(x) \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \int dx t(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} &= \int dx \frac{1}{2} \frac{xt(x) - xt(-x)}{x^2 + \varepsilon^2} = \int dx \frac{\frac{x^2}{\varepsilon^2}}{1 + \frac{x^2}{\varepsilon^2}} \hat{t}(x) \\ &= \int dx \hat{t}(x) - |\varepsilon| \int d\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \frac{1}{1 + \frac{x^2}{\varepsilon^2}} \hat{t}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \\ &= \int dx \hat{t}(x) - |\varepsilon| \int dx \frac{\hat{t}(\varepsilon x)}{1 + x^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int dx \hat{t}(x) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Für differenzierbare Testfunktionen t ist \hat{t} stetig ergänzbar bei $x = 0$ und hat dort den Wert $\frac{dt}{dx}$. Das Integral über \hat{t} ist der Hauptwert (principal value) $\mathbf{PV} \frac{1}{x}$ integriert mit einer Testfunktion $t(x)$.

$$\int dx \frac{1}{2} \frac{t(x) - t(-x)}{x} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} dx \frac{t(x)}{x} + \int_{+\varepsilon}^{\infty} dx \frac{t(x)}{x} \right) = \int dx \frac{t(x)}{x} \quad (\text{A.4})$$

Damit ist die Behauptung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathbf{PV} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (\text{A.5})$$

gezeigt.

$$\mathbf{B} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x)$$

Das Integral mit einer Testfunktion $f(x)$ schreibt sich als

$$\int dx f(x) \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \int t dx f\left(\frac{tx}{t}\right) \frac{\sin^2 tx}{(tx)^2} = \int dx f\left(\frac{x}{t}\right) \frac{\sin^2 x}{x^2} \quad (\text{B.1})$$

und strebt, falls f eine stetige, beschränkte Testfunktion ist, für $t \rightarrow \infty$ gegen

$$f(0) \int dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = f(0)\pi . \quad (\text{B.2})$$

Es ist also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x) . \quad (\text{B.3})$$

C Bemerkung zur Fouriertransformation

Fouriertransformation bildet quadratintegrale Funktionen ψ unitär auf quadratintegrale Funktionen $\tilde{\psi}$ ab

$$\tilde{\psi}(x) = \int \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{ixy} \psi(y), \quad \psi(x) = \int \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-ixy} \tilde{\psi}(y), \quad (\text{C.1})$$

denn das Skalarprodukt

$$\int dx \tilde{\phi}^*(x) \tilde{\psi}(x) = \int dy dy' \frac{dx}{2\pi} e^{-ixy} e^{ixy'} \phi^*(y) \psi(y') \quad (\text{C.2})$$

stimmt wegen (3.49) mit dem ursprünglichen Skalarprodukt $\int dy \phi^*(y) \psi(y)$ überein.

Wegen $\tilde{\tilde{f}}(x) = f(-x)$ führt vierfach hintereinander ausgeführte Fouriertransformation zur Ausgangsfunktion f zurück. Da die Fouriertransformation unitär ist, kann sie nur Eigenwerte λ vom Betrag 1 haben, die zudem $\lambda^4 = 1$ erfüllen. Die möglichen Eigenwerte sind also $\pm 1, \pm i$. Zerlegt man eine Funktion in $f = g + u$ in einen geraden $g(x) = g(-x)$ und einen ungeraden $u(x) = -u(-x)$ Anteil, so kann man f als Summe von vier Eigenanteilen unter Fouriertransformation mit den Eigenwerten $\pm 1, \pm i$ schreiben: $g = 1/2(g + \tilde{g}) + 1/2(g - \tilde{g})$ und $u = 1/2(u - i\tilde{u}) + 1/2(u + i\tilde{u})$.

Daß Fouriertransformation eine Funktion wie die Gaußfunktion wieder auf sich abbildet, ist also nicht außergewöhnlich.

D Ableitung der Determinante

Die Determinante einer Matrix M ist eine polynomiale Funktion der Matrixelemente M^i_j . Aus ihrer Definition

$$\det M = \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} M^{i_1}_1 M^{i_2}_2 \dots M^{i_n}_n \quad (\text{D.1})$$

folgt durch Differenzieren

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j} = \varepsilon_{i_1, \dots, i_{j-1}, i, i_{j+1}, \dots, i_n} M^{i_1}_1 \dots M^{i_{j-1}}_{j-1} M^{i_{j+1}}_{j+1} \dots M^{i_n}_n . \quad (\text{D.2})$$

Multipliziert man das Ergebnis mit M^i_l und summiert über i , so erhält man wieder die Determinante, wenn $l = j$ ist. Im anderen Fall $l \neq j$ erhält man Null, weil in der Summe mit dem ε -Tensor schon $M^{i_l}_l$ steht und ε total antisymmetrisch ist. Damit ist die Ableitung $\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j}$ identifiziert.

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j} = \det M (M^{-1})^j_i \quad (\text{D.3})$$

Die Ableitung der Determinante einer einparametrischen Schar von Matrizen $M(\alpha)$ ist daher nach Kettenregel

$$\partial_\alpha \det M(\alpha) = \det M (M^{-1})^j_i \partial_\alpha M^i_j . \quad (\text{D.4})$$

Ist für $\alpha = 0$ die Matrix $M(0) = \mathbb{1}$, so ist dort die Ableitung der Determinante die Spur der abgeleiteten Matrix $\partial_\alpha M|_{\alpha=0}$

$$\partial_\alpha \det M|_{\alpha=0} = 1 \cdot \delta^i_j \partial_\alpha M^i_j|_{\alpha=0} = \partial_\alpha M^i_i|_{\alpha=0} = \text{tr} \partial_\alpha M|_{\alpha=0} \quad (\text{D.5})$$

E Der Propagator

unvollständig

Literaturverzeichnis

- [1] A. Galindo and P. Pascual, Quantum Mechanics I and II, Springer Verlag, Heidelberg, 1990
- [2] M. Reed and B. Simon, Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978
- [3] John S. Bell, On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, Physics 1 (1964) 195
John S. Bell, Speakable and unspeakable in quantum mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1987
- [4] Alain Aspect, Jean Dalibard and Gérard Roger, Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1804 – 1807
- [5] Steven Weinberg, The Quantum Theory of Fields Volume 1, Cambridge University Press, Cambridge, 1995
- [6] Norbert Dragon, Geometrie der Relativitätstheorie,
<http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon>

