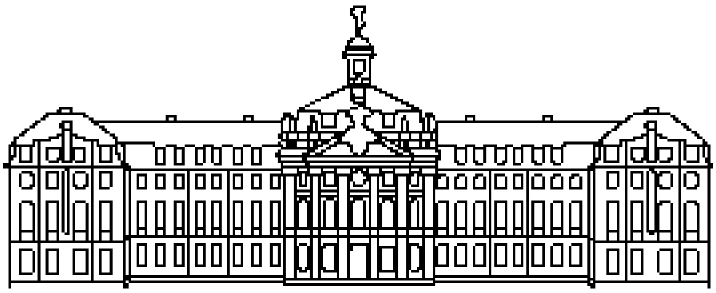
QUANTENTHEORIE

Vorlesung

WS 81/82
WS 84/85
WS 90/91
WS 97/98

M. STINGL
Institut für Theoretische Physik I



Westfälische Wilhelms-Universität
Münster

LaTeX-Edition
von
Christian Dolle
und
Jörg Lehmann

Inhaltsverzeichnis

I

Wellenmechanische Einführung

Kapitel 1

Die Wellenfunktion und ihr statistischer Aspekt

1.1 Grenzen der klassischen Mechanik

Die Newtonsche klassische Mechanik betrachtet Systeme von als Massenpunkte idealisierten Teilchen mit Massen m_i $(i = 1 \ldots N)$ und stützt sich für die Beschreibung ihrer Bewegung auf zwei grundlegende Postulate:

(a) Zu jedem beliebigen Anfangszeitpunkt t_0 können sämtliche Ortsvektoren $\vec{r}_i$ der Teilchen bezüglich eines vereinbarten Bezugssystems und *zugleich* sämtliche Impulse $\vec{p}_i$ bezüglich dieses Systems, d.h. der Wertesatz

$$\{\vec{r}_i(t_0), \vec{p}_i(t_0) \mid i = 1 \ldots N\} \tag{1.1}$$

gemessen werden, und zwar im Prinzip beliebig genau, d.h. mit Fehlern, deren Verringerung nur eine Frage verfeinerter Meßtechnik ist.

(b) Bei Kenntnis des Kraftgesetzes für die auf jedes der N Teilchen wirkende Kraft, $\vec{F}_i = \vec{F}_i(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_N, \vec{p}_1 \ldots \vec{p}_N)$, ist die Bewegung des Systems bezüglich eines Inertialsystems für Zeiten $t > t_0$ durch Lösung der Differentialgleichungen

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{F}_i(\vec{r}_1 \ldots \vec{p}_N), \quad m_i \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{p}_i \tag{1.2}$$

mit den Anfangswerten (1.1) eindeutig vorausberechenbar.

Während dieses Konzept bei der Beschreibung makroskopischer Körper höchst erfolgreich war, wurden im atomaren Bereich, d.h. in Dimensionen $\leq 10^{-10}m$, seit dem Ausgang des 19. Jahrhunderts zunehmend experimentelle Tatsachen bekannt, die mit dieser Mechanik nicht oder nur durch künstlich aufgepfropfte Zusatzannahmen zu erklären sind. Ihre Deutung erfordert eine andersartige Mechanik, die aus der klassischen in keiner Weise „ableitbar" ist, sie jedoch nach wie vor als Grenzfall für makroskopische Körper enthalten muß („Korrespondenzprinzip"). Diese sogenannte *Quantenmechanik* kann für den nichtrelativistischen

Bereich heute als abgeschlossene Theorie gelten und beschreibt in diesem Bereich Struktur und Wechselwirkungen von Atomen, Molekülen und kondensierter Materie quantitativ zutreffend. Obwohl sie ursprünglich für den mikroskopischen Bereich entwickelt wurde, sind heute sehr wohl auch „makroskopische Quantenphänomene“ bekannt, die nur durch sie korrekt zu erklären sind, wie Ferromagnetismus, Supraleitung oder Laseremission.

Aus der Vielzahl von die Grenzen der klassischen Mechanik verdeutlichenden Experimenten greifen wir – *höchst einseitig und von der komplizierten historischen Entwicklung völlig absehend* – ein einziges heraus, an dem sich wesentliche Begriffsbildungen der „neuen“ Mechanik heuristisch entwickeln lassen.

1.2 Beugung von Materiewellen

Ein monoenergetischer Elektronenstrahl trete durch eine räumlich periodische Struktur sehr kleiner Gitterkonstante a (z.B. das Kristallgitter eines Einkristallplättchens) hindurch; die durchgegangenen und teilweise abgelenkten Teilchen werden in einer makroskopisch entfernten Nachweisebene mit einem Zähler registriert. Man findet:

(a) Die mit dem Zähler ermittelte Häufigkeitsverteilung der Auftreffpunkte in der Nachweisebene stellt ein *typisches Beugungsbild* mit Intensitätsmaxima und -minima dar, genau wie bei der Beugung von Licht an einem Gitter[1]. Die einzige bekannte Erklärung ist die der Optik: von verschiedenen Elementarzellen des Kristallgitters ausgehende Wellenzüge interferieren in der Nachweisebene je nach Gangunterschied abwechselnd konstruktiv und destruktiv. Die Bewegung der Korpuskeln scheint also – vorläufig bewußt vage ausgedrückt – von einem interferenzfähigen Wellenvorgang, von „Materiewellen“, begleitet zu sein.

(b) Im Zähler sind andererseits bei genügender Zeitauflösung die auftreffenden Elektronen nach wie vor als zeitlich und räumlich scharf lokalisierte Impulse („Klick“ im Zähler) nachweisbar. Spektroskopiert man sie genauer, so erweist sich sich jeder Impuls als von einem Teilchen mit der vollen physikalischen Elektronenladung und -masse herrührend; es treten nirgends Bruchstücke von Elektronenladungen auf. Die Zuordnung des Materiewellenvorgangs zu den Teilchen kann also *nicht* naiv bedeuten, daß ihre Ladung und Masse über den ganzen von der Welle überstrichenen Raum „verschmiert“ werden. Vielmehr zeigen sie beim Durchgang durch die beugende Struktur Wellen-, beim Auftreffen auf den Zähler die gewohnten Teilcheneigenschaften.

    Dieses Verhalten („Welle-Korpuskel-Dualismus“) erweist sich als keineswegs an spezielle Kristallgitter gebunden und außer für Elektronen auch für andere

[1] Praktisch wird ein derartiges Experiment wegen der starken Absorption der Elektronen in Materie besser mit reflektierten als mit transmittierten Strahlen durchgeführt; für die Richtungen konstruktiver Interferenz gilt dann die bekannten Braggsche Bedingung.

subatomare Teilchen, aber auch für ganze Atome und Moleküle nachweisbar, scheint also eine *allgemeine Eigenschaft* atomarer Systeme zu sein.

(c) Um den Einwand zu überprüfen, jenes Verhalten rühre vielleicht von einer speziellen, noch unbekannten Wechselwirkung zwischen den Elektronen im Strahl her, kann man die Strahlintensität so weit herabsetzen, bis jeweils nur noch wenige Elektronen zwischen Quelle und Nachweisebene unterwegs, d.h. keine Wechselwirkungen mehr möglich sind. Dann scheinen die seltenen Zählereignisse bei Betrachtung kurzer Zeiträume zunächst regellos über die Ebene verteilt zu sein. Bei Beobachtung über lange Zeiträume, d.h. faktisch *bei oftmaliger Wiederholung des Beugungsexperimentes mit einem einzelnen Elektron unter identischen Ausgangsbedingungen*, erscheint jedoch als Häufigkeitsverteilung der Zählereignisse in der Nachweisebene nach wie vor das Beugungsbild.

Die Materiewelle ist also einerseits etwas nicht erst dem Strahl, sondern bereits dem einzelnen Elektron Zuzuordnendes. Andererseits legt das Experiment eine *statistische Deutung* dieses Wellenvorgangs nahe: Seine Funktion scheint darin zu bestehen, daß er eine *Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsverteilung* $P = P(\vec{r}, t)$ für das Teilchen erzeugt derart, daß für ein Volumenelement $d^3x = dx\, dy\, dz$ um den Ort $\vec{r} = (x, y, z)$ herum die Größe

$$dw = P(\vec{r}, t)\; d^3x \tag{1.3}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, das Teilchen zum Zeitpunkt t dort anzutreffen bzw. nachzuweisen. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung setzt sich dann bei oftmaliger Wiederholung des Experiments mit immer gleich präpariertem Elektron in eine *Häufigkeitsverteilung* der positiv verlaufenen Nachweisakte um.

(d) Die Wellenlänge λ oder besser Wellenzahl $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ des die Elektronenbewegung begleitenden Wellenvorganges für verschiedene Elektronenimpulse p ist bei bekannter Gitterkonstante a durch Ausmessen des Beugungsbildes bestimmbar. Man findet die *„de-Broglie-Relation"*

$$p = \hbar \cdot k \tag{1.4}$$

mit einer neuen fundamentalen Naturkonstanten der Dimension Energie $\times$ Zeit = Wirkung, dem *„Wirkungsquantum"*,

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} Joule \cdot sec = 6.582 \cdot 10^{-16} eV \cdot sec. \tag{1.5}$$

Bemerkenswert ist nun, daß diese Konstante historisch schon früher aufgetreten war beim Studium eines „umgekehrten" Phänomens beim Licht: Lichtwellen, nach der klassischen Theorie ein elektromagnetischer Wellenvorgang, zeigten bei gewissen Experimenten – insbesondere Photo- und Comptoneffekt – eindeutig Teilcheneigenschaften, und für die Energie E der einer Lichtwelle mit Frequenz ν (bzw. Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$) zuzuordnenden Teilchensorte („Lichtquanten“ oder Photonen) ergab sich die *Planck-Einsteinsche Beziehung*

$$E = \hbar \cdot \omega \tag{1.6}$$

mit demselben $\hbar$ wie bei Gleichung (1.4) für die Materiewellen. Licht und Materieteilchen scheinen sich also hinsichtlich des Welle-Teilchen-Aspekts ganz ähnlich zu verhalten, so daß die Vermutung nahe liegt, daß jede der beiden Beziehungen (1.4/1.6) jeweils auch für die „andere Seite“ gültig ist. Hervorzuheben an ihnen ist, daß sie jeweils eine typische Welleneigenschaft (ω oder k) mit einer Teilcheneigenschaft (E oder p) quantitativ verknüpfen.

1.3 Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude

Zur Erklärung der neuen Situation werden wir – zunächst bewußt rein heuristisch vorgehend – der Bewegung eines Elektrons ein räumlich und zeitlich veränderliches Wellenfeld oder eine „Wellenfunktion“

$$\psi = \psi(x, y, z, t) = \psi(\vec{r}, t) \tag{1.7}$$

zuordnen, deren genaue Bedeutung noch herauszuarbeiten ist, von der wir aber jedenfalls folgendes verlangen:

(a) Damit Interferenzeffekte möglich sind, muß für ψ das *Superpositionsprinzip* gelten: sind $\psi_1(\vec{r}, t)$ und $\psi_2(\vec{r}, t)$ mögliche Wellenfelder, so muß auch

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \tag{1.8}$$

mit beliebigen Konstanten c_1, c_2 ein physikalisch zulässiges Wellenfeld sein. Diese Forderung schränkt u.a. den Kreis der möglichen Bewegungsgleichungen für $\psi(\vec{r}, t)$ von vornherein stark ein: Eine derartige *Wellengleichung muß jedenfalls linear in ψ und seinen Ableitungen* sein, weil nur dann jede Linearkombination von Lösungen wieder eine Lösung ergibt.

(b) Durch $\psi(\vec{r}, t)$ soll eine Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\vec{r}, t)$ im Sinne von (1.3) festgelegt sein derart, daß dort, wo ψ betragsmäßig „groß“ ist, auch P „groß“ wird und umgekehrt, d.h.

$$P(\vec{r}, t) = \text{monoton wachsendes Funktional von } |\psi(\vec{r}, t)|\,. \tag{1.9}$$

Als Wahrscheinlichkeit muß die Größe (1.3) für jedes Volumenelement eine nichtnegative relle Zahl zwischen den Werten 0 ($\hat{=}$ Teilchen mit Gewißheit *nicht* dort anzutreffen) und 1 ($\hat{=}$ Teilchen mit Sicherheit dort anzutreffen), d.h. $P(\vec{r}, t)$ *positiv semidefinit* sein:

$$P(\vec{r}, t) \geq 0 \quad \text{für alle } \vec{r}, t\,. \tag{1.10}$$

Außerdem muß (1.3) bei Integration über den gesamten Raum – d.h. Bildung der Gesamtwahrscheinlichkeit, das Teilchen überhaupt irgendwo anzutreffen – offenbar zu jedem Zeitpunkt 1 ergeben. Diese fundamentale, aus unserer statistischen Auffassung von ψ direkt folgende Forderung der *„Normierung der Gesamtwahrscheinlichkeit"*,

$$\int d^3x \; P(\vec{r}, t) = 1 \quad \text{für alle } t, \tag{1.11}$$

schränkt ebenfalls die möglichen Bewegungsgleichungen ein und stellt zugleich eine wesentliche *Randbedingung* dar, die zu jeder derartigen Gleichung hinzutritt.

Da die Gleichungen (1.9) - (1.11) die Form des Funktionals $P = P[\,|\psi|\,]$ noch nicht eindeutig festlegen, können wir unsere statistische Deutung nur komplettieren durch einen weiteren *heuristischen Schritt*: Wir identifizieren (nach dem Vorgang von M. Born, 1927) die Größe $P(\vec{r}, t)$ mit dem einfachsten, nämlich bilinearen Ausdruck

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^* \psi \; , \tag{1.12}$$

der (1.9/1.10) erfüllt, wobei die letztere Schreibweise sich darauf bezieht, daß wir für ψ evtl. komplexwertige Funktionen werden zulassen müssen. Mit diesem Ansatz ergibt sich einerseits für die zur Superposition (1.8) gehörige Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$|\psi|^2 = |c_1\psi_1|^2 + |c_2\psi_2|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,(c_1^*\psi_1^* c_2 \psi_2) \tag{1.13}$$

und hier kann der letzte Term, je nach der relativen Phase der beiden Summanden, tatsächlich konstruktive oder destruktive Interferenz bewirken. Andererseits können wir durch die *Normierungsbedingung für die Wellenfunktion*,

$$\int d^3x \; \psi^*(\vec{r}, t)\, \psi(\vec{r}, t) = 1 \quad \text{für alle } t \; , \tag{1.14}$$

die Forderung (1.11) erfüllen.

Natürlich ist bei (1.12) eine formale Analogie zum bilinearen oder quadratischen Zusammenhang zwischen Intensität und Feldgrößen bei klassischen, etwa elektromagnetischen Feldern unverkennbar. Sie darf aber nicht über den fundamentalen Unterschied hinwegtäuschen, daß $\psi(\vec{r}, t)$ im Gegensatz etwa zu klassischen Feldstärken nicht selbst eine meßbare Größe, sondern eine „Wahrscheinlichkeitsamplitude" darstellt: Meßbar ist die in ψ bilineare Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte (1.12) in dem Sinne, daß sie die bei häufiger Wiederholung einer Ortsmessung am stets gleich präparierten Elektron resultierende Häufigkeitsverteilung der Teilchenorte angibt.

Anmerkung:

Die Bedingung der „Quadratintegrabilität", Gl. (1.14), ergibt *für einen einzelnen*

Zeitpunkt t zunächst nur relativ schwache mathematische Einschränkungen des Verhaltens von ψ. Insbesondere erlaubt sie allein, streng genommen, noch nicht den Schluß, daß $|\psi|$ für $|\vec{r}\,| \to \infty$ asymptotisch abfallen muß (man kann etwa Beispiele von Funktionen konstruieren, die für $|\vec{r}\,| \to \infty$ eine Folge immer schmaler und höher werdender Maxima aufweisen derart, daß die Summe der Beiträge zu $\int d^3x\,|\psi|^2$ noch konvergiert). Wir werden jedoch in Abschnitt 4.1 zeigen, daß die Gültigkeit von Gl. (1.14) *für alle* t – d.h. nicht nur die Existenz, sondern auch die zeitliche Konstanz der Norm – zu der Bedingung von Gl. (4.12) führt, die in der Tat ein hinreichend rasches asymptotisches Abfallen von ψ für $|\vec{r}\,| \to \infty$ erfordert. Die in der Literatur verbreitete Formulierung, daß „wegen der Normierbarkeit ψ asymptotisch abfallen muß“, verwenden wir daher im Folgenden stets mit dem Vorbehalt, daß es eigentlich „wegen der Normierbarkeit und ihrer zeitlichen Erhaltung“ heißen muß.

1.4 Erwartungswerte und Schwankungen

Ohne die Wellenfunktion $\psi(\vec{r},t)$ für konkrete Situationen schon zu kennen, können wir aus der statistischen Interpretation bereits jetzt einige wesentliche quantenmechanische Begriffsbildungen ableiten. Wenn $|\psi|^2$ die Häufigkeitsverteilung der bei Ortsmessung resultierenden Teilchenorte darstellt, dann ist eine Grobcharakterisierung dieser Verteilung offenbar durch den arithmetischen Mittelwert der Meßwerte gegeben. Er ist nach den Regeln der Statistik zu berechnen als Summe über die möglichen Meßwerte – das sind hier *alle* Orte $\vec{r}$ – mit deren Häufigkeiten bzw. Wahrscheinlichkeiten als Gewichten, normiert durch Division mit der Gesamtzahl der Messungen (= Summe aller Häufigkeiten), in unserem Falle also:

$$\langle \vec{r}\,\rangle_t = \frac{\displaystyle\int d^3x\; \vec{r}\; |\psi(\vec{r},t)|^2}{\displaystyle\int d^3x\; |\psi(\vec{r},t)|^2} \; . \tag{1.15}$$

Da unser ψ voraussetzungsgemäß nach (1.14) normiert ist, erhalten wir den in der Quantenmechanik als *Erwartungswert des Teilchenortes* bezeichneten Vektor:

$$\langle \vec{r}\,\rangle_t = \int d^3x\; \psi^*(\vec{r},t)\, \vec{r}\, \psi(\vec{r},t) \; , \tag{1.16}$$

der natürlich noch von t abhängt – der mittlere Teilchenort kann mit der Zeit „wandern“.

Nach demselben Schema können wir Erwartungswerte, d.h. Mittelwerte im Sinne der Häufigkeitsverteilung, berechnen für andere *Meßgrößen, die sich allein als Funktion des Ortes* $F(\vec{r}\,) = F(x,y,z)$ ausdrücken lassen:

$$\langle F(\vec{r}\,)\rangle_t = \int d^3x\; \psi^*(\vec{r},t)\, F(\vec{r}\,)\, \psi(\vec{r},t) \; . \tag{1.17}$$

So würden wir z.B. mit $F(\vec{r}) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ den statistischen Erwartungswert des Abstandes des Teilchens vom Koordinatenursprung erhalten.

Als gröbste Charakterisierung der Meßwerteverteilung gibt der Erwartungswert noch keine Auskunft darüber, wie gut die Meßwerte etwa der drei Komponenten x_i von $\vec{r}$ um ihre Mittelwerte $\langle x_i \rangle$ herum konzentriert sind oder wie stark sie um diese Mittelwerte herum „streuen“. Ein Maß dafür erhält man nach den Regeln der Statistik, indem man die *quadratische Schwankung* $(\Delta x_i)^2$, d.h. die wiederum mit $|\psi|^2$ als Gewichtsfunktion gemittelte quadratische Abweichung der Meßwerte von ihrem eigenen Mittelwert, berechnet:

$$\begin{aligned} (\Delta x_i)^2 &= \left\langle (x_i - \langle x_i \rangle_t)^2 \right\rangle_t && \text{(1.18a)} \\ &= \int d^3x \, |\psi(\vec{r},t)|^2 \left\{ x_i^2 + \langle x_i \rangle_t^2 - 2 \langle x_i \rangle_t x_i \right\} \\ &= \int d^3x \, x_i^2 \, |\psi|^2 + \langle x_i \rangle_t^2 \underbrace{\int d^3x \, |\psi|^2}_{1} - 2 \langle x_i \rangle_t \cdot \underbrace{\int d^3x \, x_i \, |\psi|^2}_{\langle x_i \rangle_t} \\ &= \langle x_i^2 \rangle_t - (\langle x_i \rangle_t)^2 \, . && \text{(1.18b)} \end{aligned}$$

Als pauschales Maß für die dreidimensionale Ortsunschärfe kann man dann z.B.

$$(\Delta \vec{r})^2 = (\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2 + (\Delta x_3)^2 \qquad (1.19)$$

benutzen. Auch hier ergibt sich sofort die Verallgemeinerung auf nur von $\vec{r}$ abhängige Meßgrößen $F(\vec{r})$

$$[\Delta F(\vec{r})]_t^2 = \langle [F(\vec{r})]^2 \rangle_t - (\langle F(\vec{r}) \rangle_t)^2 \; . \qquad (1.20)$$

Zwei Anmerkungen:

(a) Damit Größen wie $\langle x_i \rangle$ oder $\langle x_i^2 \rangle$ existieren, d.h. die entsprechenden über den ganzen Raum erstreckten Integrale konvergieren, muß wegen der zusätzlichen x_i-Potenzen $|\psi(\vec{r},t)|$ für $|\vec{r}| \to \infty$ noch etwas rascher abfallen, als es für die Existenz und Erhaltung des Normierungsintegrals (1.14) allein notwendig wäre. Die statistische Interpretation bringt also in Verbindung mit verschiedenartigen Meßgrößen hier zusätzliche Einschränkungen des Raumes der physikalisch sinnvollen Wellenfunktionen hervor.

(b) Die obigen Begriffsbildungen dürfen nicht zu dem Mißverständnis verleiten, die Quantenmechanik laufe einfach auf eine Kopie der klassischen Wahrscheinlichkeitsrechnung hinaus. Die Wahrscheinlichkeitsrechnung befaßt sich nur mit Meßgrößen vom Typ unseres $P = P(\vec{r},t)$ allein; sie kennt normalerweise keine diesem P zugrunde liegende interferenzfähige Amplitude ψ. Deshalb kennt sie z.B. zwar eine Addition von Wahrscheinlichkeiten (nämlich für „unabhängige“, d.h. durchschnittsfreie Ereignismengen), aber keine Vorschriften vom Typ (1.13) mit den für die Quantenmechanik typischen Interferenztermen.

Kapitel 2

Kräftefreies Teilchen und Impulsdarstellung

2.1 Wellenpakete und Unschärferelation

Wir wollen nun Wellenfunktionen ψ für konkrete Situationen heuristisch konstruieren und beginnen mit dem einfachsten Fall eines kräftefreien Teilchens. Nach der klassischen Mechanik würde es auf gerader Bahn $\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \vec{v} \cdot t$ mit konstantem Impuls $\vec{p} = m\vec{v}$ laufen. Mathematische Ausdrücke für einfache Wellentypen sind aus Elektrodynamik und Kontinuumsmechanik geläufig; unter ihnen bieten sich zunächst harmonische ebene Wellen

$$const. \times \left\{ \begin{array}{c} \sin \\ \cos \end{array} \right\} (\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(k) \cdot t) \tag{2.1}$$

an, da sie eine einzige wohldefinierte *Wellenzahl* $k = |\vec{k}|$ und eine wohldefinierte *Fortschreitungsrichtung* $\hat{k} = \frac{\vec{k}}{k}$ besitzen, die sich dem grundlegenden empirischen Befund (1.4) bzw. der klassischen Impulsrichtung $\hat{p} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$ anpassen lassen durch die Wahl

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \,. \tag{2.2}$$

Um die Zeitabhängigkeit vollständig festzulegen, hat man überdies ω als Funktion von $\vec{k}$, d.h. das „*Dispersionsgesetz*" der Materiewellen, zu spezifizieren. Dazu verhilft uns die schon angesprochene Vermutung, daß die Planck-Einstein-Relation (1.6) auch für Teilchen mit Ruhemasse gilt: Die dort linker Hand stehende Energie des Teilchens ist ja im kräftefreien Fall einfach die kinetische, $E_{kin} = p^2/2m$, d.h. wir setzten unter Verwendung von (2.2)

$$\hbar\omega(k) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.3}$$

an. Diese quadratische $\omega(k)$-Abhängigkeit, die von der quadratischen $|\vec{p}|$-Abhängigkeit der nichtrelativistischen kinetischen Energie herrührt, steht im Gegensatz etwa zum linearen Dispersionsgesetz $\omega = c \cdot k$ der elektromagnetischen Wellen im Vakuum.

In komplexer Schreibweise werden wir also dem kräftefreien Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ versuchsweise das Wellenfeld

$$\psi(\vec{r},t) = const. \times e^{i[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)t]}, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{2.4a}$$

$$= const. \times e^{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}\cdot\vec{r}-E(p)t]}, \quad E(p) = \frac{p^2}{2m} \tag{2.4b}$$

zuordnen, wobei noch offen ist, ob wir nur Real- oder Imaginärteil dieses Ausdrucks oder die komplexe Funktion als Ganzes benötigen werden.

Dieser Ausdruck wirft aber sofort das Problem auf, daß er offensichtlich

$$P(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = const.\,, \tag{2.5}$$

also eine homogen über den ganzen Raum verteilte Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Folge hat, während die Erfahrung zeigt, daß sich das Elektron räumlich relativ scharf *lokalisieren* läßt, nämlich z.B. im Zählervolumen beim Nachweisakt. Dem müßte ein $|\psi|$ und damit P entsprechen, das nur in einem begrenzten Raumgebiet wesentlich von Null verschieden, außerhalb aber „klein" ist. Mathematisch entspricht dem die Beobachtung, daß die fundamentale Normierungsforderung (1.14) für die Gesamtwahrscheinlichkeit mit (2.4) gar nicht zu erfüllen ist – wegen (2.5) ist das Normierungsintegral divergent!

Den Ausweg weist das Superpositionsprinzip: Mit (2.4) ist ja als Wellenfunktion des kräftefreien Teilchens auch jede Summe von Ausdrücken (2.4) mit verschiedenen $\vec{k}$ oder $\vec{p}$ und schließlich sogar eine kontinuierliche Überlagerung aller $\vec{k}$-Werte mit einer gewissen Gewichtsfunktion zulässig. Wir schreiben sie (mit konventionsbedingten Vorfaktoren) in einer der beiden äquivalenten Formen

$$\psi(\vec{r},t) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3k\, g(\vec{k})\; e^{i[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)\cdot t]} \tag{2.6a}$$

$$= (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p\, \varphi_0(\vec{p})\; e^{i[\vec{p}\cdot\vec{r}-E(p)\cdot t]} \tag{2.6b}$$

$$\text{mit} \quad \varphi_0(\hbar\vec{k}) = \hbar^{-\frac{3}{2}}\, g(\vec{k})\,. \tag{2.6c}$$

Ein solches *„Wellenpaket"* ist für festes t mathematisch gesehen ein Fourierintegral bezüglich $\vec{k}$ (mit der Gewichtsfunktion oder Fourieramplitude $(2\pi)^{-\frac{3}{2}}g(\vec{k})e^{-i\omega(k)t}$), und solche Fourierintegrale können, wie aus der klassischen Wellenphysik bekannt, tatsächlich *räumlich lokalisierte Wellenzüge* beschreiben, obwohl wir die Normierbarkeit im Sinne von (1.14) natürlich noch nachprüfen müssen.

Dafür ist aber dem kräftefreien Teilchen nun zwangsläufig nicht mehr ein einziger wohlbestimmter Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, sondern nach Maßgabe der Gewichtsfunktion $g(\vec{k})$ bzw. $\varphi_0(\vec{p})$ ein ganzes *„Impulsspektrum"* zugeordnet: Man hat die räumliche Lokalisierbarkeit des Teilchens mit einem Unschärferwerden seines Impulses erkauft! Ein quantitativer Ausdruck für dieses „Dilemma" ist ebenfalls schon von den klassischen Anwendungen der Fourierintegrale her geläufig: Wenn das Fourierintegral (2.6) einen in der Koordinate x_i ($i = 1,2,3$) auf die ungefähre Breite

Δx_i lokalisierten Wellenzug darstellen soll (eine präzise, von der speziellen Paketform unabhängige Definition von Δx_i können wir etwa mittels der Schwankung (1.18) geben), dann muß die Fourieramplitude $g(\vec{k})$ in der Impulskomponente k_j $(j = 1, 2, 3)$ über einen Bereich Δk_j ausgedehnt sein, für den die Abschätzung

$$\Delta k_j \gtrapprox \frac{\delta_{ij}}{\Delta x_i} \quad (i, j = 1, 2, 3) \tag{2.7}$$

gilt (δ_{ij} = Kroneckersymbol). Für unseren Fall gibt das wegen (2.2) die *Unschärferelation* (Heisenberg 1927)

$$\Delta x_i \cdot \Delta p_j \gtrapprox \hbar\, \delta_{ij} \ . \tag{2.8}$$

Sie stellt für $i = j$ die Unmöglichkeit fest, Ortskoordinate und Impulskomponente eines Teilchens in *derselben* Raumrichtung *gleichzeitig* beliebig genau anzugeben. Wir werden sie in Kapitel 7 – in einer durch genauere Definition von Δp_j präzisierten Fassung – als über den kräftefreien Fall hinaus *allgemein gültige Konsequenz der Theorie* erkennen.

Die Beschreibung des lokalisierten kräftefreien Teilchens in der Quantenmechanik – d.h. durch Wellenfunktionen mit Wahrscheinlichkeitsinterpretation – erweist sich damit als möglich, aber um den Preis der teilweisen Aufgabe von an der klassischen Mechanik ausgebildeten Denkgewohnheiten.

2.2 Die Wellenfunktion im Impulsraum

Wir können (2.6) als Spezialfall der Fouriertransformation

$$\psi(\vec{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p\, \varphi(\vec{p}, t)\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \tag{2.9}$$

betrachten, wobei die zeitabhängige Fourieramplitude $\varphi(\vec{p}, t)$ hier im Sonderfall des kräftefreien Teilchens die Form

$$\varphi(\vec{p}, t) = \varphi_0(\vec{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}E(p)t} \tag{2.10}$$

mit faktorisierender, harmonischer Zeitabhängigkeit hat. Nach dem Fourierschen Integraltheorem läßt sich für quadratintegrables ψ im Sinne von (1.14) diese Transformation sofort umkehren,

$$\varphi(\vec{p}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int d^3r\, \psi(\vec{r}, t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{r}\cdot\vec{p}} \ . \tag{2.11}$$

Es bestimmen also $\psi(\vec{r}, t)$ *und* $\varphi(\vec{p}, t)$ *einander umkehrbar eindeutig*, so daß $\varphi(\vec{p}, t)$ die gesamte in der Wellenfunktion enthaltene Information ebenfalls enthält. Seine Interpretation wird durch folgende Beobachtungen nahegelegt:

(a) Berechnen wir das Normierungsintegral (1.14) durch Einsetzen von (2.6) und Vertauschung der Integrationsreihenfolge,

$$\int d^3x\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = \int d^3k \int d^3k'\, g^*(\vec{k})e^{+i\omega(k)t}\, g(\vec{k}')e^{-i\omega(k')t} \int d^3x\,(2\pi)^{-3}\, e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}, \tag{2.12}$$

so stellt hier das letzte Integral bekanntlich die Fourierdarstellung der δ-Distribution $\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})$ dar, die die Eigenschaft

$$\int d^3k'\,\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})\,f(\vec{k}') = f(\vec{k}) \tag{2.13}$$

für bei $\vec{k}'=\vec{k}$ reguläre „Testfunktionen“ f besitzt. Man erhält also[1]

$$\int d^3x\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = \int d^3k\,|\,g(\vec{k})e^{-i\omega(k)t}\,|^2 = \int d^3p\,|\varphi(\vec{p},t)|^2\,, \tag{2.14}$$

d.h. mit ψ *ist auch* φ *für alle Zeiten normiert.* Die Zeitunabhängigkeit der Normierung ist für den Spezialfall des kräftefreien Teilchens überdies manifest, denn wegen (2.10) ist hier $|\varphi(\vec{p},t)|^2 = |\varphi_0(\vec{p})|^2$ unabhängig von t.

(b) Berechnen wir weiter nach derselben Methode die m-te Komponente ($m = 1,2,3$) des Ortserwartungswertes (1.16), wobei wir

$$x_m e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'_m}e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \tag{2.15}$$

verwenden, und führen im innersten Integral von

$$\langle x_m\rangle_t = (2\pi)^{-3}\int d^3x \int d^3k\; g^*(\vec{k})\,e^{+i\omega(k)t}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \int d^3k'\,g(\vec{k}')\,e^{-i\omega(k')t}\,\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'_m}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}$$

eine partielle Integration bezüglich der k'_m-Komponente aus, so fällt in

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty} dk'_m \left[g(\vec{k}')e^{-i\omega(k')t}\right]\,\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'_m}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \\ &\quad= \frac{1}{i}\left[g(\vec{k}')e^{-i\left(\vec{k}'\cdot\vec{r}-\omega(k')t\right)}\right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dk'_m \left\{-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'_m}\left[g(\vec{k}')e^{-i\omega(k')t}\right]\right\}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\end{aligned} \tag{2.16}$$

der ausintegrierte Term heraus, weil $g(\vec{k}')$ in allen drei $\vec{k}'$-Komponenten im Unendlichen verschwinden muß, um gemäß (2.14) quadratintegrabel zu sein. Im verbleibenden Integral

$$\langle x_m\rangle_t = \int d^3k\; g^*(\vec{k})e^{i\omega(k)t}\int d^3k' \left\{-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'_m}\,g(\vec{k}')e^{-i\omega(k')t}\right\}\,(2\pi)^{-3}\int d^3x\; e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}$$

[1] In der Theorie der Fouriertransformation wird dieses Resultat auch als *Parsevalsches Theorem* bezeichnet.

wenden wir wieder (2.13) an und finden

$$\begin{aligned}
\langle x_m \rangle_t &= \int d^3k \left[g(\vec{k})\, e^{-i\omega(k)t} \right]^* i \frac{\partial}{\partial k_m} \left[g(\vec{k})\, e^{-i\omega(k)t} \right] \\
&= \int d^3p\, \varphi^*(\vec{p}, t)\, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_m}\, \varphi(\vec{p}, t)\, . \qquad (2.17)
\end{aligned}$$

Diese Rechnung, bei der wir die spezielle Zeitabhängigkeit (2.10) des kräftefreien Falles noch gar nicht verwendet haben, zeigt, wie man den *Erwartungswert des Ortes* und damit sofort auch die allgemeinen Erwartungswerte (1.17) *statt mit $\psi(\vec{r}, t)$ auch mit $\varphi(\vec{p}, t)$ berechnen kann*: Man hat ein zu (1.16) ganz analog gebautes Integral auszuführen, in dem der Faktor $\vec{r}$ durch eine auf das *rechter Hand* stehende φ wirkende Differentialoperation $i\hbar\, \partial/\partial p_m$ ersetzt ist. – Benutzen wir nun in (2.17) die spezielle Form (2.10) von $\varphi(\vec{p}, t)$, so wird

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n} \varphi(\vec{p}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E(p)t} \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n} + \frac{p_n}{m}\, t \right\} \varphi_0(\vec{p}) \qquad (2.18)$$

und damit

$$\langle \vec{r}\, \rangle_t = \int d^3p\, \varphi_0^*(\vec{p})\, i\hbar \vec{\nabla}_p\, \varphi_0(\vec{p}) + \left\{ \frac{1}{m} \int d^3p\, \varphi_0^*\, \vec{p}\, \varphi_0 \right\} t\, . \qquad (2.19)$$

Der erste Term ist nach (2.17) einfach $\langle \vec{r}\, \rangle_{t=0}$. Es gilt also *für den Erwartungswert des Ortes exakt das lineare Orts-Zeit-Gesetz des klassischen kräftefreien Teilchens*,

$$\langle \vec{r}\, \rangle_t = \langle \vec{r}\, \rangle_0 + \langle \vec{v}\, \rangle \cdot t\, , \qquad (2.20)$$

mit einer Geschwindigkeit $\langle \vec{v}\, \rangle$, die gemäß

$$m \cdot \langle \vec{v}\, \rangle = \int d^3p\, \varphi_0^*(\vec{p})\, \vec{p}\, \varphi_0(\vec{p}) \qquad (2.21)$$

durch den mit $|\varphi_0|^2$ gemittelten Impuls des Paketes gegeben ist. Auch diese Beobachtung wird sich als allgemeingültig erweisen: Die quantenmechanischen Erwartungswerte erfüllen die klassisch–mechanischen Bewegungsgleichungen.

Zusammengenommen legen diese Resultate den nächsten heuristischen Schritt fast zwingend nahe: Wir interpretieren $\varphi(\vec{p}, t)$ *als „Wellenfunktion im Impulsraum"* in dem Sinne, daß für ein Volumenelement $d^3p = dp_x dp_y dp_z$ um den Punkt $\vec{p}$ im Impulsraum die Größe

$$dw_p = |\varphi(\vec{p}, t)|^2 d^3p \qquad (2.22)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, bei einer Messung des Teilchenimpulses zur Zeit t den Wert $\vec{p}$ zu finden. Mit der Ortsraum-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ ist $\varphi(\vec{p}, t)$

durch die Fouriertransformation (2.9/2.11) umkehrbar eindeutig verknüpft, enthält also – in anderer Form – exakt dieselbe physikalische Information. Die Transformation läßt gemäß (2.14) das „Normierungsintegral“ für die Gesamtwahrscheinlichkeit invariant. Mit dieser Interpretation ergibt sich von selbst die uns bisher noch fehlende Vorschrift zur Berechnung des *Erwartungswertes des Impulses*,

$$\langle \vec{p}\,\rangle_t = \int d^3p\, \varphi^*(\vec{p},t)\, \vec{p}\, \varphi(\vec{p},t)\ , \tag{2.23}$$

ebenso wie der Erwartungswerte von Meßgrößen $G(\vec{p}\,)$, die sich allein als Funktion der Impulskomponenten ausdrücken lassen,

$$\langle G(\vec{p}\,)\rangle_t = \int d^3p\, \varphi^*(\vec{p},t)\, G(\vec{p}\,)\, \varphi(\vec{p},t)\ . \tag{2.24}$$

Z.B. würden wir mit $G(\vec{p}\,) = T = \vec{p}^{\,2}/2m$ den Erwartungswert der kinetischen Energie erhalten. Analog sind die Schwankungen

$$[\Delta G(\vec{p}\,)]_t^2 = \int d^3p\, \varphi^*(\vec{p},t)\, [G(\vec{p}\,) - \langle G(\vec{p}\,)\rangle_t]^2\, \varphi(\vec{p},t)$$

zu definieren; man findet dafür analog zu (1.20)

$$[\Delta G(\vec{p}\,)]_t^2 = \left\langle [G(\vec{p}\,)]^2 \right\rangle_t - \left(\langle G(\vec{p}\,)\rangle_t \right)^2\ . \tag{2.25}$$

Beim *kräftefreien Teilchen sind solche Erwartungswerte und Schwankungen reiner Impulsgrößen natürlich zeitlich konstant*, weil dort nach (2.10) stets $|\varphi|^2 = |\varphi_0|^2$ unabhängig von t ist, insbesondere also das in (2.20/2.21) bereits aufgetretene

$$\langle \vec{p}\,\rangle_t = \int |\varphi_0|^2\, \vec{p}\, d^3p = \langle \vec{p}\,\rangle_0 = const. \quad \text{(kräftefreies Teilchen).} \tag{2.26}$$

In diesem Spezialfall bilden sie daher das einfachste Bespiel für quantenmechanische *Konstanten der Bewegung*.

Andererseits zeigt (2.17), wie wir mit der (vorläufig rein formalen) Zuordnungsvorschrift

$$x_n \longrightarrow i\hbar\, \frac{\partial}{\partial p_n} \qquad \text{(beim Rechnen mit } \varphi) \tag{2.27}$$

auch Erwartungswerte von Ortskoordinaten und von Polynomgrößen in diesen Koordinaten (z.B. $r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$) aus $\varphi(\vec{p},t)$ direkt berechnen können. Das führt sofort zu der Überlegung, daß sich *umgekehrt auch* $\langle \vec{p}\,\rangle_t$ oder der allgemeine Erwartungswert (2.24) *aus* $\psi(\vec{r},t)$ *berechnen lassen* muß. Tatsächlich kann man in (2.23) die Fourierdarstellung (2.11) einsetzen und findet nach einer zu (2.15 - 2.17) genau spiegelbildlich verlaufenden Rechnung

$$\langle \vec{p}\,\rangle_t = \int d^3x\ \psi^*(\vec{r},t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r},t)\ , \tag{2.28}$$

d.h. einen Ausdruck von ähnlicher Struktur wie (1.16), nur daß statt des multiplikativen $\vec{r}$ nun gemäß der formalen Ersetzungsvorschrift

$$\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \qquad \text{(beim Rechnen mit } \psi) \tag{2.29}$$

eine auf den *rechten* ψ-Faktor wirkende Differentialoperation auftritt. Die Verallgemeinerung auf (2.24) ist trivial, z.B. erhalten wir durch zweimalige Anwendung von (2.29) den Erwartungswert

$$\langle T \rangle_t = \int d^3x \, \psi^*(\vec{r}, t)(- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) \psi(\vec{r}, t) \tag{2.30}$$

der kinetischen Energie, in dem der bekannte Laplace-Operator

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{2.31}$$

auftritt. Von praktischem Nutzen ist (2.29) oder umgekehrt auch (2.27) natürlich nur, wenn die betrachtete Meßgröße $G(\vec{p})$ *bzw.* $F(\vec{r})$ *ein Polynom* oder wenigstens eine gut konvergierende Potenzreihe in $\vec{p}$ bzw. $\vec{r}$ ist. Bei komplizierteren $G(\vec{p})$ etwa kann es zweckmäßiger sein, das aus (2.24) nach Einsetzen von (2.11) entstehende Doppelintegral

$$\langle G(\vec{p}) \rangle_t = \int d^3x \int d^3x' \, \psi^*(\vec{r}, t) \, \tilde{G}(\vec{r} - \vec{r}\,') \, \psi(\vec{r}\,', t) \; , \tag{2.32}$$

also eine „nichtlokale“, d.h. ψ an verschiedenen Orten $\vec{r} \neq \vec{r}\,'$ enthaltende Bilinearbildung, in der die Fouriertransformierte

$$\tilde{G}(\vec{r} - \vec{r}\,') = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p \, G(\vec{p}) \, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r} - \vec{r}\,') \cdot \vec{p}} \tag{2.33}$$

als „Integralkern“ auftritt, direkt auszuwerten.

Wir stellen fest: Die Ortsraum-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ *hat in der quantenmechanischen Beschreibung keine Monopolstellung*. Die Impulsraum-Wellenfunktion $\varphi(\vec{p}, t)$ etwa leistet in jeder Hinsicht dasselbe; beide sind nur äquivalente „Darstellungen“ desselben Bewegungszustandes, und zwar arbeitet man beim Rechnen mit ψ *„in der Ortsdarstellung“*, beim Rechnen mit φ *„in der Impulsdarstellung“* und kann durch Fouriertransformation jederzeit einen „Darstellungswechsel“ vollziehen. Wir werden später nicht nur den Darstellungsbegriff mathematisch präzisieren (Kap. 8), sondern auch sehen, daß es unendlich viele äquivalente Darstellungen gibt.

2.3 Entwicklung der Ortsunschärfe

Wir wollen das „klassische“ Resultat (2.20) nun noch ergänzen durch die Berechnung des zeitlichen Verlaufs der Ortsunschärfe, zunächst für eine Komponente x_n. Wir bilden also

$$(\Delta x_n)_t^2 = \langle x_n^2 \rangle_t - (\langle x_n \rangle_t)^2 \; . \tag{2.34}$$

Der zweite Term ist aus (2.20/21) zu entnehmen; für den ersten bilden wir gemäß der Regel (2.27)

$$\langle x_n^2 \rangle_t = \int d^3p \, \varphi^*(\vec{p}, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n} \right)^2 \varphi(\vec{p}, t) \; . \tag{2.35}$$

Durch eine partielle Integration, bei der wie in (2.16) der ausintegrierte Term verschwindet, und durch Anwendung von (2.18) wird daraus

$$
\begin{aligned}
\langle x_n^2 \rangle_t &= \int d^3p \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n} \varphi(\vec{p}, t) \right|^2 \\
&= \int d^3p \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n} \varphi_0(\vec{p}, t) \right|^2 \\
&\quad + \left\{ \frac{i\hbar}{m} \int p_n \left[\varphi_0^* \frac{\partial \varphi_0}{\partial p_n} - \varphi_0 \frac{\partial \varphi_0^*}{\partial p_n} \right] d^3p \right\} t + \left\{ \frac{1}{m^2} \int p_n^2 \left|\varphi_0\right|^2 d^3p \right\} t^2 .
\end{aligned}
$$

Der erste Term ist einfach $\langle x_n^2 \rangle_0$; das Integral im letzten Term stellt $\langle p_n^2 \rangle = \langle p_n^2 \rangle_0$ dar. Subtrahiert man das Quadrat der n-Komponente von (2.20), so wird

$$
(\Delta x_n)_t^2 = (\Delta x_n)_0^2 + 2\,\xi_n\,[\varphi_0] \cdot t + \left[\frac{(\Delta p_n)_0}{m} \right]^2 t^2 , \tag{2.36}
$$

wobei die Konstante ξ_n, ein Funktional der Impulsverteilung $\varphi_0(\vec{p})$, gegeben ist durch

$$
\xi_n = \frac{i\hbar}{2m} \int p_n \left[\varphi_0^* \frac{\partial \varphi_0}{\partial p_n} - \varphi_0 \frac{\partial \varphi_0^*}{\partial p_n} \right] d^3p - \frac{\langle x_n \rangle_0 \langle p_n \rangle_0}{m} \tag{2.37a}
$$

und durch Umrechnung auf $\psi(\vec{r}, 0)$ auch geschrieben werden kann als

$$
\xi_n = \int d^3x\, x_n \left[j_n(\vec{r}, 0) - \frac{\langle p_n \rangle_0}{m} \left|\psi(\vec{r}, 0)\right|^2 \right] \tag{2.37b}
$$

mit dem Vektorfeld

$$
\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) , \tag{2.38}
$$

das wir in Kap. 4 genauer interpretieren werden.- Für große Zeiten wird der quadratische Term in t in (2.36) führend, und man hat

$$
(\Delta x_n)_t \;\longrightarrow\; \frac{\langle \Delta p_n \rangle_0}{m}\, t , \tag{2.39}
$$

d.h. die Unschärfe jeder der Ortskomponenten wächst dann zeitlich linear an mit einer Geschwindigkeit, die durch die Unschärfe der Anfangsgeschwindigkeit, $\langle \Delta p_n \rangle_0 / m$, gegeben ist. Das entspricht wieder durchaus der Situation bei einer klassischen kräftefreien Bewegung mit unscharf gemessenem Anfangsimpuls, doch gewinnt das Ergebnis einen *nichtklassischen Zug* durch die Existenz der Unschärferelation (2.8), die

$$
\frac{\langle \Delta p_n \rangle_0}{m}\, t \;\gtrapprox\; \frac{\hbar}{m\,(\langle \Delta x_n \rangle_0)}\, t \tag{2.40}
$$

zur Folge hat: Die *Verbreiterung des Wellenpakets erfolgt für große Zeiten um so schneller, je schärfer die Lokalisierung des Pakets zum Anfangszeitpunkt* war. „Nichtklassisch“

ist außerdem das Auftreten des in t linearen Terms in (2.36), der eine Art Interferenzeffekt zwischen den Anfangsunschärfen von Ort und Impuls beschreibt und im Gegensatz zum quadratischen Term beide Vorzeichen haben, d.h. für kleinere Zeiten auch eine vorübergehende Abnahme der Ortsunschärfe bewirken kann.

Die Ergebnisse seien kurz illustriert am häufig benutzten *Modell eines Wellenpakets mit gaußförmiger Impulsverteilung* um den mittleren Impuls $\hbar\vec{k}_0$ herum mit Breite $\hbar/b$ im Impulsraum:

$$g(\vec{k}) = \hbar^{\frac{3}{2}}\varphi_0(\hbar\vec{k}) = \left(\frac{b}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}b^2\left(\vec{k}-\vec{k}_0\right)^2} . \tag{2.41}$$

Hier läßt sich das Integral (2.6a) elementar ausführen und ergibt

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r},t) &= \left[b\sqrt{\pi}\left(1+i\frac{\hbar t}{mb^2}\right)\right]^{-\frac{3}{2}} \\ &\quad\times\ \exp\left\{i\left[\vec{k}_0\vec{r}-\frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right]-\frac{1}{2}\frac{\left[\vec{r}-\left(\hbar\vec{k}_0/m\right)t\right]^2}{b^2\left(1+i\frac{\hbar t}{mb^2}\right)}\right\}\end{aligned} \tag{2.42a}$$

oder nach Betrag und Phase aufgeteilt

$$\psi(\vec{r},t) = \left[\sqrt{\pi}\,b(t)\right]^{-\frac{3}{2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{\vec{r}-\left(\hbar\vec{k}_0/m\right)t}{b(t)}\right]^2\right\} \tag{2.42b}$$

$$\times\quad\exp\left\{i\left[\vec{k}_0\vec{r}-\frac{\hbar k_0^2}{2m}t+\frac{\hbar t}{2mb^2}\left(\frac{\vec{r}-\hbar\vec{k}_0t/m}{b(t)}\right)^2-\frac{3}{2}\arctan\left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)\right]\right\}$$

mit der zeitlich anwachsenden Breite im Ortsraum

$$b(t) \;=\; b\left[1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2b^4}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.43a}$$

$$\left(\longrightarrow\frac{\hbar t}{mb}\quad\text{für}\quad t\gg\frac{mb^2}{\hbar}\right) . \tag{2.43b}$$

Bei Bildung der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \left[b(t)\sqrt{\pi}\,\right]^{-3}\exp\left\{-\frac{\left[\vec{r}-\left(\hbar\vec{k}_0/m\right)t\right]^2}{b(t)^2}\right\} \tag{2.44}$$

fällt die komplizierte Phase heraus; man berechnet durch elementare Integrationen

$$\langle\vec{r}\,\rangle_t = \frac{\hbar\vec{k}_0}{m}\,t\quad,\quad(\Delta x_n)_t^2 = \frac{1}{2}\,b(t)^2 \tag{2.45}$$

und andererseits direkt aus (2.41) die Konstanten

$$\langle\vec{p}\,\rangle_t = \hbar\vec{k}_0 = \langle\vec{p}\,\rangle_0\quad,\quad(\Delta p_n)^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{b^2} . \tag{2.46}$$

Die daraus folgende Relation

$$(\Delta x_n \cdot \Delta p_n)_t = \frac{\hbar}{2}\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.47}$$

exemplifiziert die Unschärferelation (2.8); der Grenzfall

$$(\Delta x_n)_t \longrightarrow \left(\frac{\hbar}{mb\sqrt{2}}\right) \cdot t \qquad \text{für} \quad t \gg \frac{mb^2}{\hbar} \tag{2.48}$$

kann zur Illustration von (2.40) dienen.

Als Zahlenbeispiel sei ein beim α-Zerfall eines schweren Atomkerns entstehendes α-Teilchen (^{4}He-Kern) betrachtet; wegen seiner scharfen Anfangslokalisierung auf einen Bereich von der Dimension eines schweren Kerns ($b \approx 10^{-11} cm$) tritt hier $(\hbar t/mb) \approx 2b$, d.h. eine Verdoppelung der Anfangsbreite, bereits nach der kurzen Zeit von $t \approx 10^{-17} sec$ ein. Auf der Zeitskala nuklearer Prozesse ($t \approx 10^{-21} sec$) ist diese Zeit jedoch immer noch sehr lang; sie reicht z.B. aus, um das α-Teilchen selbst bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten Distanzen durchlaufen zu lassen, die groß gegen die Abmessungen eines Kerns sind (bei $v = \frac{1}{30}\, c \approx 10^7 m/s$ etwa $10^{-8} cm$, d.h. einen Atomdurchmesser). Auch in vielen anderen Situationen, insbesondere bei den *Streuexperimenten* der Atom- und Kernphysik, erweist sich auf Grund ähnlicher Abschätzungen die Verbreiterung der beteiligten Wellenpakete als unwesentlich.

2.4 Operatoren zu Meßgrößen

Wir knüpfen nun an die Beobachtung an, daß die in der Ortsdarstellung berechneten Erwartungswerte wie (1.16), (1.17), (2.28) alle die gemeinsame Form

$$\langle A \rangle_t = \int d^3x\, \psi^*(\vec{r}, t) A^{(x)} \psi(\vec{r}, t) \tag{2.49}$$

haben, wo A eine Meßgröße und $A^{(x)}$ eine ihr in der Ortsdarstellung zugeordnete, auf das *rechtsstehende* ψ wirkende Operation ist, z.B.

$$\left.\begin{array}{c|c} A & A^{(x)} \\ \hline \vec{r} & \text{„Multipliziere mit } \vec{r}\,\text{“} \\ F(\vec{r}) & \text{„Multipliziere mit } F(\vec{r})\text{“} \\ \vec{p} & \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \\ T = \frac{p^2}{2m} & (-\frac{\hbar^2}{2m})\nabla^2 \end{array}\right\} \text{Ortsdarstellung.} \tag{2.50}$$

Beim Rechnen in der Impulsdarstellung haben gemäß (2.23), (2.24), (2.17) *dieselben* Erwartungswerte die Gestalt

$$\langle A \rangle_t = \int d^3p\, \varphi^*(\vec{p}, t) A^{(p)} \varphi(\vec{p}, t) \tag{2.51}$$

mit einer auf $\varphi(\vec{p}, t)$ wirkenden Operation $A^{(p)}$ wie z.B.

$$\left.\begin{array}{c|c} A & A^{(p)} \\ \hline \vec{p} & \text{„Multipliziere mit } \vec{p}\text{"} \\ G(\vec{p}) & \text{„Multipliziere mit } G(\vec{p})\text{"} \\ \vec{r} & i\hbar\vec{\nabla}_p \end{array}\right\} \text{Impulsdarstellung.} \tag{2.52}$$

Diese bisher rein formal zum Zwecke der Bildung von Erwartungswerten vorgenommene Zuordnung hat allgemeine Bedeutung: Jeder Meßgröße A wird in der Quantenmechanik ein auf die Wellenfunktion wirkender *„Operator" A^{Op}, d.h. eine Abbildungsvorschrift, die die Wellenfunktion auf eine gewisse Bildfunktion abbildet*, zugeordnet. Die konkrete Realisierung dieses Operators ist wieder von der Darstellung abhängig; *derselben Meßgröße $\vec{p}$ z.B. wird beim Rechnen in der Ortsdarstellung der „Differentialoperator" $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$, beim Rechnen in der Impulsdarstellung der „Multiplikationsoperator" $\vec{p}$* zugeordnet. Wir schreiben A^{Op} dann, wenn allgemeine, unabhängig von der speziellen Darstellung geltende Eigenschaften zu formulieren sind. Eine solche Eigenschaft, die allen bisher benutzten Operatoren gemeinsam ist, ist die *Linearität*, d.h. bei Anwendung auf eine Superposition (1.8) von Wellenfunktionen gilt

$$A^{Op}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(A^{Op}\psi_1) + c_2(A^{Op}\psi_2)\ , \tag{2.53}$$

gleich, ob die ψ's Ortsraum- oder Impulsraumwellenfunktionen sind.

Wir sind versucht, diese Beobachtungen zu verallgemeinern und jeder aus der klassischen Mechnaik bekannten, aus den Ortskoordinaten x_n und Impulskomponenten p_n in irgend einer Reihenfolge aufgebauten Meßgröße $A = A(\vec{r}, \vec{p})$ einen Operator

$$A^{Op} = \begin{cases} A\left(\vec{r}, \dfrac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) & \text{in Ortsdarstellung} \\ A\left(i\hbar\vec{\nabla}, \vec{p}\right) & \text{in Impulsdarstellung} \end{cases} \tag{2.54}$$

zuzuordnen. Dabei ergibt sich jedoch sofort eine charakteristische Schwierigkeit, sobald in $A(\vec{r}, \vec{p})$ Produkte von Orts- und Impulskomponenten in *derselben* Raumrichtung auftreten: Im klassischen Ausdruck ist die Reihenfolge der Faktoren dort gleichgültig, während es bei den Operatoren einen Unterschied macht, ob etwa zuerst x, dann $(\hbar/i)\partial/\partial x$ auf ψ wirkt oder umgekehrt. Wir können diese Beobachtung formalisieren, indem wir etwa in der Ortsdarstellung schreiben

$$X_l^{Op}P_k^{Op}\psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i}\, x_l\, \frac{\partial\psi}{\partial x_k}\ , \tag{2.55a}$$

$$\begin{aligned} P_k^{Op}X_l^{Op}\psi(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\Big(x_l \cdot \psi(\vec{r}, t)\Big) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left(x_l\, \frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \delta_{kl}\, \psi\right)\ . \end{aligned} \tag{2.55b}$$

Da dies für jedes (differenzierbare) ψ gilt, schreibt man unter Weglassung von ψ die Operatorbeziehung

$$(P_k X_l - X_l P_k)^{Op} = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{kl}\,\mathbf{1}\,, \tag{2.56a}$$

wo $\mathbf{1}$ den „Einheitsoperator“, d.h. die identische Abbildung bezeichnet, die jedes ψ auf sich selbst abbildet, oder noch kürzer die *Heisenbergsche Vertauschungsrelation*

$$\left[P_k^{Op}, X_l^{Op}\right] = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{kl}\,\mathbf{1} \tag{2.56b}$$

mit dem *Kommutator* oder der Vertauschungsklammer zweier Operatoren,

$$\left[A^{Op}, B^{Op}\right] = A^{Op}B^{Op} - B^{Op}A^{Op}\,. \tag{2.57}$$

Der Grund für die oben erwähnte Schwierigkeit liegt darin, daß auf Grund dieser Vertauschungsrelation die den Meßgrößen zugeordneten Operatoren im allgemeinen *nichtkommutative Größen* sind. Als erstes Beispiel betrachten wir die Radialkomponente des Impulses,

$$p_r = \hat{r}\cdot\vec{p} = \frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\,. \tag{2.58}$$

Sollen wir ihr (in der Ortsdarstellung) den Operator

$$\frac{\vec{r}}{r}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \qquad \text{oder} \qquad \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\cdot\frac{\vec{r}}{r} \tag{2.59}$$

zuordnen? Beide Operatoren sind verschieden, denn wegen $\vec{\nabla}\cdot\hat{r} = 2/r$ ist

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\cdot(\hat{r}\psi) = \underbrace{\hat{r}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,\psi\right)}_{=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}} + \frac{\hbar}{i}\frac{2}{r}\,\psi\,. \tag{2.60}$$

Den Ausweg weist in diesem Fall die Überlegung, daß *Erwartungswerte als meßbare Größen stets reell* sein müssen, was die physikalisch sinnvollen Operatoren erheblich einschränkt: Bei ihnen muß

$$\mathrm{Im}\,\langle A\rangle = \frac{1}{2i}\left(\langle A\rangle - \langle A\rangle^*\right) = 0 \tag{2.61}$$

für jede zulässige Wellenfunktion ψ bzw. φ gelten. Man rechnet leicht nach, daß dies für keinen der beiden Operatoren (2.59) allein zutrifft, und daß es nur eine einzige Linearkombination der beiden gibt, nämlich die „symmetrisierte“ Bildung

$$P_r^{Op} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\cdot\hat{r} + \hat{r}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{2.62}$$

(in Ortsdarstellung),

die wir deshalb als Operator für p_r verwenden. Man kann übrigens allgemein angeben, welche Eigenschaft ein linearer Operator A^{Op} besitzen muß, um stets reelle

Erwartungswerte zu liefern: Da (2.61) auch für jede Linearkombination

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k$$

zulässiger Wellenfunktionen gelten muß und A^{Op} linear gemäß (2.53) ist, erhalten wir die Bedingung

$$\frac{1}{2i} \sum_{k,l} \left\{ c_k^* \, c_l \int d^3x \; \psi_k^* \, A^{Op} \psi_l - c_k \, c_l^* \int d^3x \; \psi_k \left(A^{Op} \psi_l \right)^* \right\} = 0$$

oder nach Umbenennung der Summationsindizes im zweiten Term

$$\sum_{k,l} c_k^* \, c_l \left\{ \int d^3x \; \psi_k^* \, A^{Op} \psi_l - \int d^3x \left(A^{Op} \psi_k \right)^* \psi_l \right\} = 0 \,. \tag{2.63}$$

Da dies für beliebige Koeffizientensätze $\{c_k\}$ gelten soll, muß für alle zulässigen Wellenfunktionen

$$\int d^3x \; \psi_k^* \, A^{Op} \psi_l = \int d^3x \left(A^{Op} \psi_k \right)^* \psi_l \tag{2.64}$$

gelten. Operatoren mit dieser Eigenschaft, die in einem Integral $\int d^3x \, \psi_k^* \, A^{Op} \psi_l$ „nach links hinübergewälzt" werden dürfen, heißen *hermitesch; nur hermitesche Operatoren kommen für die Zuordnung zu Meßgrößen in der Quantenmechanik in Frage.* Man sieht wiederum leicht, daß die Operatoren (2.59) diese Bedingung verletzen, während der symmetrisierte Operator (2.62)

$$\int d^3x \left[\psi_k^* \, P_r^{Op} \psi_l - \left(P_r^{Op} \psi_k \right)^* \psi_l \right] = \frac{\hbar}{i} \int d^3x \, \vec{\nabla} \left(\psi_k^* \, \hat{r} \, \psi_l \right) \tag{2.65}$$

liefert, was für bei $|\vec{r}\,| \to \infty$ hinreichend abfallende ψ_k, ψ_l verschwindet.

Anmerkung:

Bei Meßgrößen, deren klassischer Ausdruck höhere $\vec{p}$- und $\vec{x}$- Potenzen enthält, genügt i.a. auch die Forderung der Hermitezität nicht mehr für die eindeutige Festlegung eines zugehörigen quantenmechanischen Operators; z.B. können zu dem klassischen Ausdruck $p^2 x$ die symmetrisierten Bildungen

$$\frac{1}{2} \left(p^2 x + x p^2 \right) \qquad \text{oder} \qquad \frac{1}{4} \left(p^2 x + 2 \, pxp + x p^2 \right) \tag{2.66}$$

gehören, die beide hermitesch sind. Diese Schwierigkeiten zeigen im Grunde nur, daß die quantenmechanische Theorie eben aus der klassischen nicht eindeutig erschließbar ist, ihre Auflösung ist i.a. nur durch Zusatzinformationen möglich, die für jedes gegebene System speziell gesucht werden müssen.

2.5 Ebene Wellen als Impulseigenfunktionen

Mit dem einer Meßgröße A zugeordneten Operator A^{Op} können wir die Schwankung der Meßwerteverteilung von A allgemein formulieren als

$$(\Delta A)_t^2 = \left\langle \left(A^{Op} - \langle A \rangle_t\right)^2 \right\rangle_t \tag{2.67}$$

oder speziell in der Ortsdarstellung als

$$(\Delta A)_t^2 = \int d^3x \, \psi^*(\vec{r}, t) \left(A^{(x)} - \langle A \rangle_t\right)^2 \psi(\vec{r}, t) \; . \tag{2.68}$$

Wegen der Realität der Zahl $\langle A \rangle_t$ ist mit A^{Op} auch $A^{Op} - \langle A \rangle \cdot \mathbf{1}$ ein hermitescher Operator, so daß wir (2.64) anwenden können:

$$(\Delta A)_t^2 = \int d^3x \left| \left(A^{(x)} - \langle A \rangle_t\right) \psi(\vec{r}, t) \right|^2 \; . \tag{2.69}$$

Wir stellen nun die Frage, ob wir zur Meßgröße A einen oder auch mehrere Zustände finden können, für die die *Verteilung der A-Meßwerte „vollkommem scharf“*, d.h. jeweils bei einem einzigen Wert a konzentriert ist, der dann zugleich Erwartungswert von $\langle A \rangle$ ist. Wir haben bereits gesehen, daß Schwankungen von Meßgrößen im allgemeinen sich zeitlich ändern, so daß wir *im allgemeinen* eine derartige Eigenschaft nur für einen speziellen Zeitpunkt $t = t_0$ erwarten können, der (o.B.d.A.) als $t_0 = 0$ gewählt sei. (Natürlich gibt es, wie das Beispiel der Impulsgrößen beim kräftefreien Teilchen zeigt, auch den Spezialfall zeitlich konstanter Schwankungen.) Nun ist aber die Schwankung (2.69) (für $t_0 = 0$) genau dann Null, wenn $\left(A^{(x)} - \langle A \rangle_0\right) \psi(\vec{r}, 0) = 0$ ist, d.h.

$$A^{(x)} \psi(\vec{r}, 0) = a \, \psi(\vec{r}, 0) \qquad (\text{mit } \langle A \rangle_0 = a) \; . \tag{2.70a}$$

Da Schwankungen und Erwartungswerte darstellungsunabhängige Zahlen sind, bekommen wir z.B. beim Rechnen in Impulsdarstellung die analoge Beziehung

$$A^{(p)} \varphi(\vec{p}, 0) = a \, \varphi(\vec{p}, 0) \qquad (\text{mit } \langle A \rangle_0 = a) \; . \tag{2.70b}$$

Darstellungsunabhängig können wir also schreiben

$$\boxed{A^{Op} \psi_n = a_n \, \psi_n, \qquad a_n = \langle A \rangle_{t=0, \, \psi_n},} \tag{2.71}$$

wo ψ_n entweder $\psi(\vec{r}, 0)$ oder $\varphi(\vec{p}, 0)$ sein kann und der Index n evtl. vorhandene verschiedene derartige Wellenfunktionen bzw. ihre A-Erwartungswerte a_n abzählt. Eine Wellenfunktion mit dieser Eigenschaft, sich (in jeder Darstellung) bei Anwendung des Operators A^{Op} bis auf einen Zahlenfaktor a zu reproduzieren, heißt *Eigenfunktion von A^{Op} zum Eigenwert a*. Wenn derartige Eigenfunktionen existieren, bildet ihre Gesamtheit das *„Eigenfunktionensystem“*, die Menge der zugehörigen Eigenwerte das *„Spektrum“* des Operators A^{Op}; die Aufgabe, sie durch Lösung der Gl. (2.71) zu finden, heißt das *„Eigenwertproblem“* von A^{Op}. Es kann vorkommen, daß zu demselben Eigenwert a_n mehrere Eigenfunktionen $\psi_n^{(1)}$, $\psi_n^{(2)}, \ldots$

existieren, die „*linear unabhängig*“ sind in dem bekannten Sinne, daß keine von ihnen als nichttriviale Linearkombination der übrigen darstellbar ist; dieser Eigenwert heißt dann *entartet*.

Wir können für *Eigenfunktionen linearer hermitescher Operatoren*, sofern sie existieren, einige allgemeine Eigenschaften sofort angeben:

(a) Die *Eigenwerte a_n sind alle reell*, da sie ja zugleich Erwartungswerte eines hermiteschen Operators sind.

(b) Für *zwei Eigenfunktionen ψ_k, ψ_l desselben hermiteschen Operators* findet man, indem man von den Eigenwertgleichungen

$$\left(A^{Op}\psi_k\right)^* = a_k\,\psi_k^* \quad , \quad A^{Op}\psi_l = a_l\,\psi_l \tag{2.72a}$$

die erste mit ψ_l, die zweite mit ψ_k^* multipliziert, subtrahiert und – etwa in Ortsdarstellung – über den gesamten $\vec{r}$-Raum integriert,

$$\begin{aligned}(a_k - a_l)&\int d^3x\;\psi_k^*(\vec{r},0)\,\psi_l(\vec{r},0)\\ =&\int d^3x\left[\left(A^{(x)}\psi_k\right)^*\psi_l - \psi_k^*\left(A^{(x)}\psi_l\right)\right] = 0\end{aligned} \tag{2.72b}$$

wegen (2.64). Für $a_k \neq a_l$ folgt

$$\int d^3x\;\psi_k^*(\vec{r},0)\,\psi_l(\vec{r},0) = 0 \qquad (a_k \neq a_l) \tag{2.73}$$

und eine analoge Beziehung für die zugehörigen Impulsraum-Wellenfunktionen $\varphi_k(\vec{p},0)$, $\varphi_l(\vec{p},0)$, wenn man in Impulsdarstellung rechnet. Da die darstellungsunabhängige Größe

$$\big(\psi_k(t),\psi_l(t)\big) := \int d^3x\;\psi_k^*(\vec{r},t)\,\psi_l(\vec{r},t) = \int d^3p\;\varphi_k^*(\vec{p},t)\,\varphi_l(\vec{p},t) \tag{2.74}$$

die typischen Eigenschaften eines *Skalarprodukts* hat, also

$$\begin{gathered}(\psi_l,\psi_k) = (\psi_k,\psi_l)^* \;\;,\;\; (\psi_k,\,c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\,(\psi_k,\psi_1) + c_2\,(\psi_k,\psi_2)\,,\\ (\psi_k,\psi_k)\;\text{ reell und} \geq 0\;\;(\text{und } = 0 \text{ nur für } \psi_k = 0)\end{gathered} \tag{2.75}$$

bezeichnet man die integrale Eigenschaft

$$(\psi_k,\psi_l) = 0 \qquad \text{für}\;\; a_k \neq a_l \tag{2.76}$$

als „*Orthogonalität*“. Für $k = l$ können wir, da wir unsere Wellenfunktionen stets stillschweigend als normiert voraussetzen, Gl. (2.76) durch

$$(\psi_k,\psi_k) = 1 \tag{2.77}$$

ergänzen. Für $a_k = a_l$ trotz $k \neq l$, d.h. den Fall zweier verschiedener Eigenfunktionen zu einem entarteten Eigenwert, ist der Schluß auf (2.76) nicht möglich. Bei den hermiteschen Operatoren der Quantenmechanik werden wir jedoch aus den linear unabhängigen Eigenfunktionen zu einem evtl. entarteten Eigenwert – dank der Linearität (2.53) – stets durch Linearkombination ein System „orthogonalisierter" Eigenfunktionen zu demselben Eigenwert herstellen können. (Das erreichen wir in der Regel dadurch, daß wir diese Linearkombinationen als gleichzeitige Eigenfunktionen eines zweiten hermiteschen Operators B^{Op}, aber nun zu verschiedenen Eigenwerten, bestimmen.) Wir können deshalb für unsere Zwecke stets

$$(\psi_k, \psi_l) = \delta_{kl} \tag{2.78}$$

annehmen: Die *Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators bilden o.B.d.A. ein „orthonormiertes Funktionensystem"*.

Wir wenden diese Überlegungen sogleich auf den Fall der Komponenten des Impulsoperators, P_n $(n = 1, 2, 3)$ an: Gibt es Wellenfunktionen mit „vollkommen scharfem" Meßwert einer oder mehrerer Impulskomponenten? Rechnen wir in Ortsdarstellung, so müssen sie nach (2.70a) der Eigenwertgleichung

$$P_n\,\psi(\vec{r},0) = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x_n}\psi(\vec{r},0) = p_n\,\psi(\vec{r},0) \tag{2.79}$$

für mindestens ein n genügen. Die Lösungen sind

$$\psi(\vec{r},0) = const.\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.80}$$

für alle drei Komponenten P_n gleichzeitig, und zwar mit den Eigenwerten

$$p_n = \hbar k_n \quad , \quad -\infty < k_n < +\infty \quad , \quad n = 1, 2, 3\,. \tag{2.81}$$

Sie sind, wie erwartet, reell, und *einzeln* genommen hochgradig entartet – alle Funktionen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ mit z.B. demselben k_1, aber verschiedenen k_2, k_3 sind linear unabhängige Eigenfunktionen des Operators P_1 zu demselben Eigenwert $\hbar k_1$, die durch die verschiedenen Eigenwerte zu den beiden anderen P_n zu unterscheiden sind. Die Eigenwertmenge ist für jedes P_n die gesamte reelle Zahlenachse, die P_n haben ein *kontinuierliches oder „Streckenspektrum"*. Die zugehörigen simultanen Eigenfunktionen der drei Impulsoperatoren sind die ebenen Wellen von Gl. (2.4) (mit $t = 0$). In Impulsdarstellung erhält, da die Fouriertransformierte der ebenen Welle eine δ-Distribution ist, dieselbe Aussage die Gestalt

$$(\vec{p} - \hbar\vec{k})\,\varphi_{\vec{k}}\,(\vec{p},0) \;=\; 0 \quad , \tag{2.82a}$$
$$\varphi_{\vec{k}}\,(\vec{p},0) \;=\; \delta^3(\vec{p} - \hbar\vec{k}) \quad . \tag{2.82b}$$

Nun sind aber, wie wir schon bei Gl. (2.5) feststellten und an (2.82b) erneut sehen (das Quadrat einer δ-Distribution ist nicht definiert!), diese Funktionen gar *keine physikalisch zulässigen Wellenfunktionen*, weil nicht normierbar! Physikalisch ist das nicht überraschend. Wir haben nach Wellenfunktionen mit scharfem Impulswert, also $\Delta\vec{p} = 0$ gesucht – eine vom Gesichtspunkt der *Messung* her unsinnige Forderung, da bei einem Impulsmeßgerät, das einen vollkommen scharfen Impuls aus dem Kontinuum der möglichen Werte aussondern sollte, mit der Bandbreite auch die Ansprechwahrscheinlichkeit gegen Null gehen würde! Es liegt in der Natur von Meßgrößen mit Streckenspektrum, daß hier immer nur eine Messung innerhalb eines endlichen Werteintervalls sinnvoll ist – nicht nur wegen der stets vorhandenen begrenzten Meßgenauigkeit, sondern auch rein begrifflich. Im vorliegenden Falle führt wegen der Unschärferelationen (2.8) die Forderung $\Delta\vec{p} = 0$ auf physikalisch unrealistische Lösungen mit $\Delta\vec{x} = \infty$. Derartige Wellenfunktionen, die Eigenfunktionen zu hermiteschen Operatoren meßbarer Größen sind, aber die grundlegende Randbedingung der Normierbarkeit verletzen, heißen *uneigentliche Eigenfunktionen*; sie werden uns stets im Zusammenhang *mit Eigenwerten des kontinuierlichen Spektrums* begegnen.

Da wir den Schluß (2.76) hier nicht einfach übernehmen können, berechnen wir gesondert

$$\left(\psi_{\vec{k}'}, \psi_{\vec{k}}\right) = const.^2 \cdot \int d^3x \; e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \, .$$

Wählen wir also $const.^2 = (2\pi)^{-3}$, so weisen die ebenen Wellen

$$\psi_{\vec{k}}\,(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{2.83}$$

als Analogon zu der Orthonormierung (2.78) für „eigentliche“ Eigenfunktionen eine sog. *„Orthonormierung auf δ-Funktionen“* auf:

$$\left(\psi_{\vec{k}'}, \psi_{\vec{k}}\right) = \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) \, . \tag{2.84}$$

Sie stimmt für $\vec{k}' \neq \vec{k}$ mit (2.76) überein.

Warum sind diese je für sich unphysikalischen Eigenfunktionen trotzdem wichtig? Die Antwort gibt die Fouriertransformation (2.9); sie zeigt zunächst, daß die ebenen Wellen als „Basisfunktionen“ dienen können, aus denen durch lineare Superposition physikalisch zulässige, normierbare Wellenfunktionen aufgebaut werden können, sofern nur die Überlagerungsamplitude $g(\vec{k})$ hinreichend stark abfallend gewählt wird. Vor allem aber können wir diese Transformation nun als *Entwicklung der Wellenfunktion nach dem System der (uneigentlichen) gemeinsamen Eigenfunktionen der drei Impulsoperatoren,*

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \int d^3k \; c_{\vec{k}}\,(t_0)\, \psi_{\vec{k}}\,(\vec{r}) \, , \tag{2.85}$$

physikalisch interpretieren, wobei die mit dem Wertetripel $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ kontinuierlich indizierten „Entwicklungskoeffizienten“ durch

$$c_{\vec{k}}\,(t_0) = \varphi(\hbar\vec{k}, t_0)\, \hbar^{-3/2} \tag{2.86}$$

gegeben sind: Nach Gl. (2.22) geben ja die Betragsquadrate dieser Entwicklungskoeffizienten gerade die Meßwahrscheinlichkeiten für Intervalle bzw. Volumenelemente im Impulsraum an. Wegen der verallgemeinerten Orthonormierung

(2.84) lassen sich diese Koeffizienten leicht bestimmen, indem man das Skalarprodukt von (2.85) mit $\psi_{\vec{k}'}$ bildet,

$$(\psi_{\vec{k}'}, \psi) = \int d^3k \; c_{\vec{k}} \; \underbrace{(\psi_{\vec{k}'}, \psi_{\vec{k}})}_{\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})} = c_{\vec{k}'} \; , \tag{2.87}$$

und dies ist nichts anderes als (2.11), die Umkehrung der Fouriertransformation.

Die Verallgemeinerung dieser Beobachtung führt uns heuristisch zu der *Interpretation*, daß

(a) die Eigenwerte des einer Meßgröße zugeordneten hermiteschen Operators die möglichen Meßwerte bei einer einzelnen Messung dieser Größe sind und

(b) die Betragsquadrate der Entwicklungskoeffizienten in der Entwicklung der Wellenfunktion nach den zugehörigen Eigenfunktionen die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten dieser Meßwerte – bzw. im Falle eines kontinuierlichen Meßwertevorrats für kleine Intervalle in der Skala dieser Meßwerte – angeben.

Für die Durchführbarkeit dieser plausiblen Interpretation ist offenbar wesentlich, daß die Eigenfunktionen der betreffenden Meßgröße ein sog. *vollständiges System* bilden, d.h. daß jede zulässige Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t_0)$ sich in einem mathematisch noch zu präzisierenden Sinne als Entwicklung nach dem System dieser Eigenfunktionen darstellen läßt. Im Falle der Entwicklung nach ebenen Wellen (2.9) ist diese Vollständigkeit durch das Fouriersche Integraltheorem gesichert; im allgemeinen Falle wird sie jedoch *eine über die Hermitezität hinausgehende grundlegende Forderung an die physikalisch sinnvollen Operatoren zu Meßgrößen* darstellen.

Das durch (2.81) gegebene Spektrum der Impulsoperatoren hat die keineswegs selbstverständliche Besonderheit, daß es mit der Menge der bereits nach der *klassischen* Mechanik möglichen Meßwerte identisch ist. Im nächsten Kapitel untersuchen wir eine Klasse von Meßgrößen, für die dies nicht mehr zutrifft.

Kapitel 3

Bahndrehimpuls und Drehimpulsdarstellungen

3.1 Vertauschungsrelationen der Drehimpulsoperatoren

Dem klassischen Bahndrehimpuls eines Teilchens bezüglich des Koordinatenursprungs, $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, läßt sich ohne die in Abschnitt (2.4) diskutierten Mehrdeutigkeitsprobleme der dreikomponentige Operator

$$\vec{L} = \vec{X}^{Op} \times \vec{P}^{Op} \qquad \text{oder} \qquad L_k = \epsilon_{klm} \, X_l^{Op} \, P_m^{Op} \tag{3.1}$$

$(k = 1, 2, 3)$ zuordnen[1], da in jeder Komponente nur Produkte von P^{Op}- und X^{Op}-Komponenten in verschiedenen Raumrichtungen auftreten, die vertauschbar sind. Aus demselben Grunde sind diese Operatoren hermitesch, denn aus der Hermitezität der P_m und X_l folgt in der Skalarproduktschreibweise von (2.74)

$$\begin{aligned} (\psi_1, X_l \, P_m \, \psi_2) &= (X_l \, \psi_1, P_m \, \psi_2) \\ &= (P_m \, X_l \, \psi_1, \psi_2) \\ &= (X_l \, P_m \, \psi_1, \psi_2) \qquad \text{für } \; l \neq m \end{aligned} \tag{3.2}$$

für alle Paare $\{\psi_1, \, \psi_2\}$ von Wellenfunktionen, die mitsamt ihren Bildern unter $\vec{P}$ und $\vec{X}$ im Hermitezitätsbereich von $\vec{P}$ und $\vec{X}$ liegen. Also

$$(\psi_1, L_k \, \psi_2) = (L_k \, \psi_1, \psi_2) \quad ; \quad k = 1, 2, 3 \, . \tag{3.3}$$

Kann man – analog zum Impuls – gemeinsame Eigenfunktionen dieser drei Operatoren finden, die ein vollständiges System bilden?

Dazu fragen wir zunächst allgemein nach den *notwendigen Bedingungen dafür, daß zwei lineare Operatoren A, B ein gemeinsames vollständiges Eigenfunktionensystem $\{\psi_n\}$*

[1] Zur Erinnerung: $\epsilon_{klm} = +1$ bzw. -1 für $(k, l, m) =$ gerade bzw. ungerade Permutation von $(1, 2, 3)$, $\epsilon_{klm} = 0$ sonst.– In allen Formeln mit diesem „antisymmetrischen Einheitstensor 3. Stufe“ wird die *Summationskonvention* verwendet, d.h. über in einem Produkt doppelt vorkommende Indizes (hier l und m) wird stets von 1 bis 3 summiert.

(also nicht nur einige spezielle gemeinsame Eigenfunktionen!) besitzen. Aus

$$A\,\psi_n = a_n\,\psi_n \qquad \textit{und} \qquad B\,\psi_n = b_n\,\psi_n \qquad \text{für } \textit{alle}\ n \tag{3.4a}$$

folgt sofort

$$\begin{aligned} A\,(B\,\psi_n) &= A\,(b_n\,\psi_n) = b_n\,(A\,\psi_n) = b_n\,a_n\,\psi_n \\ &= a_n\,b_n\,\psi_n = a_n\,(B\,\psi_n) = B\,(A\,\psi_n) \end{aligned}$$

oder kurz

$$[A, B]\,\psi_n = 0 \qquad \text{für } \textit{alle}\ \psi_n\,. \tag{3.4b}$$

Da die ψ_n ein vollständiges System bilden, muß $[A, B]$ der Nulloperator sein, der jede Wellenfunktion auf Null abbildet:

$$[A, B] = 0\,. \tag{3.4c}$$

Die *Vertauschbarkeit der Operatoren ist also notwendige Bedingung* für die Existenz eines gemeinsamen vollständigen Eigenfunktionensystems.

Untersuchen wir daraufhin den Bahndrehimpuls (3.1): Mit Hilfe von „Kommutatoridentitäten" wie

$$[AB, C] = A\,[B, C] + [A, C]\,B \tag{3.5a}$$

$$[A, BC] = [A, B]\,C + B\,[A, C] \tag{3.5b}$$

(oder durch direkte Rechnung) unter Benutzung der Heisenbergschen VR (2.56) und der Vertauschbarkeit

$$[X_k, X_l] = 0 \quad , \quad [P_k, P_l] = 0 \qquad \text{für alle } (k, l) \tag{3.6}$$

findet man z.B.

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= [X_2P_3 - X_3P_2\,, X_3P_1 - X_1P_3] \\ &= [X_2P_3\,, X_3P_1] + [X_3P_2\,, X_1P_3] \\ &= X_2\,\underbrace{[P_3, X_3]}_{\frac{\hbar}{i}\cdot\mathbf{1}}\,P_1 + X_1\,\underbrace{[X_3, P_3]}_{-\frac{\hbar}{i}\cdot\mathbf{1}}\,P_2 \\ &= i\,\hbar\,(X_1P_2 - X_2P_1) = i\,\hbar\,L_3 \end{aligned} \tag{3.7a}$$

und zyklisch analoge Relationen für $[L_2, L_3]$, $[L_3, L_1]$, d.h. insgesamt

$$\boxed{[L_k, L_l] = i\,\hbar\,\epsilon_{klm}\,L_m \quad \text{oder} \quad \vec{L} \times \vec{L} = i\,\hbar\,\vec{L}.} \tag{3.7b}$$

Aus diesen grundlegenden *Drehimpuls-Vertauschungsrelationen*, die sich *über das spezielle Beispiel des Einteilchen-Bahndrehimpulses hinaus als gemeinsames Charakteristikum aller (auch nichtklassischer) drehimpulsartigen Größen* erweisen werden, läßt sich die gesamte Eigenwerttheorie der Operatoren L_k entwickeln. Sie besagen zunächst, daß anders als bei den P_k sicher kein vollständiges gemeinsames Eigenfunktionensystem der drei L_k existiert. Wohl aber kann zu dem *Operator des Betragsquadrats des Bahndrehimpulses*,

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2\,, \tag{3.8}$$

und zu *einem* der drei L_k ein solches System existieren, denn nach (3.5a) ist für $k = 1$

$$\begin{aligned}[\vec{L}^2, L_1] &= [L_2^2 + L_3^2, L_1] \\ &= L_2\,[L_2, L_1] + [L_2, L_1]\,L_2 + L_3\,[L_3, L_1] + [L_3, L_1]\,L_3 \\ &= i\hbar\,[L_2\,(-L_3) + (-L_3)\,L_2 + L_3\,L_2 + L_2\,L_3] = 0\end{aligned}$$

und analoge Rechnungen für $k = 2,\ 3$ ergeben

$$[\vec{L}^2, L_k] = 0 \qquad \text{für } \ k = 1, 2, 3\,. \tag{3.9}$$

Wir versuchen im Folgenden, *für* $\vec{L}^2$ *und* L_3 (die Wahl von $k = 3$ ist Konvention) *ein System von gemeinsamen Eigenfunktionen*, d.h. Wellenfunktionen mit vollkommen scharfen Meßwerten von $\vec{L}^2$ und L_3 zugleich, zu konstruieren, und finden uns mit der „klassischen" Denkgewohnheiten zuwiderlaufenden Tatsache ab, daß dann wegen (3.7b) die Meßwerte von L_1, L_2 im allgemeinen nicht ebenfalls scharf sein können, d.h. nichtverschwindende Schwankungen haben werden.

Für diese Fragestellung ist die Darstellung der L_k in *Kugelkoordinaten* r, ϑ, φ mit

$$\vec{r} = r \cdot \hat{r}(\vartheta, \varphi) \quad , \quad \hat{r}(\vartheta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\,\cos\varphi \\ \sin\vartheta\,\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

und

$$\int d^3x = \int_0^\infty r^2 dr \underbrace{\int_0^\pi \sin\vartheta\, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi}_{=\int d^2\hat{r}} \tag{3.11}$$

und das Arbeiten mit dimensionslosen Größen l_k gemäß

$$\vec{L} = \hbar\,\vec{l} \tag{3.12}$$

zweckmäßig; man findet nämlich

$$l_1 = \frac{1}{i}\left(-\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\,\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,, \tag{3.13a}$$

$$l_2 = \frac{1}{i}\left(\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\,\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\,, \tag{3.13b}$$

$$l_3 = \frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,, \tag{3.13c}$$

und daraus gemäß (3.8)

$$\vec{l}^2 = -\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\,, \tag{3.14}$$

d.h. in diesen Koordinaten wirken die Bahndrehimpulsoperatoren nur noch auf ϑ, φ und überhaupt nicht auf r, so daß wir r in $\psi\,(r, \vartheta, \varphi)$ als für die Drehimpulsdiskussion unwichtigen festen Parameter behandeln und einfach *in einem Raum von*

Funktionen $\chi(\vartheta, \varphi)$ *von nur zwei Variablen im Bereich* $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ (Oberfläche der Einheitskugel) rechnen können.

Natürlich ist für diese Funktionen erneut zu fragen, welche von ihnen zum Hermitezitätsbereich der l_k gehören und damit physikalisch zulässig sind. Für l_3 etwa bedeutet ja die Forderung

$$(\chi_m, l_3\, \chi_n) = (l_3\, \chi_m, \chi_n) \tag{3.15}$$

für alle χ_m, χ_n mit dem Skalarprodukt

$$(\chi_1, \chi_2) = \int_0^\pi \sin\vartheta\, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\; \chi_1^*(\vartheta, \varphi)\; \chi_2(\vartheta, \varphi)\ , \tag{3.16}$$

und der Darstellung (3.13c), daß für *alle* χ_m, χ_n die bei partieller Integration entstehenden Randterme

$$\frac{1}{i}\Big[\chi_m^*(\vartheta, \varphi)\, \chi_n(\vartheta, \varphi)\Big]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \tag{3.17}$$

verschwinden müssen. Dazu muß offenbar $\chi(\vartheta, 2\pi) = e^{i\alpha}\, \chi(\vartheta, 0)$ mit einer *allen* zugelassenen Funktionen χ gemeinsamen reellen Phase α sein. Für $e^{i\alpha} \neq 1$ würde uns dies auf einen Raum mehrdeutiger Funktionen führen – $\varphi = 0$ und $\varphi = 2\pi$ sind ja derselbe Punkt. Da dies die absurde Konsequenz hätte, daß wir alle bisher konstruierten, in $\vec{r}$ und damit φ eindeutigen Wellenfunktionen verwerfen müßten, erwarten wir, daß *Funktionen mit* $e^{i\alpha} \neq 1$ *sich aus anderen Gründen ausschließen lassen werden.* Solange wir nur die Bewegung eines Teilchens mit den drei klassischen Bahnfreiheitsgraden und daher mit reinem Bahndrehimpuls betrachten, wird das tatsächlich eintreten; für Teilchen mit Spin – einem nichtklassischen Drehimpuls – werden wir später auch zu $e^{i\alpha}$ analoge Phasenfaktoren $\neq 1$ zulassen müssen.

Der Vollständigkeit halber sei noch die etwas kompliziertere Hermitezitätsbedingung für $\vec{l}^{\,2}$,

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} d\varphi \left[\sin\vartheta \left(\frac{\partial \chi_m^*}{\partial\vartheta}\, \chi_n - \chi_m^*\, \frac{\partial \chi_n}{\partial\vartheta}\right)\right]_{\vartheta=0}^{\vartheta=\pi} \\ &\qquad + \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{1}{\sin\vartheta} \left[\frac{\partial \chi_m^*}{\partial\varphi}\, \chi_n - \chi_m^*\, \frac{\partial \chi_n}{\partial\varphi}\right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} = 0\,, \end{aligned} \tag{3.18}$$

notiert, die insbesondere erfordert, daß für alle zulässigen Funktionen der Klammerausdruck im zweiten Term bei $\vartheta = 0$ und $\vartheta = \pi$ verschwindet, damit die Singularitäten des $(1/\sin\vartheta)$-Faktors kompensiert werden.

3.2 Das Spektrum der Drehimpulsoperatoren

Wir nehmen nun an, daß das simultane Eigenwertproblem

$$\vec{l}^{\,2} Y(\vartheta,\varphi) \equiv -\frac{1}{\sin^2\vartheta}\left[\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] Y(\vartheta,\varphi) = \lambda\cdot Y(\vartheta,\varphi)\,, \tag{3.19a}$$

$$l_3\, Y(\vartheta,\varphi) \equiv \frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\, Y(\vartheta,\varphi) = m\cdot Y(\vartheta,\varphi)\,, \tag{3.19b}$$

zulässige Lösungen besitzt, und fragen nach notwendigen Bedingungen, die diese Lösungen und die Eigenwerte λ, m (sie sind sicher reell wegen der Hermitezität von $\vec{l}^{\,2}$ und l_3) erfüllen müssen.

Man kann dies als ein Problem der Differentialgleichungstheorie betrachten, indem man (3.19b) durch

$$Y(\vartheta,\varphi) = F(\vartheta)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\varphi} \tag{3.20}$$

löst und die dann entstehende Form von (3.19a),

$$\left[-\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right] F(\vartheta) = \lambda\cdot F(\vartheta)\,, \tag{3.21a}$$

durch die Substitution

$$\cos\vartheta = x \quad , \quad F(\vartheta) = f(x) \tag{3.22}$$

in die lineare Dgl. zweiter Ordnung

$$\left[\frac{d}{dx}\left(\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}\right) - \frac{m^2}{1-x^2} + \lambda\right] f(x) = 0 \tag{3.21b}$$

überführt, die mit (3.18) als Randbedingung zu lösen ist. Die Lösungen dieser sog. *Legendreschen Dgl.* sind wohluntersucht. Wir schlagen jedoch einen anderen Weg ein, der sich *allein auf die Vertauschungsrelationen* (3.7b) *und die Positivität des Normierungsintegrals* (χ,χ) stützt und daher später für nichtklassische Drehimpulse (Teilchen mit Spin) übernommen werden kann. Er beginnt mit der Einführung der Operatoren

$$l_+ = l_1 + i\,l_2 \quad , \quad l_- = l_1 - i\,l_2\,, \tag{3.23a}$$

in Polarkoordinaten also

$$l_\pm = \pm\, e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} \pm i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.23b}$$

$$= \mp\, e^{\pm i\varphi}\left[\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial(\cos\vartheta)} \pm \cot\vartheta\cdot l_3\right]\,, \tag{3.23c}$$

die beide *nichthermitesch, aber ein „Paar zueinander hermitesch adjungierter" Operatoren* sind in dem Sinne, daß für alle zulässigen χ_m, χ_n

$$(\,\chi_m, l_\pm\,\chi_n) = (\,l_\mp\,\chi_m, \chi_n) \tag{3.24}$$

gelten muß. Sie haben die Vertauschungsrelationen

$$[\,l_3, l_+] = l_+ \quad , \quad [\,l_3, l_-] = -l_- \tag{3.25a}$$

$$[\,l_+, l_-] = 2\,l_3 \tag{3.25b}$$

und wegen (3.9) natürlich

$$[\,\vec{l}^{\,2}, l_+] = [\,\vec{l}^{\,2}, l_-] = 0 \tag{3.26}$$

und gestatten die beiden äquivalenten Darstellungen von $\vec{l}^{\,2}$,

$$\vec{l}^{\,2} = \begin{cases} l_+\,l_- + l_3\,(l_3 - 1) \ , \\ l_-\,l_+ + l_3\,(l_3 + 1) \ . \end{cases} \tag{3.27}$$

Ist Y eine Lösung von (3.19) zu den Eigenwerten λ, m, so gilt wegen (3.26) und (3.25a) offenbar

$$\vec{l}^{\,2}\,(l_\pm Y) \;=\; l_\pm\,(\vec{l}^{\,2} Y) = \lambda\ (l_\pm Y)\ , \tag{3.28a}$$

$$l_3\,(l_\pm Y) \;=\; (l_\pm\,l_3 \pm l_\pm)\,Y = (m \pm 1)\ (l_\pm Y)\ , \tag{3.28b}$$

d.h. $l_+\,Y$ bzw. $l_-\,Y$ sind wieder Eigenfunktionen zu demselben $\vec{l}^{\,2}$-Eigenwert λ, aber um 1 erhöhtem bzw. erniedrigtem l_3-Eigenwert m. Wegen dieser Eigenschaft heißen die $l_\pm$ *Stufenoperatoren*.

Nun ist aber bei gegebenem λ der Betrag von m beschränkt, denn die Summe von Normierungsintegralen

$$\begin{aligned}(l_1 Y, l_1 Y) + (l_2 Y, l_2 Y) &= \big(Y, {l_1}^2 Y\big) + \big(Y, {l_2}^2 Y\big) \\ &= (Y, [\,\vec{l}^{\,2} - {l_3}^2]\,Y) = \big(\lambda - m^2\big)\,(Y,Y) = \lambda - m^2\end{aligned} \tag{3.29}$$

ist sicher ≥ 0, also folgt

$$\lambda \geq 0 \qquad \text{und} \qquad m^2 \leq \lambda\ , \tag{3.30}$$

d.h. *bei festem λ ist m nach oben und unten beschränkt,*

$$k \leq m \leq l \qquad \text{mit} \qquad k^2,\ l^2 \leq \lambda\ . \tag{3.31}$$

Die Anwendung von l_+ auf $Y(m = l)$, ebenso wie die Anwendung von l_- auf $Y(m = k)$, muß deshalb die identisch verschwindende Funktion ergeben:

$$l_+\,Y(m = l) = 0 \quad , \quad l_-\,Y(m = k) = 0\ , \tag{3.32}$$

das heißt für die Normierungsintegrale nach (3.27)

$$\begin{aligned}\big(l_+\,Y(m = l)\,,\, l_+\,Y(m = l)\big) &= \big(Y(m = l)\,,\, l_-\,l_+\,Y(m = l)\big) \\ &= \big(Y(m = l)\,,\, [\,\vec{l}^{\,2} - l_3(l_3 + 1)]\,Y(m = l)\big) = \lambda - l(l + 1) = 0\end{aligned} \tag{3.33}$$

und analog

$$\big(l_-\,Y(m = k)\,,\, l_-\,Y(m = k)\big) = \lambda - k(k - 1) = 0\ . \tag{3.34}$$

Daraus folgt einerseits

$$\lambda = l(l+1) \tag{3.35}$$

und zugleich $k(k-1) = l(l+1)$, also

$$(l+k)(l-k+1) = 0$$

oder, da ja der zweite Faktor > 0 ist,

$$k = -l \quad , \quad l - k = 2l\,, \tag{3.36a}$$

also insbesondere auch

$$l \geq 0 \quad , \quad k \leq 0\,. \tag{3.36b}$$

Andererseits sieht man, daß die Bedingungen (3.32) bei festem λ nur je eine Lösung haben können, denn gäbe es z.B. zwei Funktionen $Y(m = l_1, l_2)$ mit

$$l_+\,Y(m = l_1) = 0 \quad , \quad l_+\,Y(m = l_2) = 0\,,$$

so gälte ja (3.33) für beide und ergäbe $l_1(l_1+1) = l_2(l_2+1)$ oder

$$(l_1 - l_2)(l_1 + l_2 + 1) = 0\,.$$

Aber auch die erste Ungleichung (3.36b) gälte für beide l, d.h. $l_1 + l_2 + 1 > 0$. Also muß $l_1 = l_2$ sein.

Ist nun $m = m_0$ irgend ein l_3-Eigenwert, so muß wiederholte Anwendung von l_+ auf $Y(m = m_0)$ schließlich auf das eindeutig bestimmte $Y(m = l)$, wiederholte Anwendung von l_- auf das eindeutig bestimmte $Y(m = k) = Y(m = -l)$ führen, weil nur dann kraft (3.32) die Folge abbricht – andernfalls wird schließlich die Beschränkung (3.31) verletzt. Die Eigenwerte müssen also sowohl untereinander als auch zu l und $-l$ ganzzahligen Abstand haben. Insbesondere ist

$$2l = \text{ ganze Zahl} \quad \Longrightarrow \quad l = 0,\, \frac{1}{2},\, 1,\, \frac{3}{2},\, 2, \ldots \tag{3.37}$$

und zu jedem $\lambda = l(l+1)$ sind genau die l_3-Eigenwerte

$$m = -l,\, -l+1,\, -l+2, \ldots, l-1,\, l \tag{3.38}$$

möglich.

Wir betonen, daß alle bisherigen Resultate *notwendige* Bedingungen darstellen. Wir müssen diesen Bedingungen genügende Eigenfunktionen nicht nur erst noch konstruieren, sondern auch jeweils prüfen, ob sie wirklich zulässig sind. Dabei wird sich zeigen, daß *im Falle des Bahndrehimpulses die halbzahligen l- (und damit m-) Werte keinen zulässigen Eigenfunktionen* entsprechen. Wir fassen nun zusammen:

(a) Die Eigenwerte des Operators $\vec{l}^2$ sind

$$l(l+1) \quad \text{mit} \quad l = 0,\, 1,\, 2,\, 3, \ldots \tag{3.39a}$$

(b) Der Eigenwert $l(l+1)$ ist jeweils $(2l+1)$-fach entartet; zu ihm gehört ein *„Multiplett"* von $(2l+1)$ Eigenfunktionen, die durch ihre l_3-Eigenwerte

$$m = -l,\, -l+1, \ldots,\, 0, \ldots, l-1,\, l \tag{3.39b}$$

zu unterscheiden sind.

(c) Jedes derartige Multiplett zu festem l ist *„irreduzibel"*, d.h. *jede* dazu gehörende Eigenfunktion kann durch hinreichend häufige Anwendung der Operatoren l_+, l_- bzw. l_1, l_2 in *jede* andere überführt werden (bis auf konstante Faktoren). Es gibt keine „abseitsstehenden" Eigenfunktionen. Dies können wir präzisieren, indem wir die Rechnungen (3.33) und (3.34) nun für allgemeine m wiederholen: Bezeichnen wir die Eigenfunktionen mit den Eigenwertindizes l und m, so erhalten wir wie oben

$$\begin{aligned} (l_+ Y_{lm}, l_+ Y_{lm}) &= l(l+1) - m(m+1) = (l-m)(l+m+1)\,, \\ (l_- Y_{lm}, l_- Y_{lm}) &= l(l+1) - m(m-1) = (l+m)(l-m+1)\,. \end{aligned}$$

Ist also Y_{lm} normiert, so sind die gemäß

$$l_+ Y_{lm} = +\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\; Y_{l,m+1} \tag{3.40a}$$

$$l_- Y_{lm} = +\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\; Y_{l,m-1} \tag{3.40b}$$

erhaltenen Funktionen $Y_{l,m\pm1}$ ebenfalls normiert. Die Wahl des Phasenfaktors, d.h. hier das positive Wurzelvorzeichen in (3.40), ist dabei Konvention.

3.3 Konstruktion und Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen

Der Weg zur Konstruktion der Drehimpulseigenfunktionen, die nach (3.20) die Gestalt

$$Y_{lm}(\hat{r}) \equiv Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = F_{lm}(\vartheta)\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi} \tag{3.41}$$

mit den l- und m-Werten von (3.39a/b) haben müssen, ist damit vorgezeichnet. Man beginnt bei vorgegebenem l etwa mit der Funktion $Y_{l,+l}$ mit dem höchstmöglichen m-Eigenwert (dem „Zustand höchsten Gewichts"), die man aus der Bedingung $l_+ Y_{l,l} = 0$ oder nach (3.23b)

$$\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - l \cot \vartheta \right) F_{ll}(\vartheta) = 0 \tag{3.42}$$

bestimmt. Diese Dgl. erster Ordnung hat die Lösung

$$F_{ll}(\vartheta) = N_{ll} \, \sin^l \vartheta \tag{3.43a}$$

mit einer Konstanten N_{ll}, die aus der Normierungsforderung

$$\begin{aligned}(Y_{ll}, Y_{ll}) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \, d\vartheta \, |F_{ll}(\vartheta)|^2 \\ &= |N_{ll}|^2 \int_0^{\pi} \sin^{2l+1}\vartheta \, d\vartheta = |N_{ll}|^2 \, \frac{2^{\,2l+1}\,(l!)^2}{(2l+1)!} = 1 \end{aligned} \tag{3.43b}$$

und mit konventionsbedingter Phase bestimmt wird als

$$N_{ll} = (-)^l \, \frac{1}{2^l \, l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \, . \tag{3.43c}$$

Falls die so erhaltene Funktion

$$Y_{ll}(\hat{r}) = \frac{(-)^l}{2^l \, l!} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \, (2l)!} \, \sin^l \vartheta \, e^{il\varphi} \tag{3.44}$$

und die aus ihr durch wiederholte Anwendung des Stufenoperators l_- gemäß (3.40b) entstehenden Funktionen

$$(l_-)^{l-m} Y_{ll} = \sqrt{(2l)! \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \; Y_{lm} \tag{3.45}$$

allen bisher aufgestellten Bedingungen genügen – insbesondere also die Konstruktion mit

$$(l_-)^{2l+1} Y_{ll} = 0 \tag{3.46}$$

von selbst abbricht –, stellen sie die gesuchten gemeinsamen $\vec{l}^{\,2}$-l_3-Eigenfunktionen dar. Dies tritt ein bei *ganzzahligen l-Werten*, wo sich mit

$$\begin{aligned} l_- \left[F(\vartheta)\, e^{im\varphi}\right] &= -e^{-i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial\vartheta} + m \cot\vartheta\right] F(\vartheta)\, e^{im\varphi} \\ &= e^{i(m-1)\varphi} \, \frac{1}{\sin^{m-1}\vartheta} \cdot \frac{d}{d(\cos\vartheta)} \left[\sin^m \vartheta \cdot F(\vartheta)\right] \end{aligned} \tag{3.47}$$

die Größe (3.45) geschlossen ausrechnen läßt: das Ergebnis von (3.47) hat ja wieder die Form $F'(\vartheta)\, e^{im'\varphi}$ mit

$$F'(\vartheta) = \frac{1}{\sin^{m-1}\vartheta} \cdot \frac{d}{d(\cos\vartheta)} \left[\sin^m \vartheta \cdot F(\vartheta)\right] ,$$

so daß man sofort

$$\begin{aligned} (l_-)^2 \left[F(\vartheta)\, e^{im\varphi}\right] &= l_- \left[F'(\vartheta)\, e^{i(m-1)\varphi}\right] \\ &= e^{i(m-2)\varphi} \, \frac{1}{\sin^{m-2}\vartheta} \cdot \underbrace{\frac{d}{d(\cos\vartheta)} \left[\sin^{m-1}\vartheta \cdot F'(\vartheta)\right]}_{= \frac{d^{\,2}}{d(\cos\vartheta)^2} \left[\sin^m \vartheta \cdot F(\vartheta)\right]} \end{aligned}$$

und durch Iteration nun offensichtlich

$$(l_-)^n \left[F(\vartheta)\, e^{im\varphi}\right] = e^{i(m-n)\varphi}\, \frac{1}{\sin^{m-n}\vartheta} \left(\frac{d}{d(\cos\vartheta)}\right)^n \left[\sin^m\vartheta \cdot F(\vartheta)\right] \tag{3.48}$$

erhält. Die so bestimmten sog. *normierten Kugelflächenfunktionen* oder kurz Kugelfunktionen haben die Form (3.41) mit

$$F_{lm}(\vartheta) = \frac{(-)^l}{2^l\, l!} \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \cdot \frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\; \sin^{-m}\vartheta \left(\frac{d}{d(\cos\vartheta)}\right)^{l-m} \sin^{2l}\vartheta\,. \tag{3.49}$$

Da $\sin^{2l}$ ein Polynom $2l$-ten Grades in $\cos\vartheta$ ist, ist für $m = -(l+1)$ offensichtlich (3.46) erfüllt; auch sonst genügen diese Funktionen allen aufgestellten Bedingungen.

Bei *halbzahligen l* dagegen, wo $\sin^{2l}\vartheta = (1-\cos^2\vartheta)^{l-\frac{1}{2}} \cdot \sin\vartheta$ ist, sorgt die $\cos\vartheta$-Differentiation nicht für das Abbrechen der Funktionenfolge; man erhält z.B. für $l = \frac{1}{2}$, wenn man von $Y_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\hat{r})$ gemäß (3.44) ausgeht, anstelle von (3.46)

$$(l_-)^2\, Y_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\hat{r}) = -\frac{N_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \sin^{-\frac{3}{2}}\vartheta\, e^{-i\frac{3}{2}\varphi}\,, \tag{3.50}$$

was die m-Schranke (3.31) verletzt und überdies nicht normierbar ist. Ähnliches gilt für alle halbzahligen l-Werte, die damit auszuschließen sind.–

Für die ganzzahligen l-Werte und $m \geq 0$ sind etwas anders als in (3.49) normierte Funktionen,

$$P_l^m(\vartheta) = \frac{(-)^{l+m}}{2^l\, l!} \cdot \frac{(l+m)!}{(l-m)!}\; \sin^{-m}\vartheta \left(\frac{d}{d(\cos\vartheta)}\right)^{l-m} \sin^{2l}\vartheta \quad (m \geq 0)\,, \tag{3.51}$$

als *zugeordnete Legendre-Funktionen* (erster Art) standardisiert und vertafelt. Mit ihnen schreiben sich die Kugelflächenfunktionen als

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \left\{ \begin{array}{cc} (-)^m, & m \geq 0 \\ 1\quad, & m < 0 \end{array} \right\} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\vartheta)\, e^{im\varphi}\,. \tag{3.52}$$

Wir notieren nun eine Reihe von Eigenschaften dieser Funktionen, die direkt aus der Darstellung (3.52) oder aus ihrer Konstruktion als Lösungen von (3.19) folgen:

(a) *Orthonormierung.* Als Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwertpaaren (l,m) sind die Y_{lm} ein Orthonormalsystem im Sinne von (2.78):

$$\int d^2\hat{r}\; Y^*_{l_1m_1}(\hat{r})\, Y_{l_2m_2}(\hat{r}) = \delta_{l_1l_2}\,\delta_{m_1m_2}\,. \tag{3.53}$$

(b) *Konjugationseigenschaft.* Für die komplex-konjugierten Funktionen folgt aus (3.52) sofort

$$Y^*_{lm}(\hat{r}) = (-)^m\, Y_{l,-m}(\hat{r})\,. \tag{3.54}$$

(c) *Paritätseigenschaft.* Die „Paritätsoperation" $\hat{r} \to -\hat{r}$, d.h. die Spiegelung von $\vec{r}$ am Ursprung, bedeutet in Polarkoordinaten $\vartheta \to \pi - \vartheta$ und $\varphi \to \varphi + \pi$. Dafür gilt

$$Y_{lm}(-\hat{r}) = Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-)^l \, Y_{lm}(\hat{r}) \; , \tag{3.55}$$

d.h. die Y_{lm} *sind auch „Paritätseigenfunktionen"* mit den Eigenwerten $(-)^l$. Das folgt ebenfalls aus (3.52/3.51).

(d) *Spezialfall* $m = 0$. Für $m = 0$ ergeben sich nach (3.52/3.51) die φ-unabhängigen Funktionen

$$Y_{l,0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \, P_l(\cos\vartheta) \tag{3.56}$$

mit den nur von $x = \cos\vartheta$ abhängenden sog. *Legendreschen Polynomen*

$$P_l(x) \equiv P_l^0(\vartheta) = \frac{1}{2^l \, l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l \left(x^2 - 1 \right)^l \tag{3.57}$$

(„Rodriguessche Formel"). Für sie lautet (3.53)

$$\int_{-1}^{1} dx \, P_{l'}(x) \, P_l(x) = \frac{2}{2l+1} \, \delta_{l'l} \; . \tag{3.58}$$

Sie sind nach (3.21b) Lösungen der Differentialgleichung

$$\left[\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \, \frac{d}{dx} \right) + l(l+1) \right] P_l(x) = 0 \; , \tag{3.59}$$

und zwar mit den Randwerten

$$P_l(1) = 1 \quad , \quad P_l(-1) = (-)^l \; , \tag{3.60}$$

wie aus (3.57) und (3.54) unschwer zu erschließen.

(e) *Werte an den Polen.* An den Polen der Einheitskugel, $\vartheta = 0$ und π oder $x = +1$ oder -1, verschwinden alle Funktionen mit $m \neq 0$, da sie Potenzen von $\sin\vartheta$ enthalten, und es bleibt nach (3.56/3.60)

$$Y_{lm}(0, \varphi) = (-)^l \, Y_{lm}(\pi, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \, \delta_{m,0} \; . \tag{3.61}$$

(f) *Vollständigkeit.* Die wichtigste Eigenschaft der Y_{lm}, die aus dem bisherigen nicht direkt folgt, besteht darin, daß sie ein *vollständiges Funktionensystem auf der Einheitskugel* darstellen: jede im Bereich $\{\ 0 \le \vartheta \le \pi,\ 0 \le \varphi \le 2\pi\ \}$ eindeutige und quadratintegrable Funktion läßt sich in eine Reihe nach den Y_{lm} entwickeln,

$$\chi(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\ , \tag{3.62}$$

und zwar im Sinne einer *„Konvergenz im Mittel"*, d.h. das über den ganzen ϑ-φ-Bereich integrierte Quadrat des durch Abbrechen bei $l = L$ begangenen Fehlers,

$$\int d^2\hat{r} \left| \chi(\vartheta,\varphi) - \sum_{l=0}^{L} \sum_{m} c_{lm}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \right|^2\ , \tag{3.63}$$

kann für hinreichend große L beliebig klein gemacht werden. (Die Konvergenz wird sogar eine gleichmäßige, d.h. nicht nur der integrale, sondern auch der *lokale* Fehler an jedem Punkt kann *gleichmäßig* im ganzen Bereich beliebig klein gemacht werden, wenn die Funktion $\chi(\vartheta,\varphi)$ dort beschränkt und stetig ist – eine Besonderheit, die nicht bei allen vollständigen Funktionensystemen zutrifft.) Die Koeffizienten c_{lm} sind auf Grund der Orthonormalität (3.53) wieder sofort zu bestimmen,

$$c_{lm} = \int d^2\hat{r}\ Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, \chi(\vartheta,\varphi)\ . \tag{3.64}$$

Man drückt die Vollständigkeitseigenschaft formal aus durch die Distributionsbeziehung

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\hat{r}')\, Y_{lm}(\hat{r}) = \delta^2(\hat{r}' - \hat{r}) \tag{3.65a}$$

mit

$$\delta^2(\hat{r}' - \hat{r}) = \frac{\delta(\vartheta' - \vartheta)}{\sin\vartheta}\, \delta(\varphi' - \varphi)\ . \tag{3.65b}$$

Setzt man sie nämlich in die Identität

$$\chi(\vartheta,\varphi) = \int d^2\hat{r}'\ \chi(\vartheta',\varphi')\, \delta^2(\hat{r}' - \hat{r}) \tag{3.66}$$

ein, so entsteht gerade die Entwicklung (3.62) mit (3.64) als Koeffizienten.

Die Vollständigkeitsaussage wird hier nicht bewiesen, ist jedoch überaus plausibel: Für die Variable φ bedeutet sie einfach die bekannte Entwickelbarkeit einer in φ 2π-periodischen Funktion in eine *Fourierreihe* nach den Funktionen $e^{im\varphi}$ mit ganzzahligen m. (Man denke sich $\chi(\vartheta, \varphi)$ für $|\varphi| > 2\pi$ periodisch fortgesetzt.) Für *Funktionen, die von ϑ nur über $\cos\vartheta$ abhängen, sind die $P_l(x)$ von* (3.56) *mit $x = \cos\vartheta$ ein vollständiges System*, d.h.

$$\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,P_l(x')\,P_l(x) = \delta(x'-x) = \frac{\delta(\vartheta'-\vartheta)}{\sin\vartheta}\,, \tag{3.67}$$

denn sie sind genau die Polynome, die sich durch Schmidtsche Orthogonalisierung der Potenzen $1, x, x^2 ...$ im Intervall $-1 \leq x \leq +1$ gemäß (3.58) ergeben, und die Potenzen sind bekanntlich für jedes endliche Intervall ein vollständiges System (Weierstraßscher Approximationssatz). Durch Hinzunahme der $P_l^{|m|}(\vartheta)$ mit $|m| > 0$ mit ihren $\sin\vartheta$-Potenzen schließlich wird das System vollständig im Raume beliebiger quadratintegrabler Funktionen von ϑ.

(g) *Additionstheorem.* Als einfaches Beispiel zu (3.62) betrachten wir für zwei Richtungen $\hat{r}_1 = (\vartheta_1, \varphi_1)$ und $\hat{r}_2 = (\vartheta_2, \varphi_2)$, deren Zwischenwinkel Θ_{12} gegeben ist durch

$$\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2 = \cos\Theta_{12} = \cos\vartheta_1\cos\vartheta_2 + \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\sin\vartheta_1\sin\vartheta_2\,, \tag{3.68}$$

die Aufgabe, das Legendre-Polynom $P_l(\cos\Theta_{12})$ nach den Kugelfunktionen von $\hat{r}_2$ zu entwickeln:

$$P_l\,(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) = \sum_{l'm'} c_{l'm'}(\hat{r}_1)\,Y_{l'm'}(\hat{r}_2)\,.$$

Unter Benutzung der Tatsache, daß

$$\left(l_k^{(1)} + l_k^{(2)}\right)(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) = 0\,, \quad k = 1, 2, 3 \tag{3.69}$$

mit den auf (ϑ_1, φ_1) bzw. (ϑ_2, φ_2) wirkenden Drehimpulsoperatoren $\vec{l}^{(1)}$ bzw. $\vec{l}^{(2)}$ gilt, zeigt man leicht, daß die $c^*_{l'm'}(\hat{r}_1)$ die definierenden Eigenschaften (3.19a/b) und (3.40a/b) der Kugelfunktionen $Y_{l'm'}(\hat{r}_1)$ besitzen und sich somit von ihnen höchstens im Normierungsfaktor von $c^*_{l',+l'}$ unterscheiden:

$$c^*_{l'm'}(\hat{r}_1) = b_{l'}\,Y_{l'm'}(\hat{r}_1)\,.$$

Betrachtung des Spezialfalles $\vartheta_1 = 0$, wo (3.61) gilt und $\Theta_{12} = \vartheta_2$ wird, ergibt dann wegen (3.56)

$$\begin{aligned} c^*_{l'm'}(\vartheta_1 = 0) &= \int d^2\hat{r}_2\,P_l\,(\cos\vartheta_2)\;Y_{l'm'}(\hat{r}_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,\delta_{l'l}\,\delta_{m'0} \\ &= b_{l'}\,\sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}}\,\delta_{m'0}\,, \end{aligned} \tag{3.70}$$

also $b_{l'} = \delta_{l'l} \cdot 4\pi/(2l+1)$ und somit das als „Additionstheorem der Kugelfunktionen" bekannte Resultat

$$P_l\,(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\hat{r}_1)\, Y_{lm}(\hat{r}_2)\,. \tag{3.71}$$

Die physikalische Bedeutung der Vollständigkeitseigenschaft liegt darin, daß sie für jede quadratintegrable Ortsraum-Wellenfunktion eine *Entwicklung nach gleichzeitigen Eigenfunktionen von $\vec{L}^2$ und L_3*,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi; t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{1}{r}\, f_{lm}(r;t)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{3.72}$$

ermöglicht. Die Bedeutung der Koeffizienten $1/r \cdot f_{lm}$ (die Abspaltung von $1/r$ ist bequem, da sie bei Skalarprodukt-Integralen das r^2 im Volumenelement kompensiert) wird deutlich etwa an den mit (3.72) und (3.53) leicht zu berechnenden Erwartungswerten

$$\begin{aligned}
\langle \vec{L}^2 \rangle_t &= \hbar^2\, (\psi, \vec{l}^{\,2} \psi)_t \\
&= \sum_{lm} l(l+1)\,\hbar^2 \cdot \int_0^\infty dr\, |f_{lm}\,(r;t)|^2 \;, \qquad (3.73a) \\
\langle L_3 \rangle_t &= \sum_{lm} (m\hbar) \cdot \int_0^\infty dr\, |f_{lm}\,(r;t)|^2 \;. \qquad (3.73b)
\end{aligned}$$

Sie legen erneut die am Ende von Kap. 2 erwähnte Interpretation nahe: $l(l+1)\,\hbar^2$ und $m\hbar$ als mögliche Meßwerte von $\vec{L}^2$ und L_3, $\int |f_{lm}|^2 dr$ als *„Meßwahrscheinlichkeit"* für das Auftreten des Paares (l, m) bei gleichzeitiger Messung jener beiden Meßgrößen. Ist diese Interpretation richtig, so beinhaltet sie – anders als beim Impuls – die bemerkenswerte Aussage, daß *für $\vec{L}^2$ und L_3 nicht mehr das klassische Kontinuum von Meßwerten, sondern nur noch die gemäß* (3.39a/b) *„gequantelten" Werte* bei der Einzelmessung auftreten können, da die Operatoren $\vec{l}^{\,2}$ und l_3 ein rein diskretes oder *„Punktspektrum"* von Eigenwerten aufweisen. Neu gegenüber der klassischen Mechanik, aber im Hinblick auf das Operatorpaar (X_k, P_k) mit seiner Unschärferelation (2.8) nicht mehr überraschend ist auch, daß *nicht* mehr alle drei Drehimpulskomponenten gleichzeitig scharfe Meßwerte haben können, wie es das bekannte „Vektorgerüst"-Modell suggeriert.

Die Koeffizienten $1/r \cdot f_{lm}$ in der Zerlegung (3.72), aus denen die Meßwahrscheinlichkeiten folgen, lassen sich aus ψ nach (3.64) berechnen. Die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ und der Koeffizientensatz

$$\Big\{\, f_{lm}(r) \;\Big|\; l = 0, 1, 2, \ldots\;;\; m = -l, \ldots, +l\;;\; r = 0 \ldots \infty \,\Big\} \tag{3.74}$$

bestimmen einander also umkehrbar eindeutig, ebenso wie früher $\psi(\vec{r}, t)$ und $\varphi(\vec{p}, t)$, nur daß an Stelle dreier kontinuierlicher Variabler nun zwei diskrete Indizes l, m – entsprechend dem Punktspektrum von $\vec{L}^2$ und L_3 – und eine Variable r

auftreten. (3.74) *bildet eine zur Orts- oder Impulsdarstellung völlig äquivalente „Bahndrehimpulsdarstellung"* des Bewegungszustandes zur Zeit t.

Wir sprechen von *einer* Drehimpulsdarstellung, weil sich durch Wahl der Funktionen

$$\frac{1}{r}\, f_{lm}(r)\, Y_{lm}(\hat{r}) \tag{3.75}$$

als simultane Eigenfunktionen eines dritten, auch auf r wirkenden Operators (der natürlich mit $\vec{l}^{\,2}$ und l_3 kommutieren muß) die Radialfunktionen $1/r \cdot f_{lm}(r)$ noch weiter festlegen und so verschiedene *speziellere Drehimpulsdarstellungen* definieren lassen.

3.4 Kräftefreies Teilchen in Drehimpulsdarstellung

Als Beispiel sei die Möglichkeit untersucht, (3.75) als simultane Eigenfunktionen der kinetischen Energie T zu wählen, deren Eigenwerte $(\hbar k)^2/2m,\ k = 0 \ldots \infty$, wir bereits kennen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 \left[\frac{1}{r}\, f_{lm}(r)\, Y_{lm}(\hat{r})\right] = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \left[\frac{1}{r}\, f_{lm}(r)\, Y_{lm}(\hat{r})\right] . \tag{3.76}$$

Die notwendigen Vertauschbarkeitsbedingungen dafür sind gegeben, denn aus (3.1) und (2.56a/b) folgt mit (3.5)

$$[L_k, P_l] = \epsilon_{kmn}\,[X_m, P_l]\, P_n = i\hbar\,\epsilon_{kln} P_n \tag{3.77}$$

(Summenkonvention!) und damit für $k = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} [L_k, \vec{P}^2] &= [L_k, P_l P_l] = [L_k, P_l] P_l + P_l\,[L_k, P_l] \\ &= 2i\hbar\,\epsilon_{kln} P_l P_n = 0\,, \end{aligned} \tag{3.78}$$

denn hier wird das bezüglich (l, n) symmetrische Produkt $P_l P_n$ mit den in (l, n) antisymmetrischen Koeffizienten ϵ_{kln} summiert. Also gilt $[\vec{L}, T] = 0$ und damit auch $[\vec{L}^2, T] = 0$.

Um (3.76) zu lösen, hat man zunächst ∇^2 in Polarkoordinaten darzustellen:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\, r + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] . \tag{3.79}$$

Wegen

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\, r = \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\, r\right)^2 = \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)^2 \tag{3.80}$$

heißt dies nach (2.62) und (3.14)

$$\vec{P}^{2\,(x)} = \left\{P_r^2 + \frac{1}{r^2}\,\vec{L}^2\right\}^{(x)} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\, r\right)^2 - \frac{1}{r^2}\,\vec{l}^{\,2}\right] . \tag{3.81}$$

Wir haben also die Dgl.

$$\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r - \frac{1}{r^2}\,\vec{l}^{\,2} + k^2\right]\frac{1}{r}\,f_{lm}(r)\,Y_{lm}(\hat{r}) = 0 \tag{3.82}$$

zu lösen; wegen

$$\vec{l}^{\,2}\,Y_{lm}(\hat{r}) = l(l+1)\,Y_{lm}(\hat{r}) \tag{3.83}$$

führt das auf die gewöhnliche Dgl.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] f_{lm}(r) = 0\ . \tag{3.84}$$

Sie hängt nicht von m ab. In der dimensionslosen Variablen

$$\rho = k \cdot r \tag{3.85}$$

kann also $f_{lm}(r) \to f_l(\rho)$ ersetzt werden mit der Dgl.

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f_l(\rho) = 0\ . \tag{3.86}$$

Als *Randbedingung* werden wir die Normierbarkeit zunächst nicht fordern, da wir (von der Analogie zu den ebenen Wellen her) auf Grund des kontinuierlichen Spektrums von T vermuten, daß sich *„uneigentliche", nichtnormierbare Eigenfunktionen* ergeben werden. Dagegen ist die Forderung, daß $f_{lm}(r)$ *im Hermitezitätsbereich von* $P_r^{(x)} = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\,r$ liegen soll, nach Übergang zu Polarkoordinaten erneut zu stellen. Der in (2.65) bereits berechnete Hermitezitätsdefekt wird in Polarkoordinaten mit (2.60) zu

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar}{i}\int_0^\infty r^2 dr \int d^2\hat{r}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right)\left[\frac{1}{r}\,f_{l'm'}(r)\,Y_{l'm'}(\hat{r})\right]^*\left[\frac{1}{r}\,f_{lm}(r)\,Y_{lm}(\hat{r})\right] \\
&\quad = \left\{\frac{\hbar}{i}\int_0^\infty dr\,\frac{\partial}{\partial r}\left|f_{lm}(r)\right|^2\right\}\delta_{l'l}\,\delta_{m'm}\ .
\end{aligned} \tag{3.87}$$

Von den hieraus resultierenden Forderungen

$$\Big[f_{lm}(r)\Big]_{r\to\infty} \to 0 \quad , \quad f_{lm}(r=0) = 0 \tag{3.88}$$

wird sich die erste, wie etwa auch die Hermitezitätsbedingungen für $P_{1,2,3}$ bei den ebenen Wellen, mit den erwarteten uneigentlichen Eigenfunktionen noch nicht, sondern erst mit geeigneten Superpositionen (Paketbildungen) erfüllen lassen. *Die zweite dagegen ist auch bei Superposition im allgemeinen nur zu erfüllen, wenn bereits jede Basisfunktion ihr genügt*, und ist deshalb auch für uneigentliche Lösungen aufrechtzuerhalten. Wir haben also die Randbedingung

$$f_l(\rho = 0) = 0\ . \tag{3.89}$$

Die Dgl. (3.86) hat nun für $l = 0$ die Fundamentallösungen $\cos\rho$ und $\sin\rho$; für $l \neq 0$ sind, wie man leicht nachrechnet, die sog. *Riccati-Bessel-Funktionen*

$$\hat{n}_l(\rho) = \rho^{l+1}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right), \tag{3.90a}$$

$$\hat{\jmath}_l(\rho) = \rho^{l+1}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \tag{3.90b}$$

Lösungen und bilden auch ein Fundamentalsystem, weil

$$W_l = \begin{vmatrix} \hat{n}_l(\rho) & \hat{\jmath}_l(\rho) \\ d\hat{n}_l(\rho)/d\rho & d\hat{\jmath}_l(\rho)/d\rho \end{vmatrix} = 1 \quad \text{f. alle } l,\rho \tag{3.91}$$

ist. Man sieht dies (da für zwei Lösungen einer linearen Dgl. 2. Ordnung W_l bekanntlich unabhängig von ρ ist) am schnellsten an den asymptotischen Formen für $r \to \infty$: Dort wird in (3.90a/b) offenbar der Term führend, bei dem alle Differentationen nur auf $\cos\rho$ bzw. $\sin\rho$ wirken, und man erhält

$$\hat{n}_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \left(-\frac{d}{d\rho}\right)^l \cos\rho = \cos\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right), \tag{3.92a}$$

$$\hat{\jmath}_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \left(-\frac{d}{d\rho}\right)^l \sin\rho = \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{3.92b}$$

und damit (3.91). Oft wird auch das Fundamentalsystem benutzt, das aus den komplexen Linearkombinationen

$$\hat{h}_l^{(\pm)}(\rho) = \hat{n}_l(\rho) \pm i\,\hat{\jmath}_l(\rho), \tag{3.93}$$

den sog. *Riccati-Hankel-Funktionen*, mit der Asymptotik

$$\hat{h}_l^{(\pm)}(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} e^{\pm i\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right)} = i^{\mp l}\, e^{\pm i\rho} \tag{3.94}$$

besteht. Für unsere Zwecke ist aber (3.90) geeigneter, weil diese Funktionen sich für $\rho \to 0$ wie

$$\hat{n}_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} \frac{(2l-1)!!}{\rho^l}, \tag{3.95a}$$

$$\hat{\jmath}_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} \frac{\rho^{l+1}}{(2l+1)!!}, \tag{3.95b}$$

verhalten und daher die Randbedingung (3.89) einfach durch Ausscheiden des $\hat{n}_l$-Terms in der allgemeinen Lösung zu befriedigen ist. Unsere *gemeinsamen Eigenfunktionen zu T, $\vec{L}^2$, L_3 mit den Eigenwerten $\hbar^2k^2/2m$, $\hbar^2 l(l+1)$ und $\hbar m$* sind also[2]

$$const. \times \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr} \cdot Y_{lm}(\hat{r}); \tag{3.96}$$

[2]Statt $\hat{\jmath}_l$ und $\hat{n}_l$ werden oft auch die „sphärischen Besselfunktionen“ $j_l(\rho) = \hat{\jmath}_l(\rho)/\rho$, $n_l(\rho) = -\hat{n}_l(\rho)/\rho$ benutzt.

sie bilden die Basisfunktionen einer speziellen Drehimpulsdarstellung, bei der jede quadratintegrable Wellenfunktion durch den Koeffizientensatz $\{c_{lm}(k;t)\}$ in der Entwicklung

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{lm} \int_0^\infty k^2 dk\, c_{lm}(k,t) \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr}\, Y_{lm}(\hat{r}) \right\} \tag{3.97}$$

umkehrbar eindeutig charakterisiert wird. Die Interpretation der $|c_{lm}(k,t)|^2$ ist nach dem früher Gesagten klar.

Natürlich erfordert (3.97) eine Vollständigkeits- , die „Umkehrung", d.h. Bestimmung der $c_{lm}(k;t)$, eine Orthogonalitätseigenschaft der $\hat{\jmath}_l(kr)$. Sie folgen am leichtesten durch Betrachtung einer speziellen Entwicklung, nämlich der der *ebenen Welle*: Hier benötigen wir noch keine Vollständigkeitseigenschaft, weil $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ selbst Eigenfunktion von T zum Eigenwert $\hbar^2 k^2/2m$ ist und somit in seiner Entwicklung nur ein einziger k-Wert, $k = |\vec{k}|$, auftreten kann. Betrachten wir zunächst den Fall $\hat{k} = \hat{e}_3$, so ist also

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr}\, P_l(\cos\vartheta)\ , \tag{3.98}$$

da die Funktion unabhängig von φ ist und somit nur die $m = 0$ - Basisfunktionen (3.56) enthalten kann. (3.58) gibt

$$c_l\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr} = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} e^{ikrx} P_l(x)\, dx\ . \tag{3.99}$$

Den Koeffizienten c_l bestimmt man, indem man etwa die Asymptotik der rechten Seite für $kr \to \infty$ mit (3.92b) vergleicht. Durch partielle Integration wird

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} e^{ikrx} P_l(x)\, dx \;=\; \frac{1}{2ikr} \left[e^{ikrx} P_l(x) \right]_{x=-1}^{x=+1} - \frac{1}{2ikr} \int_{-1}^{+1} e^{ikrx} P_l'(x)\, dx\ . \tag{3.100}$$

Durch Wiederholung dieses Schrittes sieht man, daß der zweite Term mindestens wie $(kr)^{-2}$ geht, so daß der erste Term für $kr \to \infty$ führend ist. Er ist aber nach (3.60)

$$\frac{1}{kr} \left\{ \frac{1}{2i} \left[e^{ikr} - (-)^l e^{-ikr} \right] \right\} = \frac{i^l}{kr}\, \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} \right)\ . \tag{3.101}$$

Vergleich mit (3.92b) gibt $c_l = i^l(2l+1)$ und somit

$$e^{ikr\cos\vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l\, (2l+1)\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr}\, P_l(\cos\vartheta)\ . \tag{3.102}$$

Für allgemeine $\hat{k}$-Richtung hat man lediglich $\cos\vartheta$ durch $\cos\Theta = \hat{k}\cdot\hat{r}$ zu ersetzen und das Additionstheorem (3.71) anzuwenden und findet

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{lm} \hat{\jmath}_l(kr)\, i^l\, Y^*_{lm}(\hat{k})\, Y_{lm}(\hat{r})\ . \tag{3.103}$$

Setzt man dies in die verallgemeinerte Orthonormierungsrelation (2.84) der ebenen Wellen ein und benutzt (3.53), (3.65a) und

$$\delta^3(\vec{k'} - \vec{k}) = \frac{\delta(k' - k)}{k'k}\, \delta^2(\hat{k'} - \hat{k}) \, , \tag{3.104}$$

so erhält man eine entsprechende *δ-Orthonormierungsrelation der Riccati-Bessel-Funktionen,*

$$\int_0^\infty dr\, \hat{\jmath}_l(k'r)\, \hat{\jmath}_l(kr) = \frac{\pi}{2}\, \delta(k' - k) \, , \tag{3.105}$$

die nun einerseits die Koeffizienten in (3.97) zu bestimmen gestattet,

$$c_{lm}(k,t) = \int d^3r\, \psi(\vec{r},t) \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr}\, Y^*_{lm}(\hat{r}) \, , \tag{3.106}$$

andererseits mit umbenannten Variablen in der Form

$$\int_0^\infty dk \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \hat{\jmath}_l(kr') \right] \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \hat{\jmath}_l(kr) \right] = \delta(r' - r) \tag{3.107}$$

die Vollständigkeit des Systems der Funktionen $\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \hat{\jmath}_l(kr)$ mit $k = 0 \ldots \infty$ feststellt und den in (3.97) abgespaltenen Faktor $\sqrt{\frac{2}{\pi}}$ begründet. – Entwicklungen vom Typus (3.72) oder spezieller (3.97) werden ein wesentliches Hilfsmittel für die Behandlung der Streuung eines Teilchens an Zentralkraftfeldern (vgl. Teil IV) bilden.

Kapitel 4

Die Schrödingersche Wellengleichung

4.1 Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Kraftfeld

Die Aufgabe, die Zeitentwicklung der Wellenfunktion $\psi(\vec{r},t)$ (oder $\varphi(\vec{p},t)$ oder $f_{lm}(r,t)$ oder $c_{lm}(k,t)$ usw.) zu beschreiben, hatten wir bisher nur im kräftefreien Fall durch die expliziten Formeln (2.6) gelöst. Sie haben die bemerkenswerte Eigenschaft, daß *aus* $\psi(\vec{r},t=0)$ *allein* $\psi(\vec{r},t)$ *für spätere Zeiten eindeutig vorausberechenbar* ist, denn aus $\psi(\vec{r},0)$ erhält man durch Fouriertransformation $\varphi_0(\vec{p})$, das gemäß (2.6b) $\psi(\vec{r},t)$ auch für $t \neq 0$ festlegt.

Für den allgemeineren Fall eines *Teilchens im konservativen Kraftfeld* $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$ mit der potentiellen Energie $V = V(\vec{r})$ suchen wir nun – zunächst in der Ortsdarstellung – eine *Wellengleichung*, die gemeinsam mit den verschiedenen bisher aufgefundenen Randbedingungen die raumzeitliche Entwicklung von ψ festlegt. Bei ihrer (heuristischen!) Konstruktion leiten uns folgende Gesichtspunkte:

(a) Die Wellengleichung soll *linear* sein, damit für ihre Lösungen das Superpositionsprinzip gilt;

(b) sie soll wie im Falle $\vec{F} = 0$ die Berechnung von $\psi(\vec{r},t)$ *allein aus* $\psi(\vec{r},0)$, also ohne Vorgabe z.B. von $(\partial\psi/\partial t)_{t=0}$ gestatten.– Aus (a) und (b) folgt bereits, daß die Gl. eine lineare Dgl. 1. Ordnung in der Zeit sein und die allgemeine Form

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r},t) = A^{(x)}\,\psi(\vec{r},t) \tag{4.1}$$

mit einem *linearen* Operator A haben muß.

(c) Die Gleichung soll die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit gemäß Gl. (1.14) gewährleisten.

Da die Gl. für den kräftefreien Fall $\vec{F} \equiv 0$ auf die Lösung (2.6) zurückführen muß, bilden wir zur Auffindung des Operators A zunächst für (2.6)

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \int d^3k\ (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\ g(\vec{k})\ \left[-i\,\frac{\hbar k^2}{2m}\right]\ e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)t\right)} \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2\right]\int d^3k\ (2\pi)^{-\frac{3}{2}} g(\vec{k})\ e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)t\right)}\ .\end{aligned}$$

Gl. (4.1) nimmt also in diesem Fall die Gestalt

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = T^{(x)}\,\psi(\vec{r},t) \tag{4.2}$$

mit dem Operator $T = \vec{P}^2/2m$, d.h. dem Operator der als Funktion des Impulses ausgedrückten Energie des Teilchens an.

Für Teilchen in Kraftfeldern ist die als Funktion des Impulses und der Koordinaten ausgedrückte Energie klassisch gegeben durch die *Hamiltonfunktion* $H = H(\vec{p},\vec{r},t)$, die im nichtrelativistischen Fall die allgemeine Form

$$H = H\,(\vec{p},\vec{r},t) = T(\vec{p}^{\,2}) + V(\vec{p},\vec{r},t) \tag{4.3}$$

hat. Es liegt deshalb nahe, als Verallgemeinerung von (4.2) die *„zeitabhängige Schrödinger-Gleichung"*

$$\boxed{i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = H^{Op}\,\psi} \tag{4.4}$$

als dynamische Grundgleichung für die Wellenfunktion zu postulieren (Schrödinger 1926). Dabei ist $H^{Op} = H^{Op}(\vec{P}^{Op},\vec{X}^{Op})$ der – nötigenfalls durch Symmetrisierungen wie bei (2.62) – *hermitesche* Operator zur klassischen Hamiltonfunktion (4.3) mit

$$\left(\psi_k, H^{Op}\,\psi_l\right) = \left(H^{Op}\psi_k, \psi_l\right)\ . \tag{4.5}$$

Der *„Hamilton-Operator" bestimmt den Zeitablauf des quantenmechanischen Bewegungszustandes.*

Ist $V = V(\vec{r}\,)$ unabhängig von $\vec{p}$, so ist das Rechnen in der Ortsdarstellung, wo $V(\vec{r}\,)$ gemäß (2.50) ein reiner Multiplikationsoperator zugeordnet ist, naheliegend; (4.4) lautet dann

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\vec{r}\,)\right]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r},t).} \tag{4.6}$$

Daß diese Wellengl. die Forderung (c) erfüllt, ist mit (4.4) und (4.5) sofort nachzurechnen, doch gibt diese formale Rechnung wenig Einblick in die *zusätzlich zur Quadratintegrabilität zu fordernden Randbedingungen für die Wellenfunktion in speziellen Darstellungen*, die nötig sind, damit (1.14), (4.5) überhaupt gültig sind und die darin auftretenden Integrale vom Skalarprodukttyp existieren. Wir betrachten deshalb speziell (4.6). Multiplikation dieser Gl. mit ψ^* und der konjugiert-komplexen Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V^*(\vec{r}\,)\right]\psi^*(\vec{r},t) = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi^*(\vec{r},t)\,. \tag{4.7}$$

mit ψ und Subtraktion ergibt

$$\begin{aligned} i\hbar\left(\psi^*\,\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\,\psi\right) &= \psi^*\,(V - V^*)\,\psi \qquad (4.8)\\ &+ i\hbar\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)\left\{\left[\vec{\nabla}(\psi^*\,\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi)\right] - \left[\vec{\nabla}(\psi\,\vec{\nabla}\psi^*) - (\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}\psi^*)\right]\right\}. \end{aligned}$$

Da $V(\vec{r}\,)$ in diesem Falle eine rein reelle Funktion ist, fällt der $(V - V^*)$ -Term weg, und man erhält

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\right] + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}\,(\vec{r},t) = 0 \tag{4.9}$$

mit der in (2.37b/2.38) bereits aufgetretenen *„Wahrscheinlichkeits-Stromdichte"* im Ortsraum,

$$\begin{aligned} \vec{j}\,(\vec{r},t) &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\,\vec{\nabla}\psi - \psi\,\vec{\nabla}\psi^*\right) && (4.10a)\\ &= \mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{1}{m}\,\vec{P}\right)\psi\right] = \vec{j}\,[\psi]\,. && (4.10b) \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeitserhaltung gestattet also *im Falle der Gl.* (4.6) auch eine *lokale* Formulierung in der von klassischen Kontinuumstheorien her gewohnten Gestalt einer *Kontinuitätsgleichung*. Um die globale Erhaltung zu prüfen, integriert man (4.9) über den Raum und wendet auf den $\vec{\nabla}\cdot\vec{j}$ -Term den Gaußschen Satz an:

$$\frac{d}{dt}\left\{\int d^3x\;\psi^*\psi\right\} = -\lim_{R\to\infty}\,R^2\cdot\int d^2\hat{r}\,\left[\vec{j}\,(R\cdot\hat{r},t)\cdot\hat{r}\right]. \tag{4.11}$$

Um (1.14) zu erhalten, müssen wir also von der Wellenfunktion fordern, daß sie nicht nur quadratintegrabel sei, sondern auch für $|\vec{r}\,| \to \infty$ hinreichend rasch abfalle, um

$$\lim_{R\to\infty}\left\{R^2\cdot\mathrm{Re}\int d^2\hat{r}\;\psi^*(R\cdot\hat{r},t)\,\frac{1}{m}\,P_r\,\psi(R\cdot\hat{r},t)\right\} = 0 \tag{4.12}$$

zu gewährleisten. Damit ist auch unsere Anmerkung am Ende von Abschnitt 1.3 betreffend das asymptotische Verhalten normierbarer Wellenfunktionen nun begründet.

Aus der Interpretation von $\psi^*\psi$ und $\vec{j}$ als Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. -stromdichte folgt überdies, daß sie bei physikalisch sinnvollen Lösungen keine

Sprünge haben dürfen, d.h.[1]

$$\psi(\vec{r},t) \quad \text{und} \quad \vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) \quad \text{stetig in } \vec{r}\,, \tag{4.13}$$

eine Randbedingung, die wesentlich wird, wenn die Potentialfunktion $V(\vec{r})$ in (4.6) Unstetigkeiten aufweist.

Natürlich kann (4.6) auch im *Impulsraum* als

$$\left[\frac{1}{2m}\vec{P}^2 + V(i\hbar\vec{\nabla}_p)\right]\varphi(\vec{p},t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\varphi(\vec{p},t) \tag{4.14a}$$

geschrieben werden; ist V eine kompliziertere Funktion, so ist die zu (2.32/2.33) analoge Formulierung

$$\left(\frac{1}{2m}\vec{P}^2\right)\varphi(\vec{p},t) + \int d^3p'\,\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,')\,\varphi(\vec{p}\,',t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\varphi(\vec{p},t) \tag{4.14b}$$

als lineare Integralgleichung „vom Faltungstyp“, d.h. mit dem nur von der Differenz $\vec{p}-\vec{p}\,'$ abhängenden Kern

$$\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,') = (2\pi\hbar)^{-3}\int d^3r\;V(\vec{r}\,)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\cdot\vec{r}} \tag{4.14c}$$

vorzuziehen. Für die „*Bahndrehimpulsdarstellung*“ (3.72) würde man durch Kugelfunktionsentwicklung der beiden Seiten von (4.6) die Gleichungen

$$\begin{aligned}\sum_{l'm'}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\delta_{l'l}\,\delta_{m'm} + V_{lm,l'm'}(r)\right\}&\\ \times\; f_{l'm'}(r;t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,f_{lm}(r;t)\,,&\end{aligned} \tag{4.15a}$$

d.h. statt einer partiellen Dgl. in drei Variablen einen unendlichen Satz von gewöhnlichen Dgl. erhalten, die im allgemeinen (d.h. bei nicht kugelsymmetrischem Potential) durch die Größen

$$V_{lm,l'm'}(r) = \int d^2\hat{r}\;Y^*_{lm}(\hat{r})\,V(\vec{r}\,)\,Y_{l'm'}(\hat{r}) \tag{4.15b}$$

miteinander verkoppelt sind. Alle diese Darstellungen der Dynamik sind äquivalent.

Anmerkung:

Es ist offensichtlich, daß wir durch Postulierung von (4.4) als grundlegende Bewegungsgleichung eine mit rein reellen Wellenfunktionen arbeitende Quantenmechanik endgültig ausgeschlossen haben. Gl. (4.6) etwa wird wegen des Faktors $i\hbar$ rechter Hand durch rein reelle Funktionen nicht gelöst. Die Rechtfertigung von (4.4) liegt – wie bei jeder physikalischen Theorie – letztlich nur in ihrer Leistung bei der einheitlichen Erklärung des Erfahrungsmaterials der Mikropysik.

[1] Eine Ausnahme: Bei Vorliegen „pathologischer“ Potentiale, die z.B. δ-distributionsartig sind oder unendlich hohe Sprünge aufweisen, müssen an den betreffenden Stellen Unstetigkeiten in $\vec{\nabla}\psi$ zugelassen werden, die sich aber in der Stromdichte (4.10) herausheben.

4.2 Stationäre Zustände; Spektrum von H

Ist der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig, d.h.

$$\frac{\partial H}{\partial t} \equiv 0\,, \tag{4.16}$$

wie es z.B. bei Gl. (4.6) zutrifft, so kann man nach „stehenden Wellen", d.h. Lösungen der Form

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}\,)\,\chi(t) \quad ; \quad \chi(0) = 1\,, \tag{4.17}$$

fragen. Das übliche Separationsverfahren ergibt dafür als notwendige Bedingung

$$\frac{i\hbar \frac{d}{dt}\chi(t)}{\chi(t)} \equiv \frac{H^{(x)}\,\psi(\vec{r}\,)}{\psi(\vec{r}\,)} \equiv E \tag{4.18}$$

mit einer Separationskonstanten E der Dimension Energie. Daraus folgt für die Zeitabhängigkeit

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,, \tag{4.19}$$

während der ortsabhängige Faktor $\psi(\vec{r}\,)$ zugleich die *„zeitunabhängige Schrödingergleichung"*

$$H\,\psi = E\,\psi \tag{4.20}$$

erfüllen muß, die nichts anderes als das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators H darstellt. Sie ist durch die jeweils relevanten *Randbedingungen* zu ergänzen.

Die bei physikalischen Systemen auftretenden *Eigenwertspektren von H* und die zugehörigen Eigenfunktionensysteme sind – entsprechend der Vielzahl der möglichen Wechselwirkungsterme $V(\vec{P},\vec{X},t)$ – überaus vielgestaltig; es wird eine Hauptaufgabe der Vorlesung sein, durch Studium verschiedener Modellsysteme einen Überblick über die wichtigsten Typen von Spektren zu gewinnen. Hier konstatieren wir nur – vorwegnehmend – einige wesentliche allgemeine Züge:

(a) Die Eigenwerte sind alle *reell*. Sie sind häufig *entartet*; zu einem Eigenwert gehören dann mehrere linear unabhängige Eigenfunktionen.

(b) Da kein physikalisches System beliebig tiefe Energiewerte annehmen kann, muß bei physikalisch akzeptablen Hamiltonoperatoren das Spektrum nach unten beschränkt sein (*Stabilitätsbedingung*), d.h. es gibt ein E_0 mit

$$E \geq E_0 \quad \text{f. alle } E\,. \tag{4.21}$$

Der tiefste Energieeigenwert E_0 ist bei Systemen endlichen Freiheitsgrades im allgemeinen nichtentartet; die zugehörige Eigenfunktion stellt den *„Grundzustand"* des Systems dar.

(c) Oberhalb von E_0 kann das Spektrum aus diskreten, isolierten Punkten E_n, $n = 1, 2, 3, \ldots$ bestehen (*diskretes oder Punktspektrum*), die auch Häufungspunkte haben können – bei *rein* diskretem Spektrum ist stets $+\infty$ ein solcher Häufungspunkt, d.h. für $n \to \infty$ wächst E_n unbegrenzt. Die zugehörigen Eigenfunktionen ψ_n *sind normierbar* und liegen im Hermitezitätsbereich von H; sie können, wie in Abschn. 2.5 diskutiert, o.B.d.A. als orthonormiert angenommen werden:

$$(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn} \,. \tag{4.22a}$$

(d) Andererseits kann, wie wir am Beispiel des kräftefreien Teilchens mit $H = T$ sahen, das Spektrum auch ein rein *kontinuierliches oder Streckenspektrum* sein. Es kann den gesamten Bereich $E_0 \leq E < \infty$ überdecken oder in endlich oder abzählbar viele Teilstrecken („Energiebänder") zerfallen. Wir zählen in diesem Falle die Eigenwerte durch einen kontinuierlichen *„Spektralparameter"* ν ab, der o.B.d.A. von 0 bis $+\infty$ laufe. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind, wie das Beispiel der ebenen Wellen zeigt, *uneigentliche Eigenfunktionen*, d.h. nicht normierbar und auch nicht im Hermitezitätsbereich von H. Für sie ist in Analogie zu (2.84) lediglich die „Orthonormierung auf Deltafunktionen"

$$(\psi_{\nu'}, \psi_\nu) = \delta(\nu' - \nu) \tag{4.22b}$$

erreichbar. Ihre Bedeutung liegt darin, daß aus ihnen durch Superposition mit quadratintegrablen Gewichtsfunktionen zulässige Wellenfunktionen (*„Pakete"*) aufgebaut werden können, die dann natürlich nicht mehr Lösung von (4.20) und somit *nichtstationär*, wohl aber Lösungen der *zeitabhängigen* Schrödingergleichung (4.4) sind.

(e) Im allgemeinen Fall treten beide Typen von Spektren zugleich auf derart, daß unterhalb einer gewissen *„Kontinuumsschwelle"* E_C diskrete Eigenwerte vorliegen, die sich auch gegen E_C hin häufen können, während oberhalb von E_C ein Kontinuum von Eigenwerten liegt. Die beiden Spektralbereiche sind dann identisch mit denjenigen, in denen das zugehörige klassisch-mechanische Problem räumlich beschränkte, *„gebundene"* Trajektorien $(E < E_C)$ bzw. ins Unendliche reichende Bahnen $(E \geq E_C)$ aufweist. In diesem Falle sind nach der Überlegung von Gl. (2.72b/2.73)[2] alle Eigenfunktionen zu Kontinuumseigenwerten zu allen „gebundenen" Eigenfunktionen orthogonal:

$$(\psi_n, \psi_\nu) = 0 \quad \text{f. alle} \quad (E_n < E_C,\, E_\nu \geq E_C) \,. \tag{4.22c}$$

(f) Eine Eigentümlichkeit der Quantenmechanik ist, daß –wenn auch nur bei idealisierten Modellhamiltonoperatoren – *„gebundene Zustände im Kontinuum"* auftreten können, d.h. isolierte E-Werte *oberhalb* E_C, zu denen außer den uneigentlichen auch eine Anzahl von normierbaren Eigenfunktionen existieren. Sie sind

[2] Das dort auftretende Skalarprodukt ist zunächst für zwei quadratintegrable Funktionen definiert; es existiert jedoch auch dann noch, wenn nur einer der beiden Faktoren asymptotisch schnell fallend, der andere uneigentlich ist.

jedoch stets extrem *instabil*, d.h. jede noch so kleine „Störung“ von H (die bei realistischen Problemen stets vorhanden ist) macht das Spektrum zu einem gewöhnlichen Kontinuum, das jedoch in der Umgebung der vorher ausgezeichneten Energien noch gewisse meßbare Anomalien („Resonanzen“) aufweist.

(g) Allen physikalisch sinnvollen Hamiltonoperatoren gemeinsam ist jedoch, daß die Gesamtheit der Eigenfunktionen ein *vollständiges System* bilden derart, daß jede den Randbedingungen genügende Wellenfunktion $\psi(\vec{r},t)$ im Sinne der Konvergenz im Mittel nach ihnen entwickelt werden kann:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\,\psi_n(\vec{r}\,) + \int_0^\infty d\nu\; c_\nu(t)\,\psi_\nu(\vec{r}\,)\;. \tag{4.23}$$

Dabei geben die Größen

$$|c_n(t)|^2 \quad \text{bzw.} \quad |c_\nu(t)|^2 d\nu \tag{4.24}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür an, bei einer Energiemessung zur Zeit t den Eigenwert E_n bzw. einen Eigenwert im Intervall $E_\nu \ldots E_{\nu+d\nu}$ zu finden. Sie können kraft der Orthonormierung (4.22) aus

$$c_{n,\nu}(t) = \int d^3x'\;\psi^*_{n,\nu}(\vec{r}\,')\,\psi(\vec{r}\,',t) = \big(\psi_{n,\nu},\psi(t)\big) \tag{4.25}$$

berechnet werden, wobei die letztere Schreibweise ihren *darstellungsunabhängigen* Charakter betont.

Die Entwicklung (4.23/4.25) – d.h. die Kenntnis des Spektrums und des Eigenfunktionensystems von H – verhilft jedoch darüber hinaus auch zur *Lösung des Zeitentwicklungsproblems*: Soll (4.23) Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung sein, so braucht man lediglich die Koeffizienten als

$$c_{n,\nu}(t) = c_{n,\nu}(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n,\nu}\cdot t} \tag{4.26}$$

zu wählen. Bestimmt man $c_{n,\nu}(0)$ gemäß (4.25) (mit $t=0$) und setzt in (4.23) ein, so erhält man die geschlossene formale Lösung von (4.4) in der Form

$$\psi(\vec{r},t) = \int d^3x'\;\mathcal{G}(\vec{r},\vec{r}\,';t)\,\psi(\vec{r}\,',0)\;, \tag{4.27}$$

d.h. als lineare „Zeitentwicklungs-Transformation“, deren Integralkern

$$\mathcal{G}(\vec{r},\vec{r}\,';t) = \sum_n \psi_n(\vec{r}\,)\,\psi^*_n(\vec{r}\,')\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} + \int_0^\infty d\nu\;\psi_\nu(\vec{r}\,)\,\psi^*_\nu(\vec{r}\,')\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu t} \tag{4.28}$$

als *exakte Greensche Funktion oder Propagator* des Systems bezeichnet wird. Die Greensche Funktion ist, wie unmittelbar zu sehen, Lösung von

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\mathcal{G}(\vec{r},\vec{r}\,';t) = 0\;, \tag{4.29}$$

und zwar mit dem distributionsartigen Anfangswert

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}\,'; 0) = \delta(\vec{r}\,' - \vec{r}) , \tag{4.30}$$

denn für $t = 0$ wird ja die rechte Seite von (4.28) zu der linken Seite der *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_n \psi_n(\vec{r}\,)\, \psi_n^*(\vec{r}\,') + \int_0^\infty d\nu\; \psi_\nu(\vec{r}\,)\, \psi_\nu^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \tag{4.31}$$

für die Energieeigenfunktionen. In (4.27) ist die Determiniertheit von $\psi(\vec{r}, t \neq 0)$ durch $\psi(\vec{r}, 0)$, die wir gefordert hatten, manifest.

Anmerkung:

Die obigen Gleichungen berücksichtigen den Fall entarteter Eigenwerte nicht explizit; man kann ihn aber leicht einbeziehen, wenn man n und ν als jeweils einen ganzen *Satz von Indizes („Quantenzahlen")* auffaßt, der außer dem Index des Energieeigenwertes auch die weiteren, zur Abzählung der entarteten Eigenfunktionen benötigten umfaßt. Im allgemeinen werden dies die Eigenwerte weiterer, mit H kommutierender Operatoren sein, zu denen die ψ_n, ψ_ν gemeinsame Eigenfunktionen sind.

4.3 Teilchen im elektromagnetischen Feld

Als ein über Gl. (4.6) hinausgehendes Beispiel für allgemeine $\vec{p}$- und t-abhängige Wechselwirkungsterme wie in (4.3) behandeln wir die Quantenmechanik eines geladenen Teilchens (Ladung q), das sich in einem äußeren, räumlich und zeitlich veränderlichen, klassischen elektromagnetischen Feld bewegt. Das Feld werde beschrieben durch die elektromagnetischen Potentiale

$$\phi(\vec{r}, t) \quad , \quad \vec{A}(\vec{r}, t) , \tag{4.32}$$

aus denen sich die meßbaren Feldstärken gemäß

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad , \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{4.33}$$

berechnen lassen. In der klassischen Mechanik ist dann als Hamilton-Funktion für das Teilchen bekanntlich

$$H(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{1}{2m}\left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t)\right]^2 + q\phi(\vec{r}, t) \tag{4.34}$$

anzusetzen, denn genau diese Hamilton-Funktion gibt als kanonische Gleichungen

$$\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad , \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k} \qquad (k = 1, 2, 3) \tag{4.35}$$

für den klassischen Systempfad $\{x_k(t),\, p_k(t),\, k = 1,2,3\}$ im Phasenraum die Gleichungen

$$m\frac{dx_k}{dt} = p_k(t) - qA_k(\vec{r},t)\,, \tag{4.36}$$

$$\frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial(q\phi)}{\partial x_k}(\vec{r}\,(t),t) + \frac{q}{m}\Big[p_l(t) - qA_l(\vec{r}\,(t),t)\Big]\cdot\frac{\partial A_l}{\partial x_k}(\vec{r}\,(t),t)\,, \tag{4.37}$$

von denen die erste den bei Anwesenheit eines Magnetfeldes bekanntlich modifizierten Zusammenhang zwischen *kanonischem Impuls* $\vec{p}$ *und kinetischem Impuls* $\vec{\pi} = m\vec{v}$ angibt, während die zweite bei Kombination mit

$$\frac{d}{dt}A_k(\vec{r}\,(t),t) = \frac{\partial A_k}{\partial t} + \frac{\partial A_k}{\partial x_l}\frac{dx_l}{dt} \tag{4.38}$$

die bekannte Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}\,) = q\Big[\vec{E}(\vec{r},t) + \vec{v}\times\vec{B}(\vec{r},t)\Big] \tag{4.39}$$

mit der Lorentz-Kraft ergibt.

Für die Übersetzung in einen quantenmechanischen *Hamiltonoperator* wird man, da ϕ und $\vec{A}$ als Funktionen von $\vec{r}$ (und t) gegeben sind, am einfachsten die Ortsdarstellung wählen, d.h. in (4.34) $\vec{p}\to(\hbar/i)\vec{\nabla}$ substituieren und ϕ und $\vec{A}$ als Multiplikationsoperatoren auffassen:

$$\begin{aligned} H^{(x)}\,\psi(\vec{r},t) \;&=\; \left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + q\phi(\vec{r},t)\right\}\psi(\vec{r},t) \\ &=\; \left\{\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 - q\,\frac{\hbar}{i}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{\nabla}) + q^2\vec{A}^2\right] + q\phi\right\}\psi \end{aligned} \tag{4.40}$$

Die damit gebildete Schrödingergleichung hat wieder eine Kontinuitätsgl. (4.9), jedoch mit dem modifizierten Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\begin{aligned} \vec{j} \;&=\; \mathrm{Re}\left[\psi^*\frac{1}{m}(\vec{P}^{(x)} - q\vec{A}\,)\psi\right] \\ &=\; \mathrm{Re}\left[\psi^*\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi\right] - \frac{q}{m}(\psi^*\psi)\cdot\vec{A} \end{aligned} \tag{4.41}$$

zur Folge und garantiert insofern wieder die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit. Es erhebt sich jedoch sofort das Problem der *„Eichinvarianz"*: Die Potentiale ϕ und $\vec{A}$ sind ja nur Hilfsgrößen und dem elektromagnetischen Feld nicht eindeutig zugeordnet; bei einer *„Umeichung" dieser Potentiale* gemäß

$$\vec{A} \;\to\; \vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r},t) \tag{4.42a}$$

$$\phi \;\to\; \phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(\vec{r},t) \tag{4.42b}$$

bleiben die meßbaren Feldstärken (4.33) und damit die Kräfte auf das Teilchen ja unverändert. Trägt die Schrödinger-Gl. mit (4.40) dem Rechnung, indem sie, wo nicht dasselbe ψ, so doch dieselben meßbaren Größen liefert, wenn man die umgeeichten Potentiale $\vec{A}'$, ϕ' verwendet? Dies ist tatsächlich der Fall, wenn man mit $\vec{A}$ und ϕ stets auch die Wellenfunktion gemäß

$$\psi \quad \to \quad \psi'(\vec{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\vec{r},t)}\,\psi(\vec{r},t) \tag{4.42c}$$

„umeicht". Bei der durch (4.42a-c) definierten „*Eichtransformation*" bleibt nämlich nicht nur offensichtlich $\psi^*\psi$ invariant, sondern wegen

$$\begin{aligned}\left(\vec{P}^{(x)} - q\vec{A}'\right)\psi' &= \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A} - q\vec{\nabla}\Lambda\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda}\psi\right)\\ &= e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)\psi \end{aligned}\tag{4.43a}$$

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi'\right)\psi' &= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi + q\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda}\psi\right)\\ &= e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi \end{aligned}\tag{4.43b}$$

erweisen sich auch die Bilinearabbildungen

$$\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)\psi \quad , \quad \psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)\psi \tag{4.44}$$

als *eichinvariant*, insbesondere also auch die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (4.41). Die Schrödinger-Gl. selbst ist *forminvariant* in dem Sinne, daß

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}'\right)^2 + q\phi'\right]\psi' = i\hbar\,\frac{\partial\psi'}{\partial t} \tag{4.45}$$

ebenso wie für die ungestrichenen Größen gilt. Bei allen *meßbaren Größen* zeigt sich, daß sie sich auf die invarianten Bilinearabbildungen wie $\psi^*\psi$ und (4.44) (und andere eichinvariante Faktoren) zurückführen lassen; z.B. ist der Erwartungswert des kinetischen Impulses (und damit die mittlere Geschwindigkeit) durch das Raumintegral des ersten Ausdrucks von (4.44) gegeben.

Die häufigste Anwendung der Eichinvarianz besteht darin, daß man den in (4.40) auftretenden Term

$$(\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{\nabla})\psi = 2\,\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi) + \psi\cdot(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\,) \tag{4.46}$$

durch Übergang zur Klasse der „*Coulomb-Eichungen*" mit

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A}' \equiv \mathrm{div}\vec{A}' \equiv 0 \tag{4.47}$$

vereinfacht; man hat dazu lediglich in (4.42a) die „Eichfunktion" $\Lambda(\vec{r},t)$ als Lösung der Poisson-Gleichung $\nabla^2\Lambda = -(\mathrm{div}\vec{A})$ zu wählen. Die transformierte Schrödinger-Gl. (4.45), in der wir die Striche nun wieder weglassen, lautet dann

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{q}{m}\,\vec{A}(\vec{r},t)\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + q\phi(\vec{r},t) + \frac{q^2}{2m}\,\vec{A}^2(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r},t)\;. \tag{4.48}$$

Als Beispiel betrachten wir die Bewegung eines geladenen Teilchens in einem *zeitlich konstanten, homogenen Magnetfeld* $\vec{B}_0$. Es kann in der Eichung (4.47) z.B. durch das Vektorpotential

$$\vec{A}_0 = \frac{1}{2}(\vec{B}_0 \times \vec{r}\,) \tag{4.49}$$

beschrieben werden; tatsächlich ist hierfür

$$\vec{\nabla} \times \vec{A}_0 = \frac{1}{2}\Big[\vec{B}_0 \underbrace{(\vec{\nabla}\cdot\vec{r}\,)}_{3} - \underbrace{(\vec{B}_0\cdot\vec{\nabla})\,\vec{r}}_{\vec{B}_0}\Big] = \vec{B}_0\,, \tag{4.50a}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_0 = \frac{1}{2}\Big[-\vec{B}_0\cdot\underbrace{(\vec{\nabla}\times\vec{r}\,)}_{0} + \vec{r}\cdot\underbrace{(\vec{\nabla}\times\vec{B}_0)}_{0}\Big] = 0\,. \tag{4.50b}$$

Außerdem möge ein zeitlich konstantes elektrisches Feld, beschrieben durch $\phi(\vec{r}\,)$, vorhanden sein. In diesem Falle wird

$$\begin{aligned}\frac{q^2}{2m}\vec{A}_0^2 &= \frac{q^2}{2m}\Big[\frac{1}{4}B_0^2 r^2\Big(1-(\hat{B}_0\cdot\hat{r})^2\Big)\Big] \\ &= \frac{m}{2}\,\omega_L^2\, r^2\Big[1-(\hat{B}_0\cdot\hat{r})^2\Big]\end{aligned} \tag{4.51}$$

mit der klassischen Larmor-Frequenz

$$\omega_L = \frac{qB_0}{2m}\,, \tag{4.52}$$

während der Term

$$-\frac{q}{m}\,\vec{A}_0\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = -\frac{q}{2m}\,\vec{B}_0\cdot\Big(\vec{r}\times\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Big) = -\Big(\frac{q}{2m}\,\vec{L}\,\Big)\cdot\vec{B}_0 \tag{4.53}$$

die bekannte Form $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ einer Kopplungsenergie zwischen einem magnetischen Moment und einem äußeren Magnetfeld annimmt, so daß wir

$$\vec{\mu}^{\,Op} = \frac{q}{2m}\,\vec{L} = \left(\frac{q\hbar}{2m}\right)\cdot\vec{l} \tag{4.54}$$

als *Operator des magnetischen Bahnmoments* des Teilchens identifizieren können. (Für ein Elektron mit $q=-e$ ist die Größe $(e\hbar/2m_e)=\mu_B$ das bekannte *Bohrsche Magneton*.) Die gesamte Schrödinger-Gl. wird am einfachsten, wenn man die z-Achse in der Richtung $\hat{B}_0$ wählt; dann ist

$$\vec{A}_0 = \frac{1}{2}\,B_0\begin{pmatrix}-y\\ x\\ 0\end{pmatrix} \quad , \quad r^2\Big[1-(\hat{B}_0\cdot\hat{r})^2\Big] = x^2+y^2 \tag{4.55}$$

und aus (4.48) wird

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + q\phi(\vec{r}\,) + \frac{m}{2}\,\omega_L^2\,(x^2+y^2) - B_0\left(\frac{q\hbar}{2m}\right)l_3\right]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r},t)\,. \tag{4.56}$$

Diese Gleichung beschreibt z.B. näherungsweise (nämlich sofern der Spin des Elektrons ignoriert und seine elektrostatische Wechselwirkung mit Atomkern und übrigen Elektronen durch ein gemitteltes Potential $\phi(\vec{r}\,)$ ersetzt wird) die Bewegung eines Elektrons in einem Atom, das in ein äußeres Magnetfeld $\vec{B}_0$ gebracht wird. Für $\phi \equiv 0$ erhalten wir die Quantenmechanik des (spinlosen) Elektrons im homogenen Magnetfeld; die Behandlung des dabei (zweidimensional erweitert) auftretenden harmonischen Oszillatorpotentials $\frac{m}{2}\,\omega_L^2\,x^2$ wird Gegenstand von Kapitel 11 sein.

4.4 Zeitentwicklung von Erwartungswerten

Obwohl man den Zeitverlauf des Erwartungswertes $\langle A\rangle_t$ einer Meßgröße mit hermiteschem Operator A zumeist erst angeben kann, wenn man $\psi(\vec{r},t)$ aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit ihren Randbedingungen vollständig berechnet hat, lassen sich über seine *Zeitableitung* allgemeine Aussagen machen. Es gilt, wenn wir eine explizite Zeitabhängigkeit $A = A(t)$ zulassen,

$$
\begin{aligned}
i\hbar\,\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t &= \int d^3x\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\Big\{\psi^*(\vec{r},t)\,A(t)\,\psi(\vec{r},t)\Big\} \\
&= \int d^3x\,\Big\{(-H\psi)^*A\,\psi + \psi^*A\,(H\psi) + i\hbar\,\psi^*\,\frac{\partial A}{\partial t}\,\psi\Big\}\,,
\end{aligned}
$$

wobei sich $\partial A/\partial t$ auf die explizite Zeitabhängigkeit bezieht. Wegen der Hermitezität von H ergibt dies

$$
\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\,\langle[H,A]\rangle_t + \Big\langle\frac{\partial A}{\partial t}\Big\rangle_t\,. \tag{4.57}
$$

Insbesondere ist also der Erwartungswert einer nicht explizit zeitabhängigen ($\partial A/\partial t \equiv 0$) Meßgröße eine *quantenmechanische Konstante der Bewegung* genau dann, wenn der zugehörige Operator A

$$
[H,A] = 0 \tag{4.58}
$$

erfüllt, d.h. mit dem Hamiltonoperator des Systems vertauschbar ist: Für *jede* Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung ist dann $\langle A\rangle_t$ zeitlich konstant.

Als Anwendung betrachten wir die Erwartungswerte der Orts- und Impulskomponenten für ein geladenes Teilchen im elektomagnetischen Feld mit dem Hamiltonoperator von Gl. (4.40). Unter Verwendung von (3.5), (2.56a/b) und (3.6) findet man hier

$$
[H,X_k] = \frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{m}\Big[P_k - qA_k(\vec{X},t)\Big] = \frac{\hbar}{i}\,v_k^{Op}\,, \tag{4.59a}
$$

$$
[H,P_k] = \frac{\hbar}{i}\,q\Big[-\frac{\partial\phi}{\partial X_k} + \frac{1}{2}\Big\{v_l^{Op},\,\frac{\partial A_l}{\partial X_k}\Big\}\Big]\,, \tag{4.59b}
$$

(Summenkonvention!), wobei wir den *Antikommutator* $\{A, B\}$ *zweier Operatoren* A und B durch

$$\{A, B\} = AB + BA \ \ (= \{B, A\}\,) \tag{4.60}$$

eingeführt und die abkürzende Schreibweise

$$\vec{v}^{\,Op} = \frac{1}{m}[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{X}, t)] \tag{4.61}$$

benutzt haben. Die aus (4.59a) folgende Gleichung

$$m\,\frac{d}{dt}\langle X_k\rangle_t = m\,\langle v_k^{Op}\rangle_t = \langle P_k - qA_k(\vec{X}, t)\rangle_t \tag{4.62}$$

entspricht genau der klassischen Beziehung (4.36), während die aus (4.59b) folgende Gleichung

$$m\,\frac{d}{dt}\langle P_k\rangle_t = q\,\Big\langle -\frac{\partial\phi}{\partial X_k} + \frac{1}{2}\Big\{v_l^{Op}, \frac{\partial A_l}{\partial X_k}\Big\}\Big\rangle_t \tag{4.63}$$

nach Kombination mit

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A_k(\vec{X}, t)\rangle_t \ &= \ \Big\langle \frac{\partial A_k}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\,[H, A_k(\vec{X}, t)]\Big\rangle_t \\ &= \ \Big\langle \frac{\partial A_k}{\partial t}\Big\rangle_t + \Big\langle \frac{1}{2}\Big\{v_l^{Op}, \frac{\partial A_k}{\partial X_l}\Big\}\Big\rangle_t\end{aligned} \tag{4.64}$$

auf das der klassischen Bewegungsgl. (4.39) genau entsprechende Resultat

$$\begin{aligned}m\,\frac{d^2}{dt^2}\langle X_k\rangle_t &= \frac{d}{dt}\Big(m\,\langle v_k^{Op}\rangle_t\Big) \\ &= \ q\,\Big\langle -\frac{\partial\phi}{\partial X_k} - \frac{\partial A_k}{\partial t} + \frac{1}{2}\Big[\,\vec{v}^{\,Op}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A}\,) - (\vec{\nabla}\times\vec{A}\,)\times\vec{v}^{\,Op}\Big]_k\Big\rangle_t\end{aligned} \tag{4.65}$$

führt; der klassische Ausdruck $\vec{v}\times\vec{B}$ erscheint hier – nach dem Muster von (2.62) – zur Wahrung der Hermitezität durch einen symmetrisierten Operator ersetzt. [Dieses Resultat hätte man auch direkt aus der durch Iteration von (4.57) entstehenden Formel

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle A\rangle_t = \Big(\frac{i}{\hbar}\Big)^2\langle[H,[H,A]]\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\,\Big\langle\Big[H, \frac{\partial A}{\partial t}\Big]\Big\rangle_t + \Big\langle\frac{\partial^2 A}{\partial t^2}\Big\rangle_t \tag{4.66}$$

erhalten können, deren Verallgemeinerung auf höhere Ableitungen offensichtlich ist.] Die Gln. (4.62/4.65) und die für $\vec{A}\equiv 0$ entstehenden vereinfachten Formeln ($q\phi = V$!)

$$m\,\frac{d}{dt}\langle X_k\rangle_t = \langle P_k\rangle_t \quad , \quad m\,\frac{d}{dt}\langle P_k\rangle_t = \Big\langle -\frac{\partial V}{\partial X_k}\Big\rangle_t\,, \tag{4.67}$$

sind Beispiele für das *Ehrenfestsche Theorem: Die quantenmechanischen Erwartungswerte erfüllen die klassisch-mechanischen Bewegungsgleichungen* bis auf evtl. notwendige Operatorsymmetrisierung.

Man kann darüber hinaus (4.57) auch auf die Zeitentwicklung von Schwankungsquadraten anwenden:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left[(\Delta A)^2{}_t\right] &= \frac{d}{dt}\langle A^2\rangle_t - 2\,\langle A\rangle_t\,\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t \\ &= \frac{2i}{\hbar}\left\{\left\langle\frac{1}{2}\left\{[H,A],A\right\}\right\rangle_t - \langle A\rangle_t\,\langle[H,A]\rangle_t\right\} . \end{aligned} \tag{4.68}$$

Z.B. erhält man mit (4.59a/4.61) für die Ortsunschärfen

$$\frac{d}{dt}\left[(\Delta X_k)^2{}_t\right] = \frac{2i}{\hbar}\left\{\left\langle\frac{1}{2}\left(v_k^{Op}X_k + X_k\,v_k^{Op}\right)\right\rangle_t - \langle X_k\rangle_t\,\langle v_k^{Op}\rangle_t\right\} , \tag{4.69}$$

eine Verallgemeinerung der für den kräftefreien Fall früher gewonnenen Gl. (2.36).

4.5 Schrödinger-Gleichung für Mehrteilchensysteme

Für ein System von N Teilchen mit Massen m_i, Ortsvektoren $\vec{r}^{\,(i)}$ und Impulsen $\vec{p}^{\,(i)}$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ hat die klassische Hamiltonfunktion die Form

$$H = H(\vec{p}^{\,(1)}, \ldots, \vec{p}^{\,(N)}, \vec{r}^{\,(1)}, \ldots, \vec{r}^{\,(N)}, t) . \tag{4.70}$$

Es liegt deshalb nahe, diesem System in der Quantenmechanik einen Hamiltonoperator

$$H^{(x)} = H\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}^{(1)}, \ldots, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}^{(N)}, \vec{r}^{\,(1)}, \ldots, \vec{r}^{\,(N)}, t\right) \tag{4.71}$$

zuzuordnen, der auf eine Ortsraum-Wellenfunktion

$$\psi = \psi\left(\vec{r}^{\,(1)}, \vec{r}^{\,(2)}, \ldots, \vec{r}^{\,(N)}, t\right) \tag{4.72}$$

wirkt, oder – als äquivalente Beschreibung – eine Impulsraum-Wellenfunktion

$$\varphi = \varphi\left(\vec{p}^{\,(1)}, \vec{p}^{\,(2)}, \ldots, \vec{p}^{\,(N)}, t\right) \tag{4.73}$$

und dementsprechend

$$H^{(p)} = H(\vec{p}^{\,(1)}, \ldots, \vec{p}^{\,(N)}, i\hbar\vec{\nabla}_p^{(1)}, \ldots, i\hbar\vec{\nabla}_p^{(N)}, t) \tag{4.74}$$

usw. Man wird dann die Größen

$$dW_x = \left|\psi\left(\vec{r}^{\,(1)}, \ldots, \vec{r}^{\,(N)}, t\right)\right|^2\, d^{3N}x\,, \tag{4.75a}$$

$$dW_p = \left|\varphi\left(\vec{p}^{\,(1)}, \ldots, \vec{p}^{\,(N)}, t\right)\right|^2\, d^{3N}p \tag{4.75b}$$

mit

$$d^{3N}x = d^3x^{(1)}\ldots d^3x^{(N)} \quad , \quad d^{3N}p = d^3p^{(1)}\ldots d^3p^{(N)} \tag{4.76}$$

als Wahrscheinlichkeiten dafür interpretieren, bei einer Messung der Positionen (bzw. Impulse) *aller* Teilchen zur Zeit t das System in dem Volumenelement $d^{3N}x$

um den Punkt $\{\vec{r}^{(1)}, \ldots, \vec{r}^{(N)}\}$ des $3N$-dimensionalen „Konfigurationsraumes“ herum (bzw. in $d^{3N}p$ um den Punkt $\{\vec{p}^{(1)}, \ldots, \vec{p}^{(N)}\}$ des $3N$-dimensionalen Impulsraumes) vorzufinden.

Spätestens beim Mehrteilchensystem wird der grundlegende Unterschied zwischen Quantenmechanik und klassischer Wellentheorie deutlich: *Auch bei Benutzung der Ortsdarstellung ist die Wellenfunktion nicht mehr eine Funktion auf dem dreidimensionalen Raum der Anschauung, sondern auf einem höherdimensionalen Konfigurationsraum.* Ihre Zeitentwicklung werden wir durch eine zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{4.77}$$

beschreiben, deren allgemeine Lösung wir bei Kenntnis des vollständigen Eigenfunktionensystems

$$\left\{\psi_n\left(\vec{r}^{(1)}, \ldots, \vec{r}^{(N)}, t\right),\ \psi_\nu\left(\vec{r}^{(1)}, \ldots, \vec{r}^{(N)}, t\right) \,\middle|\, n = 1, 2, 3 \ldots; \nu = 0 \ldots \infty\right\} \tag{4.78}$$

von H, d.h. nach Lösung der *stationären* Schrödinger-Gleichung

$$H\,\psi_{n,\nu} = E_{n,\nu}\,\psi_{n,\nu} \tag{4.79}$$

mit den Randbedingungen, ebenso wie in (4.23) durch Superposition aufbauen können.

Der Hamiltonoperator nimmt für eine große Klasse von Problemen der Atom-, Festkörper- und Kernphysik, soweit sie nichtrelativistischer Behandlung zugänglich sind, die Form

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{2m_i}\,\vec{P}^{(i)2} + U_i(\vec{X}^{(i)})\right] + \sum_{i \neq j} V(|\vec{X}^{(i)} - \vec{X}^{(j)}|) \tag{4.80}$$

an, wobei $U_i(\vec{r}^{(i)})$ die potentielle Energie eines auf das i-te Teilchen wirkenden „äußeren“ Kraftfeldes ist („*Einteilchenpotentiale*“), während V die potentielle Energie einer zwischen je zwei Teilchen wirkenden „inneren“ Kraft beschreibt, die nur von den Abständen $|\vec{r}^{(i)} - \vec{r}^{(j)}|$ abhängt („*Zweiteilchenpotential*“). Für die Z Elektronen in einem Atom der Ordnungszahl Z etwa, dessen schwerer Atomkern als ruhendes Kraftzentrum behandelt wird, wäre $m_1 = m_2 = \ldots = m_Z = m_e$ und

$$\begin{aligned} U_i(\vec{X}^{(i)}) &= -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\,|\vec{X}^{(i)}|}\,, \\ V(|\vec{X}^{(i)} - \vec{X}^{(j)}|) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\,|\vec{X}^{(i)} - \vec{X}^{(j)}|} \qquad (i,j = 1,\ldots,Z;\ i \neq j) \end{aligned} \tag{4.81}$$

zu setzen. Die Verallgemeinerung auf den Fall eines äußeren Magnetfeldes durch die Ersetzung

$$\vec{P}^{(i)} \;\to\; \vec{P}^{(i)} - q_i\vec{A}(\vec{X}^{(i)}, t) \tag{4.82}$$

ist evident.

Besonders einfach ist der (stets nur als Idealisierung zutreffende, aber als Ausgangspunkt für Näherungsverfahren oft sehr geeignete) Fall, daß $V = 0$ gesetzt werden kann. Dann ist der Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^{N} H^{(i)} \quad \text{mit} \quad H^{(i)} = \frac{\vec{P}^{(i)2}}{2m_i} + U_i(\vec{X}^{(i)}) \tag{4.83}$$

ein sog. *Einteilchenoperator*, d.h. er zerfällt in eine Summe von N Operatoren, die jeweils nur auf die Koordinaten (bzw. Impulse) eines einzigen Teilchens wirken und deshalb auch alle miteinander kommutieren:

$$[H^{(i)}, H^{(j)}] = 0 \ , \quad i, j = 1, \ldots, N \ . \tag{4.84}$$

In diesem Falle kann das vollständige System der Eigenfunktionen von H dadurch aufgebaut werden, daß man zunächst die erheblich einfacheren Einteilchenprobleme

$$H^{(i)} \chi_{n_i} = \epsilon_{n_i} \chi_{n_i} \ , \quad i = 1, \ldots, N \tag{4.85}$$

löst und dann sämtliche *Produktwellenfunktionen*

$$\psi_{n_1 n_2 \ldots n_N}(\vec{r}^{\,(1)}, \vec{r}^{\,(2)}, \ldots, \vec{r}^{\,(N)}) = \chi_{n_1}(\vec{r}^{\,(1)}) \cdot \chi_{n_2}(\vec{r}^{\,(2)}) \ldots \chi_{n_N}(\vec{r}^{\,(N)}) \tag{4.86}$$

bildet: da jedes $H^{(i)}$ jeweils nur auf einen der Faktoren wirkt und diesen bis auf ϵ_{n_i} reproduziert, sind dann diese Funktionen offensichtlich Lösungen von (4.79) mit

$$E_n = \epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + \ldots + \epsilon_{n_N} \ . \tag{4.87}$$

(Für die kontinuierlichen Anteile der Spektren von (4.85) sind die n_i durch ν_i zu ersetzen.) – Sind die Zweiteilchenwechselwirkungen V in (4.80) nicht mehr vernachlässigbar, so sind die exakten Eigenfunktionen i.a. *„korrelierte"*, d.h. nicht mehr in der Produktform (4.86) darstellbare Funktionen; das System der Funktionen (4.86) ist jedoch wegen seiner Vollständigkeitseigenschaft auch dann noch von Nutzen: *die exakten Lösungen können durch Entwicklungen nach den Produkteigenfunktionen des „unkorrelierten" Problems nichtwechselwirkender Teilchen dargestellt werden* („Konfigurationsmischungen"), deren Koeffizienten man so zu bestimmen versucht, daß die Schrödinger-Gleichung mit V-Termen erfüllt wird. (Mit den heute verfügbaren Techniken ist dies freilich für $N > 3$ nur näherungsweise möglich.) – Dennoch sind zu (4.86) zweierlei *Warnungen* vonnöten:

(a) Streng genommen ist (4.86) auch im Falle der Gl. (4.83) nur für Systeme *verschiedener* Teilchen brauchbar. Für Systeme identischer Teilchen, wie z.B. die Elektronen eines Atoms, muß die Wellenfunktion unabhängig von den Details des Hamiltonoperators gewissen zusätzlichen *Symmetrieforderungen* genügen, die in Teil III dieser Vorlesung zu behandeln sein werden.

(b) Wünscht man die ψ_n als gemeinsame Eigenfunktionen gewisser mit H vertauschbarer Operatoren zu wählen, so kann diese Forderung in ungünstigen Fällen mit der Produktwellenfunktion (4.86) nicht zu erfüllen sein; sie ist dann erst durch (evtl. unendliche) Linearkombinationen zu befriedigen.

Wie in der klassischen Mechanik gestattet der Fall $N = 2$ mit $U_1 = U_2 = 0$, d.h. das *Zweiteilchenproblem ohne „äußere“ Kräfte* mit

$$H = \frac{1}{2m_1}\,\vec{P}^{(1)2} + \frac{1}{2m_2}\,\vec{P}^{(2)2} + V(|\vec{X}^{(1)} - \vec{X}^{(2)}|)\,, \tag{4.88}$$

eine besonders einfache Behandlung, wenn man die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung statt als Funktion von $\vec{r}^{\,(1)}$ und $\vec{r}^{\,(2)}$ als Funktion der *Schwerpunkts- und der Relativkoordinate* des Systems,

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \frac{m_1\vec{r}^{\,(1)} + m_2\vec{r}^{\,(2)}}{m_1 + m_2}\,, && (4.89a)\\ \vec{r} &= \vec{r}^{\,(1)} - \vec{r}^{\,(2)}\,, && (4.89b)\end{aligned}$$

auffaßt. Die Operatoren des Gesamt- und des Relativimpulses des Zweiteilchensystems,

$$\begin{aligned} \vec{P} &= \vec{P}^{(1)} + \vec{P}^{(2)}\,, && (4.90a)\\ \vec{p} &= \frac{m_1\vec{P}^{(2)} - m_2\vec{P}^{(1)}}{m_1 + m_2}\,, && (4.90b)\end{aligned}$$

nehmen dann nämlich durch triviale Umrechnung in der Ortsdarstellung die Gestalt

$$\vec{P}^{(x)} = \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{R}} \quad , \quad \vec{p}^{\,(x)} = \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{r}} \tag{4.91}$$

an, d.h. $\vec{P}$ wirkt *nur* auf die Schwerpunkts-, $\vec{p}$ *nur* auf die Relativkoordinate. Wegen der Vertauschbarkeit aller Impulsoperatoren miteinander folgt dann

$$\frac{1}{2m_1}\,\vec{P}^{(1)2} + \frac{1}{2m_2}\,\vec{P}^{(2)2} = \frac{1}{2M}\,\vec{P}^2 + \frac{1}{2\mu}\,\vec{p}^{\,2} \tag{4.92}$$

mit der Gesamtmasse $M = m_1 + m_2$ und der bekannten *reduzierten Masse*

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\,. \tag{4.93}$$

Das heißt aber, daß der Hamiltonoperator (in Ortsdarstellung)

$$H = \frac{1}{2M}\,\vec{P}^{(x)2} + \left[\frac{1}{2\mu}\,\vec{p}^{\,(x)2} + V(|\vec{r}\,|)\right] \tag{4.94}$$

wie bei (4.84) in zwei auf verschiedene Koordinaten wirkende und daher kommutierende Summanden zerfällt – jedoch hier nicht, wie in (4.83) angenommen, in den Einteilchenkoordinaten, sondern in den Kombinationen (4.89). In diesen können wir deshalb analog zu (4.86) *Produktlösungen* angeben, wobei wir die Eigenfunktionen des Schwerpunktanteils $\vec{P}^{(x)2}/2M$ von H, der die *kräftefreie Bewegung des Schwerpunktes* beschreibt, bereits kennen, die der Relativbewegung dagegen durch Lösung des sog. *äquivalenten Einkörperproblems*

$$\left[\frac{1}{2\mu}\,\vec{p}^{\,(x)2} + V(|\vec{r}\,|)\right]\psi^{(\mathrm{rel})}_{n,\nu} = E_{n,\nu}\,\psi^{(\mathrm{rel})}_{n,\nu} \tag{4.95}$$

für ein fiktives Teilchen der Masse μ zu bestimmen haben. Die Produktfunktionen

$$\psi_{\vec{K};n,\nu}(\vec{R},\vec{r}\,) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\, \psi^{(\mathrm{rel})}_{n,\nu}(\vec{r}\,) \tag{4.96}$$

sind dann exakte Eigenfunktionen von H zu den Eigenwerten

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + E_{n,\nu}\ , \tag{4.97}$$

und die allgemeine Lösung kann durch Superposition der Lösungen (4.96) für alle $\vec{K}$ und n bzw. ν aufgebaut werden. Für Zweiteilchenprobleme ohne äußere Kräfte werden wir daher stets sofort durch „*Abseparieren der Schwerpunktsbewegung*“ zum Problem (4.95) übergehen.

Für mehr als zwei Teilchen kann zwar für $U = 0$ durch Einführung von $\vec{R} = \sum_i m_i \vec{r}^{\,(i)} / (\sum_i m_i)$ und $\vec{P}$ mit $\vec{P}^{(x)} = \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ die kräftefreie Schwerpunktsbewegung noch immer gemäß

$$H = \frac{1}{2\left(\sum_i m_i\right)}\,\vec{P}^2 + H^{(\mathrm{int})} \quad \text{mit} \quad \left[H^{(\mathrm{int})}, \vec{P}\right] = 0 \tag{4.98}$$

abgespalten werden, aber es gibt *im allgemeinen* keine Koordinatentransformation mehr, die auch den „inneren“ Anteil $H^{(\mathrm{int})}$, der alle Wechselwirkungen enthält, in miteinander kommutierende, jeweils nur auf wenige Koordinaten wirkende Summanden zerfallen läßt. Hierin liegt, wie in der klassischen Mechanik, die Schwierigkeit des Mehrkörperproblems.

Kapitel 5

Gebundene Zustände im Zentralkraftfeld

5.1 Allgemeines zum Zentralfeldproblem

Wir betrachten nun die Bewegung eines Teilchens in einem kugelsymmetrischen Kraftfeld mit Potential $V = V(r)$, $r = |\vec{r}\,|$. Wir nehmen an, daß das Kraftfeld um den Ursprung lokalisiert sei in dem Sinne, daß $V(r)$ für $r \to \infty$ gegen eine Konstante geht, die bekanntlich ohne Einschränkung der Allgemeinheit Null gesetzt werden kann:

$$V(r) \;\to\; 0 \quad \text{für} \quad r \to \infty\,. \tag{5.1}$$

Damit sind die (unrealstischen, aber als Modelle wichtigen) Fälle ausgeschlossen, in denen $V(r)$ für $r \to \infty$ unbeschränkt ansteigt, insbesondere der harmonische Oszillator mit $V(r) \propto r^2$, den wir aber in Kap. 11 mit anderen Methoden behandeln werden.

Die Suche nach den Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung (4.20) wird durch die Beobachtung erleichtert, daß wegen der Gln. (3.13) offenbar

$$[V(r), \vec{L}\,] = 0 \tag{5.2}$$

ist und deshalb auch der gesamte Hamiltonoperator $H = T + V$ mit allen Drehimpulsoperatoren kommutiert. Wir können deshalb von vornherein nach *simultanen Eigenfunktionen zu H, $\vec{L}^2$ und L_3* (mit den Eigenwerten E, $\hbar^2 l(l+1)$ und $\hbar m$) fragen; sie müsssen in der Ortsdarstellung, wie schon bei (3.72) diskutiert, die Form

$$\psi(\vec{r}\,) = \frac{1}{r}\, f(r)\, Y_{lm}(\hat{r}) \tag{5.3}$$

haben, so daß für $f(r)$ die *Radialgleichung*

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\, V(r)\right] f(r) = 0 \tag{5.4}$$

zu lösen bleibt. Da sie m nicht mehr enthält, werden Eigenwerte E und Eigenfunktionen $f(r)$ unabhängig von m sein, d.h. jeder Eigenwert E hat (mindestens) eine

$(2l + 1)$-*fache sog. Richtungsentartung*, da sich aus (5.3) $2l + 1$ linear unabhängige Eigenfunktionen zu E mit

$$m = -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, l - 1, l \tag{5.5}$$

ergeben.

Als *Randbedingungen* sind neben der Normierung (1.14), die sich nun wegen (3.53) zu

$$\int_0^\infty dr\, [f(r)]^2 = 1 \tag{5.6}$$

vereinfacht, vor allem die Bedingungen (3.88), also

$$f(0) = 0 \quad , \quad f(\infty) = 0 \tag{5.7}$$

wesentlich, die sicherstellen, daß ψ im Hermitezitätsbereich des Operators P_r liegt – sofern nicht, wie bereits betont, uneigentliche Eigenfunktionen auftreten.

Einen qualitativen Eindruck von der Gestalt des Spektrums vermittelt folgende Plausibilitätsbetrachtung: Für *positive Energien*, wo wir

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = k^2 \qquad (E > 0) \tag{5.8}$$

setzen können, wird sich $f(r)$ für $r \to \infty$, sofern $V(r)$ dort hinreichend rasch abfällt, asymptotisch wie eine Lösung der Dgl.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] f^{\mathrm{as}}(r) = 0 \tag{5.9}$$

verhalten, die bekanntlich das Fundamentalsystem

$$f_1^{\mathrm{as}}(r) = e^{ikr} \quad , \quad f_2^{\mathrm{as}}(r) = e^{-ikr} \tag{5.10}$$

besitzt. Die Lösungen verhalten sich hier also, genau wie (3.92) bzw. (3.94) beim kräftefreien Problem, für $r \to \infty$ oszillierend, so daß (5.6) und die zweite Bedingung (5.7) mit ihnen nicht erfüllbar sind. Andererseits bleiben sie betragsmäßig beschränkt, so daß durch Überlagerung mit normierbaren Paketamplituden nichtstationäre Lösungen, die allen Randbedingungen genügen, sich aufbauen lassen. Für diese Superposition sind jedoch alle E- bzw. k-Werte gleichermaßen tauglich und, wie wir in Analogie zum kräftefreien Fall vermuten, für die Vollständigkeit des Eigenfunktionensystems auch notwendig; es sind *keine speziellen E-Werte ausgezeichnet. Wir erwarten daher für $E > 0$ ein kontinuierliches Spektrum mit $E = 0 \ldots \infty$ bzw. $k = 0 \ldots \infty$ und uneigentlichen Eigenfunktionen, die jedoch die erste Bedingung* (5.7) *erfüllen müssen*, da deren Verletzung, wie wir bei (3.88) betonten, auch durch Superposition nicht zu beheben wäre. Für $r \to \infty$ müssen sie andererseits in eine (reelle) Kombination der Lösungen (5.10) übergehen. Kennzeichnen wir die Radialfunktionen durch die Indizes k und l, so haben wir also

$$f_{k,l}(0) = 0 \quad , \quad f_{k,l}(r \to \infty) \;\to\; N_{k,l} \sin\left[kr + \alpha(k, l)\right] . \tag{5.11}$$

Diese Lösungen sind das quantenmechanische Gegenstück zu den im analogen klassisch-mechanischen Problem für $E > 0$ vorliegenden räumlich unbeschränkten Bahnen, die in großer Entfernung vom Kraftzentrum längs geradliniger Asymptoten ins Unendliche laufen.

Für *negative Energien* andererseits, wo man

$$\frac{2m}{\hbar^2}E = -\kappa^2 \qquad (E < 0) \tag{5.12}$$

setzt, wird sich f asymptotisch wie eine Lösung der Dgl.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \kappa^2\right] f^{\text{as}}(r) = 0 \,,$$

d.h. also wie

$$f_\kappa^{\text{as}}(r) \;\to\; a_\kappa e^{-\kappa r} + b_\kappa e^{+\kappa r} \qquad (r \to \infty) \tag{5.13}$$

verhalten, und da mit asymptotisch exponentiell anwachsenden Funktionen Gl. (5.6) und die zweite Forderung (5.7) auch nach Superposition stets verletzt werden, existieren hier zu beliebig vorgegebenem E i.a. überhaupt keine zulässigen Lösungen. Es kann höchstens bei diskreten „Ausnahmewerten“ von κ vorkommen, daß in (5.13) $b_\kappa = 0$ wird, während die Lösung zugleich $f(0) = 0$ erfüllt; dort existiert dann eine allen Randbedingungen genügende radiale Eigenfunktion. *Für $E < 0$ existiert, wenn überhaupt, dann allenfalls ein Punktspektrum mit eigentlichen, normierbaren Eigenfunktionen*, die asymptotisch exponentiell abfallen, wobei Lage der Eigenwerte und Form der Eigenfunktionen noch von der Drehimpulsquantenzahl l abhängen, so daß man die Eigenwerte gemäß

$$E = E_{n,l} \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \ldots \; ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.14}$$

numerieren wird. Die *Abklingkonstante des asymptotischen exponentiellen Abfalls der zugehörigen Radialfunktion $f_{n,l}(r)$ ist dabei jeweils durch $1/\kappa_{n,l}$ gegeben.*

Diese Eigenfunktionen sind das Gegenstück zu den beim klassischen Problem für $E < 0$ auftretenden räumlich beschränkten Bahnen und werden daher als *gebundene Zustände* bezeichnet; die Größen $B_{n,l} = |E_{n,l}|$ heißen *Bindungsenergien*.

In diesem Kapitel werden *nur die eigentlichen Lösungen zum diskreten Spektrum* bei $E < 0$ behandelt; die uneigentlichen Lösungen für $E > 0$ werden für das Streuproblem (Teil IV) wesentlich. Dabei zeigt sich, daß obige Plausibilitätsbetrachtung die Verhältnisse nur dann vollständig richtig erfaßt, wenn $V(r)$ ein sog. *kurzreichweitiges Potential* im Sinne der Bedingung

$$r \cdot V(r) \;\to\; 0 \quad \text{für} \quad r \to \infty \tag{5.15}$$

ist. Für das in der Atomphysik so wichtige Coulomb-Potential, $V(r) \propto 1/r$ (Abschnitt 5.3), das „langreichweitig“ im Sinne einer Verletzung von (5.15) ist, sind in (5.13) noch Potenzfaktoren, d.h. ein asymptotisches Verhalten wie

$$r^\lambda e^{\pm\kappa r} \quad , \quad \lambda = \lambda(E, l) \,, \tag{5.16}$$

zuzulassen, und für $E > 0$ dementsprechend *logarithmische Korrekturen zum* kr *im asymptotischen* $\sin$*-Verhalten* von Gl. (5.11).

Wir vermerken schließlich noch, daß für das Verhalten von $V(r)$ bei $r \to 0$ gewisse einschränkende Bedingungen erfüllt sein müssen: Die *Stabilitätsbedingung* (4.21) *wird verletzt, wenn* $V(r)$ *für* $r \to 0$ *wie* $-1/r^2$ *oder stärker gegen* $-\infty$ *geht (sog. singuläre Potentiale)*; dagegen sind schwächere Divergenzen nach $-\infty$ zulässig, insbesondere die $(-1/r)$-Divergenz des anziehenden Coulomb-Potentials. Für nach unten beschränkte Potentiale, also

$$V(r) \geq -V_0 \quad \text{für alle } r \quad (V_0 \geq 0)\,, \tag{5.17}$$

sieht man aus $\langle T \rangle = \frac{1}{2m} \langle \vec{P}^2 \rangle \geq 0$ sofort, daß für gebundene Zustände

$$E = \langle H \rangle \geq \langle V \rangle \geq -V_0\,(\psi, \psi) = -V_0 \tag{5.18}$$

gilt, also die Eigenwerte durch $-V_0$ nach unten beschränkt sind. Insbesondere folgt für $V_0 = 0$, d.h. ein überall positives (insbesondere ein rein abstoßendes) Potential mit $V(r \to \infty) \to 0$, daß keine diskreten Eigenwerte existieren und das Spektrum (wie im kräftefreien Fall, aber natürlich mit anderen Eigenfunktionen) rein kontinuierlich ist.

5.2 Energieeigenwerte beim Coulomb-Potential

In einem wasserstoffähnlichen Atom der Kernladungszahl Z (H-Atom für $Z = 1$, einfach ionisiertes He für $Z = 2$ usw.) ist das Elektron dem anziehenden Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \tag{5.19}$$

des Kerns unterworfen. Letzterer kann, da er selbst für $Z = 1$ sehr viel schwerer als das Elektron ist, in sehr guter Näherung als im Ursprung ruhendes Kraftzentrum behandelt werden. Für eine genauere Rechnung kann man die Gesamtschwerpunktsbewegung gemäß (4.96) abseparieren und zum äquivalenten Einkörperproblem (4.95) übergehen, wobei lediglich die Elektronenmasse m durch die reduzierte Masse

$$\mu = \frac{mM}{m + M} = \frac{m}{1 + \frac{m}{M}} \approx m\left(1 - \frac{m}{M}\right) \tag{5.20}$$

ersetzt wird (M Kernmasse).

Für $E < 0$ bilden wir mit dem κ von Gl. (5.12) die dimensionslose Variable

$$\rho = \kappa \cdot r \qquad \left(\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}\right), \tag{5.21}$$

in der die Radialgleichung (5.4) die Form

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 1 + \frac{2\eta(E)}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f(\rho) = 0 \tag{5.22}$$

annimmt. Der noch festzulegende Eigenwertparameter E steckt dabei in dem dimensionslosen „*Sommerfeldschen Parameter*"

$$\eta = \eta(E) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{m}{2|E|}}\,, \tag{5.23a}$$

der auch in der Form

$$\eta(E) = Z\alpha\sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}} \tag{5.23b}$$

mit der für alle elektromagnetischen Wechselwirkungen charakteristischen „*Feinstrukturkonstante*"

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \tag{5.24}$$

geschrieben werden kann.

Zur Lösung von (5.22) spalten wir von $f(\rho)$ zunächst das nach (5.13) erwartete asymptotische Verhalten $e^{-\rho}$ ab. Weiter untersuchen wir das Verhalten für $\rho \to 0$, wo in (5.22) die $1/\rho^2$-Divergenz des Zentrifugalterms führend wird, also

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f(\rho) \approx 0 \qquad (\rho \to 0) \tag{5.25}$$

gilt. Zwei Fundamentallösungen dieser Gleichung findet man durch Potenzansatz $f(\rho) \approx \rho^s$ bei $\rho \to 0$; er führt auf die Bedingung

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \tag{5.26}$$

mit den Lösungen $s = l+1$ und $s = -l$. Für die zweite Lösung ist, genau wie für das $\hat{n}_l$ von (3.90a) und (3.95a) im kräftefreien Fall, die erste der Bedingungen (5.7) nicht erfüllbar; es bleibt also $f(\rho) \approx \rho^{l+1}$ bei $\rho \approx 0$. Für die Restfunktion g in

$$f(\rho) = \rho^{l+1}\, e^{-\rho}\, g(\rho) \tag{5.27}$$

ergibt sich nach Umrechnung die Dgl.

$$\left[\rho\,\frac{d^2}{d\rho^2} + 2\,(l+1-\rho)\,\frac{d}{d\rho} + 2\,\big(\eta(E) - l - 1\big)\right] g(\rho) = 0\,. \tag{5.28}$$

Zu ihrer Lösung versuchen wir, da das richtige Verhalten bei $\rho \to 0$ bereits abgespaltet ist, den *Potenzreihenansatz*

$$g(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \quad \text{mit} \quad a_0 \neq 0\,. \tag{5.29}$$

Nach Einsetzen in (5.28) und geeignete Umbenennung des Summationsindex in den Reihen für $\rho \cdot d^2g/d\rho^2$ und $dg/d\rho$ erhält man

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \Big\{\nu(\nu+1)\,a_{\nu+1} + \Big[(2l+2)(\nu+1)\,a_{\nu+1} \\ - 2\nu\, a_\nu\Big] + 2\,\big(\eta(E) - l - 1\big)\; a_\nu\Big\}\,\rho^\nu = 0\,. \tag{5.30}$$

Durch Koeffizientenvergleich folgt die Rekursionsformel

$$a_{\nu+1} = 2\,\frac{\nu + l + 1 - \eta(E)}{(\nu+1)(\nu+2l+2)}\,a_\nu \tag{5.31}$$

für die Koeffizienten a_ν, deren freibleibender Rekursionsanfang a_0 als Normierungskonstante für die Gesamtlösung fungiert. Für sehr große ν wird nun (5.31) zu

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} \to \frac{2}{(\nu+1)} \qquad (\nu \to \infty)\,, \tag{5.32}$$

d.h. die Reihe (5.29) enthält eine Teilreihe

$$a_0 + \frac{1}{1}\,a_0 \cdot 2\rho + \frac{1}{1\cdot 2}\,a_0 \cdot (2\rho)^2 + \frac{1}{1\cdot 2\cdot 3}\,a_0 \cdot (2\rho)^3 + \ldots = a_0\,e^{2\rho}\,, \tag{5.33}$$

sofern sie nicht abbricht, d.h. ein Polynom wird. Da diese Teilreihe, in (5.27) eingesetzt, eine für $\rho \to \infty$ wie $e^{+\rho}$ anwachsende, also (5.6) und die zweite Bedingung (5.7) verletzende Lösung ergibt, können zulässige Eigenfunktionen nur für diejenigen Werte des Parameters $\eta(E)$ existieren, bei denen die Reihe abbricht: Für ein endliches $\nu = n$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots$ muß

$$n + l + 1 - \eta(E) = 0 \tag{5.34a}$$

werden. Dies ist die Bedingung, die in der Sprache von Gl. (5.13) $b_\kappa = 0$ sicherstellt. Da auch l eine ganze Zahl ≥ 0 ist, ist

$$N = n + l + 1 = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.34b}$$

eine natürliche Zahl; Bedingung (5.34a) besagt

$$\eta(E) = N = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.34c}$$

oder

$$\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\right)^2 \left(\frac{m}{-2E}\right) = N^2\,. \tag{5.34d}$$

Damit erhalten wir die diskreten Energieeigenwerte

$$E_N = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z^2e^2/4\pi\epsilon_0}{a}\right)\frac{1}{N^2} = -\frac{1}{2}\,mc^2\,\frac{(Z\alpha)^2}{N^2} \tag{5.35}$$

des wasserstoffähnlichen Atoms, wobei die Länge

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} cm \tag{5.36}$$

identisch ist mit dem „*Bohrschen Radius*“, der sich in der alten, klassische Bahnvorstellungen verwendenden Quantentheorie als Radius der energetisch tiefsten Kreisbahn im H-Atom ergab. Die aus den Spektralserien des H-Atoms empirisch erschlossenen Energieniveaus („Terme“), die sehr genau das $1/N^2$-Gesetz (5.35) befolgen, werden damit durch die Quantenmechanik zwanglos erklärt.

Die Zahl N *heißt Hauptquantenzahl*. Da $n \geq 0$ ist, sind nach (5.34b) zu gegebenem N die N verschiedenen l-Werte

$$l = 0, 1, 2, \ldots, N-1 \tag{5.37}$$

möglich, d.h. für gegebenen Energieeigenwert ist, wie zu erwarten, der Drehimpulsbetrag nach oben beschränkt. Andererseits ergeben sich zu diesen l-Werten, die alle zum gleichen E_N gehören, N verschiedene Radialwellenfunktionen $f_{N,l}(r)$, weil die Radialgleichung (5.22) von l auch explizit (und nicht nur über $\eta(E) = N$) abhängt. Der *Entartungsgrad*, d.h. die Zahl der linear unabhängigen Eigenfunktionen, für den Eigenwert E_N ist also nicht nur $2l+1$ wegen der Richtungsentartung, sondern sogar

$$\sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = 2 \cdot \frac{N(N-1)}{2} + N = N^2 \,. \tag{5.38}$$

Diese *zusätzliche Entartung* ist für das $1/r$-Potential charakteristisch und für andere kugelsymmetrische Potentiale i.a. nicht vorhanden; dort liegt zumeist nur die Richtungsentartung vor, und die Eigenwerte sind wie in (5.14) als $E_{n,l}$ bzw. $E_{N,l}$ zu schreiben.

5.3 Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

Zu jedem Eigenwert (5.35) gehört nach (5.12) eine asymptotische Abfallkonstante

$$\kappa = \kappa_N = \frac{Z}{\alpha N} \,. \tag{5.39}$$

Die Potenzreihenlösung (5.29) wird wegen der Abbruchbedingung (5.34a) zu einem Polynom n-ten Grades, wobei für gegebenes N die n-Werte

$$n = N - l - 1 = N-1, N-2, \ldots, 1, 0 \tag{5.40}$$

auftreten. In der Variablen 2ρ geschrieben und mit einer konventionsbedingten Normierung heißen diese Polynome die *zugeordneten Laguerreschen Polynome* L_n^{2l+1}:

$$g(\rho) = L_n^{2l+1}(2\rho) = L_{N-l-1}^{2l+1}(2\rho) \qquad (\rho = \rho_N = \kappa_N \cdot r) \,. \tag{5.41}$$

Die konventionelle Normierung wird dadurch festgelegt, daß man die $L_n^p(x)$ $(x = 2\rho,\ p = 2l+1)$ als Koeffizienten in der Taylorentwicklung der „erzeugenden Funktion“

$$G(x,t) = (1-t)^{-(p+1)}\, e^{-\frac{xt}{1-t}} \tag{5.42}$$

um $t = 0$ herum identifiziert:

$$G(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^p(x)}{(n+p)!}\, t^n \,. \tag{5.43}$$

Tatsächlich ist G, wie man leicht nachrechnet, Lösung der partiellen Dgl.

$$\left[x\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (p+1-x)\,\frac{\partial}{\partial x} + t\,\frac{\partial}{\partial t} \right] G(x,t) = 0\,. \tag{5.44}$$

Setzt man hier die Reihenentwicklung (5.43) ein, so findet man, daß $L_n^p(x)$ Lösung der gewöhnlichen Dgl.

$$\left[x\,\frac{d^2}{dx^2} + (p+1-x)\,\frac{d}{dx} + n \right] L_n^p(x) = 0\,, \tag{5.45}$$

d.h. der auf $x = 2\rho$ umgeschriebenen Gl. (5.28) ist. Zugleich zeigt die aus (5.42/5.43) folgende Vorschrift

$$L_n^p(x) = \frac{(n+p)!}{n!} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \left[(1-t)^{-(p+1)}\, e^{-\frac{xt}{1-t}} \right] \right\}_{t=0}\,, \tag{5.46}$$

daß L_n^p Polynom ist. Nach unserer obigen Konstruktion ist es daher identisch mit der von uns konstruierten Polynomlösung $g(\rho)$ bis auf eine spezielle, konventionsbedingte Wahl des Rekursionsanfangs a_0, der sich aus (5.46) zu

$$L_{N-l-1}^{2l+1}(0) = \frac{[\,(N+l)!\,]^2}{(N-l-1)!\,(2l+1)!} \tag{5.47}$$

bestimmt. Man zeigt unschwer, daß (5.46) äquivalent ist mit

$$L_n^p(x) = \left(-\frac{d}{dx} \right)^p L_{n+p}^0(x) \quad ; \quad L_k^0(x) = e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left(x^k e^{-x} \right)\,. \tag{5.48}$$

Hieraus oder direkt aus (5.46) ergibt sich z.B.

$$N = 1: \qquad (l=0, n=0): \quad L_0^1(2\rho) = 1\,, \tag{5.49a}$$

$$N = 2: \quad \begin{cases} (l=0, n=1): \quad L_1^1(2\rho) = 4(1-\rho)\,, \\ (l=1, n=0): \quad L_0^3(2\rho) = 6\,, \end{cases} \tag{5.49b}$$

usw.

Wir können nun die vollständige Radialfunktion (5.27) mit zwei Indizes als

$$f_{N,l}(r) = C_{N,l}\,(\kappa_N r)^{l+1} e^{-\kappa_N r}\, L_{N-l-1}^{2l+1}(2\kappa_N r) \tag{5.50}$$

schreiben, wobei der *Normierungsfaktor* $C_{N,l}$ der Phase nach wieder durch Konvention, dem Betrage nach aus Gl. (5.6) in der Form

$$\frac{|C_{N,l}|^2}{\kappa_N\, 2^{2l+3}} \int_0^\infty dx\; e^{-x} x^{2l+2} \left[L_{N-l-1}^{2l+1}(x) \right]^2 = 1 \tag{5.51}$$

$(x = 2\kappa_N r)$ zu bestimmen ist. Man berechnet dieses Integral, wie alle Integrale vom Skalarprodukttyp $(f_{N',l'}, A\, f_{N,l})$, am besten mittels der erzeugenden Funktion $G(x,t)$, indem man etwa für (5.51) das Integral

$$\int_0^\infty dx\; e^{-x} x^{2l+2}\, G(x,s)\, G(x,t)$$
$$= \frac{(1-s)(1-t)}{(1-st)^{2l+3}} \int_0^\infty dz\; e^{-z} z^{2l+2} \qquad \left(z = \frac{1-st}{(1-s)(1-t)}\, x \right) \tag{5.52}$$

direkt auswertet und nach Potenzen von s und t entwickelt, andererseits für beide G die Reihe (5.43) einsetzt, so daß als diagonale Koeffizienten der Doppelpotenzreihe gerade die gesuchten Integrale (5.51) auftreten. Durch Koeffizientenvergleich findet man:

$$\int_0^\infty dx\, e^{-x} x^{2l+2} \left[L_{N-l-1}^{2l+1}(x)\right]^2 = \frac{2N\,[\,(N+l)!\,]^3}{(N-l-1)!} \tag{5.53}$$

und damit

$$C_{N,l} = 2^{l+1} \left[\frac{\kappa_N (N-l-1)!}{N(\,(N+l)!\,)^3}\right]^{\frac{1}{2}} \ . \tag{5.54}$$

Die *orthonormierten Gesamtwellenfunktionen des diskreten Spektrums* sind damit zu schreiben:

$$\psi_{N,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = \frac{1}{r}\, f_{N,l}(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\ . \tag{5.55}$$

Als Beispiel greifen wir den *Grundzustand* $N = 1$ heraus, für den nach (5.37) nur $l = 0$ und damit auch $m = 0$, d.h. *keine Entartung* vorliegt. Mit (5.49a) wird hier für das H-Atom $(Z = 1)$

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}\,) = (a^3\pi)^{-\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{r}{a}} \tag{5.56}$$

Die zugehörige radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung,

$$4\pi r^2\, |\psi(\vec{r}\,)|^2\, dr = |f_{1,0}(r)|^2\, dr = \left(\frac{2r}{a}\right)^2 e^{-\left(\frac{2r}{a}\right)}\, d\left(\frac{r}{a}\right)\,, \tag{5.57}$$

hat, wie man leicht nachrechnet, ihr Maximum bei $r = a$. Diese statistische Aussage tritt in der Quantenmechanik an die Stelle des anschaulichen, aber im atomaren Bereich nicht mehr haltbaren Bildes der „tiefsten Bohrschen Bahn“ vom Radius a.

Anmerkung:

Die gemäß (5.45) auf $x = 2\rho$ umgeschriebene Dgl. (5.28) ist vom mathematisch wohluntersuchten Typ der sog. *konfluenten Dgl.*

$$\left[x\,\frac{d^2}{dx^2} + (c-x)\,\frac{d}{dx} - b\right] w(x) = 0 \tag{5.58}$$

mit den Parametern

$$c = 2l+2 \quad , \quad b = -[\eta(E) - l - 1] \tag{5.59}$$
$$(= -N + l + 1 = -n \quad \text{für} \quad E = E_N\,)\ .$$

Die von uns durch die Potenzreihe (5.29) konstruierte, bei $x = 0$ reguläre Lösung, die für allgemeine Werte von b bzw. E nicht abbricht und für $x \to \infty$ wie e^x ansteigt, heißt in der Normierung $w(0) = a_0 = 1$ die konfluente Reihe oder Funktion und hat nach (5.31) die allgemeine Gestalt

$$
\begin{aligned}
{}_1F_1(b,c;x) &= 1 + \frac{b}{c}\,\frac{x}{1!} + \frac{b(b+1)}{c(c+1)}\,\frac{x^2}{2!} + \dots \\
&= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(b)_\nu}{(c)_\nu}\,\frac{x^\nu}{\nu!} \qquad \text{mit} \qquad (b)_\nu = \frac{\Gamma(b+\nu)}{\Gamma(b)} \qquad (\Gamma = \text{Gamma-Funktion})\,.
\end{aligned} \tag{5.60}
$$

In dem von uns betrachteten Sonderfall, $b =$ nichtpositive ganze Zahl, bricht die konfluente Reihe ab, und nach (5.47) wird

$$
L_n^{2l+1}(x) = \frac{[\,(n+2l+1)!\,]^2}{n!\,(2l+1)!}\;{}_1F_1(-n, 2l+2; x)\,. \tag{5.61}
$$

Im allgemeinen Fall, den man zweckmäßig durch Lösung von (5.58) mittels einer komplexen Laplace-Transformation behandelt, hat (5.60) das asymptotische Verhalten

$$
\begin{aligned}
{}_1F_1(b,c;x) \;&\longrightarrow\; \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)}\,e^x\,x^{b-c}\left[1 + O\left(\frac{1}{|x|}\right)\right] \\
&\quad + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)}\,(e^{-i\pi}x)^{-b}\left[1 + O\left(\frac{1}{|x|}\right)\right]\,,
\end{aligned} \tag{5.62}
$$

und die Bedingung, daß der e^x-Term ausfällt (die Funktion $1/\Gamma(x)$ hat Nullstellen bei $x = 0, -1, -2, \dots$), führt auf die Eigenwertbedingung (5.34a/b) zurück.– Eine von ${}_1F_1$ linear unabhängige Lösung von (5.58), die mit $U(b,c;x)$ bezeichnet wird, verhält sich für $x \to 0$ wie

$$
U(b,c;x) \;\longrightarrow\; \frac{\Gamma(c-1)}{\Gamma(b)}\,x^{-(c-1)} + \begin{cases} O(|\ln x|)\,, & c = 2 \\ O(|x|^{c-2})\,, & c > 2\,, \end{cases} \tag{5.63}
$$

und wird deshalb als *„irreguläre Lösung"* bezeichnet; sie wurde hier durch den Ansatz (5.29) von vornherein ausgeschieden, da sie $f(0) = 0$ stets verletzen würde.

II

Allgemeine Quantentheorie

Kapitel 6

Der Hilbertraum eines quantenmechanischen Systems

6.1 Axiomatische Einführung des Hilbertraumes

Die völlige Gleichwertigkeit der bisher benutzten verschiedenen Darstellungen für die quantenmechanische Beschreibung des Bewegungszustandes (und die daraus erwachsende Vermutung, daß es noch viele weitere gleichwertige Darstellungen gibt) legen es nahe, eine allen diesen Darstellungen gemeinsame mathematische Struktur aus ihnen zu abstrahieren, mit deren Hilfe sich die wesentlichen Aussagen der Quantenmechanik *darstellungsunabhängig* formulieren lassen. Als wesentliche Züge einer solchen Struktur erkennen wir rückblickend:

(a) Für die den Bewegungszustand beschreibenden Größen gilt stets ein *Superpositionsprinzip*, d.h. sie bilden einen linearen Raum;

(b) Meßwahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte sind durch Integral- oder Summenbildungen gegeben, die die kennzeichnenden Eigenschaften von *Skalarprodukten* besitzen;

(c) Den physikalischen Meßgrößen sind *lineare Operatoren* zugeordnet, die auf die Größen (a) wirken.

Wir abstrahieren nun aus (a) und (b) das Postulat: Den möglichen Zuständen eines quantenmechanischen Systems sind gewisse (nämlich normierte, s.u.) *Elemente (Vektoren) eines sog. Hilbertschen Raumes* $\mathcal{H}$ eindeutig zugeordnet, die wir nach Dirac durch die „Ket-Symbole“

$$|\chi\rangle, |\varphi\rangle, |\psi\rangle, \ldots \tag{6.1}$$

bezeichnen. Für $\mathcal{H}$ gelten folgende Axiome:

(1) *$\mathcal{H}$ ist ein linearer Vektorraum über dem komplexen Zahlkörper $\mathbb{C}$*, d.h.

(1a) in $\mathcal{H}$ ist eine assoziative und kommutative *Addition* erklärt, die ein Neutralelement, den Nullvektor 0, besitzt[1] und bezüglich deren jeder Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ein eindeutiges Inverses $-|\psi\rangle$ hat mit

$$|\psi\rangle + (-|\psi\rangle) = 0 \qquad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}\,.$$

(1b) Es ist eine *Multiplikation der Vektoren von $\mathcal{H}$ mit komplexen Zahlen $c \in \mathbb{C}$* erklärt, die sowohl bezüglich der $\mathcal{H}$- als auch der $\mathbb{C}$-Addition distributiv ist und die Eigenschaften

$$1 \cdot |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad , \quad (c_1 \cdot c_2) \cdot |\psi\rangle = c_1 \cdot (c_2 \cdot |\psi\rangle)$$

besitzt. – Damit sind auch beliebige *Linearkombinationen*

$$\sum_{n=1}^{N} c_n |\psi_n\rangle\,, \quad c_1, \ldots, c_N \in \mathbb{C}\,, \quad |\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}\,, \tag{6.2}$$

erklärt.

Wie üblich heißt dann ein Satz $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_N\rangle\}$ von Vektoren aus $\mathcal{H}$ *linear unabhängig (l.u.)*, wenn aus dem Bestehen der Relation

$$\sum_{n=1}^{N} c_n |\psi_n\rangle \;=\; 0$$

folgt, daß $c_1 = c_2 = \ldots = c_N = 0$ ist; andernfalls sind die Vektoren linear abhängig. Ist die Maximalzahl linear unabhängiger Vektoren endlich, so reduziert sich $\mathcal{H}$ auf einen endlich-dimensionalen Vektorraum; bei den für die Quantenmechanik wichtigen Hilberträumen ist dies jedoch in der Regel gerade nicht der Fall, d.h. $\mathcal{H}$ ist in der Regel von *unendlicher Dimension*.

(2) *$\mathcal{H}$ ist ein unitärer oder Skalarproduktraum*, d.h. je zwei Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ ist eine Zahl

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}\,, \tag{6.3}$$

das Skalarprodukt der beiden Vektoren, eindeutig zugeordnet mit folgenden Eigenschaften:

$$\langle\psi|\,[|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle] = \langle\psi|\varphi_1\rangle + \langle\psi|\varphi_2\rangle \tag{6.4}$$

(Distributivität bezüglich der $\mathcal{H}$-Addition),

$$\langle\psi|\,[c \cdot |\varphi\rangle] = c \cdot \langle\psi|\varphi\rangle \tag{6.5}$$

(Linearität im zweiten Faktor)

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* \quad \text{(Symmetrieeigenschaft)} \tag{6.6}$$

(insbesondere also $\langle\psi|\psi\rangle$ reell für alle $|\psi\rangle$),

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \qquad \text{für alle } |\psi\rangle \in \mathcal{H} \text{ und } = 0 \text{ nur für } |\psi\rangle = 0\,. \tag{6.7}$$

[1] Der Nullvektor 0 ist nicht zu verwechseln mit dem oft verwendeten Symbol $|0\rangle$ für den *Grundzustand* eines Systems.

Aus (6.5) und (6.6) folgt dann sofort, daß für $c \in \mathbb{C}$

$$\langle c \cdot \psi | \varphi \rangle = c^* \cdot \langle \psi | \varphi \rangle \,, \tag{6.8}$$

d.h. das Skalarprodukt *im ersten Faktor „antilinear"* ist.

Aus der Einführung des Skalarprodukts ergeben sich sofort weitere, in ihrer geometrischen Bedeutung unmittelbar einsichtige Begriffsbildungen. Die reelle positive Zahl

$$\| \, |\psi\rangle \, \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \,, \tag{6.9}$$

genannt *Norm von* $|\psi\rangle$, hat alle Eigenschaften, die für die „Länge" (den Betrag) eines Vektors typisch sind. Die *auf* 1 *normierten oder kurz normierten* Vektoren mit

$$\| \, |\psi\rangle \, \| = 1 \,, \quad \text{d.h.} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{6.10}$$

haben für die Quantenmechanik besondere Bedeutung. Für diese Norm läßt sich in bekannter Weise die *Cauchy-Schwarzsche Ungleichung*

$$|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \| \, |\varphi\rangle \, \|^2 \cdot \| \, |\psi\rangle \, \|^2 \qquad \forall \, |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{6.11}$$

beweisen[2], wobei das Gleichheitszeichen genau dann gilt, wenn beide Vektoren „parallel" sind, d.h. $|\varphi\rangle = c \cdot |\psi\rangle$ mit $c \in \mathbb{C}$ gilt.

Zwei Vektoren $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ heißen *orthogonal*, wenn $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$ ist. Dementsprechend heißt ein endlicher Satz $\{|\psi_i\rangle \mid i = 1, 2, 3, \ldots\}$ von Vektoren aus $\mathcal{H}$ *Orthonormalsystem*, wenn für je zwei Vektoren dieses Satzes

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \tag{6.12}$$

gilt. – Die Norm der Differenz zweier Vektoren,

$$d(\varphi, \psi) = \| \, |\varphi\rangle - |\psi\rangle \, \| = \sqrt{\langle \varphi | \varphi \rangle + \langle \psi | \psi \rangle - 2\mathrm{Re}\langle \varphi | \psi \rangle} \,, \tag{6.13}$$

hat alle Eigenschaften eines *Abstandes oder einer Metrik*, insbesondere gilt die *Dreiecksungleichung*

$$| \, \| \, |\varphi\rangle \, \| - \| \, |\psi\rangle \, \| \, | \leq \| \, |\varphi\rangle + |\psi\rangle \, \| \leq \| \, |\varphi\rangle \, \| + \| \, |\psi\rangle \, \| \,, \tag{6.14}$$

deren anschauliche Bedeutung offensichtlich ist. Mit der Definition eines Skalarprodukts ist also $\mathcal{H}$ *zugleich auch ein normierter und ein metrischer Raum* geworden.

[2]Man zeige, daß der durch $|\psi\rangle = \frac{\langle \varphi | \psi \rangle}{\| \, |\varphi\rangle \, \|^2} |\varphi\rangle + |\delta\rangle$ definierte Vektor $|\delta\rangle$ zu $|\varphi\rangle$ orthogonal ist, und berechne damit $\| \, |\psi\rangle \, \|^2 = \frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{\| \, |\varphi\rangle \, \|^2} + \| \, |\delta\rangle \, \|^2$.

Mit der Metrik (6.13) läßt sich nun auch der Begriff der *ε-Umgebung* eines Vektors $|\psi_0\rangle$, d.h. der offenen Hyperkugel vom Radius ε

$$\{|\psi\rangle \in \mathcal{H} \;\mid\; \| \, |\psi\rangle - |\psi_0\rangle \, \| < \varepsilon\} \;, \tag{6.15}$$

definieren und damit der Raum $\mathcal{H}$ in natürlicher Weise mit einer topologischen Struktur ausstatten. Damit sind weiter *stetige Abbildungen f* – sowohl von $\mathcal{H}$ als auch von Teilmengen von $\mathcal{H}$ – in sich selbst oder in andere topologische Räume definiert: Hierbei hat jede offene Umgebung des Bildes $f(|\psi_0\rangle)$ eines Hilbertvektors $|\psi_0\rangle$ eine entsprechende offene $\mathcal{H}$-Umgebung von $|\psi_0\rangle$ als Urbildmenge.

Ein wichtiger Sonderfall ist das Skalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle$ selbst: Bei festem $\langle\varphi|$ vermittelt es eine stetige Abbildung aller $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in die komplexen Zahlen, d.h. wegen der Eigenschaft (6.4) ein *stetiges lineares Funktional auf $\mathcal{H}$*. Das „Bra-Symbol“ $\langle\varphi|$ („Bra-Vektor“) kann als Bezeichnung für dieses lineare Funktional aufgefaßt werden. Es ist dann Element des sogenannten *Dualraumes $\mathcal{H}^\times$ zu $\mathcal{H}$*, d.h. der Menge aller stetigen linearen Funktionale auf $\mathcal{H}$, die selbst einen Vektorraum darstellt. Das Skalarprodukt erscheint bei dieser Betrachtungsweise dann als Abbildung von $\mathcal{H} \times \mathcal{H}^\times$ in $\mathbb{C}$. Wir werden diese „duale“ Betrachtungsweise meist nicht benötigen, weil sich für einen Hilbertraum $\mathcal{H}$ – mit den noch zu diskutierenden Axiomen (3), (4) – zeigen läßt, daß *$\mathcal{H}^\times$ wieder Hilbertraum und isomorph zu $\mathcal{H}$*, d.h. im wesentlichen

$$\mathcal{H}^\times = \mathcal{H} \tag{6.16}$$

ist: „Selbstdualität“ von $\mathcal{H}$.

Von *starker Konvergenz einer Folge* $\{|\psi_i\rangle\}$ von Vektoren gegen einen Grenzvektor $|\gamma\rangle \in \mathcal{H}$ spricht man genau dann, wenn

$$\lim_{i\to\infty} \| \, |\gamma\rangle - |\psi_i\rangle \, \| = 0 \tag{6.17}$$

gilt. Man schreibt dann

$$|\gamma\rangle = \operatorname*{s-lim}_{i\to\infty} |\psi_i\rangle \;. \tag{6.18}$$

Eine Teilmenge $\mathcal{G} \subset \mathcal{H}$ heißt *dicht in $\mathcal{H}$*, wenn jeder Vektor von $\mathcal{H}$ Häufungspunkt von $\mathcal{G}$ ist, d.h. sich als Grenzvektor einer Folge von Vektoren aus $\mathcal{G}$ im Sinne von (6.17) darstellen läßt – auch wenn er selbst nicht in $\mathcal{G}$ liegt. – Die Darstellung eines Vektors $|\psi\rangle$ durch die *unendliche Reihe*

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n\rangle \tag{6.19}$$

bedeutet wie üblich, daß die Folge der Teilsummen $\sum_{n=0}^{N} c_n|\psi_n\rangle$ für $N \to \infty$ stark gegen $|\psi\rangle$ konvergiert.

Die Anwendbarkeit des bekannten Cauchyschen Konvergenzkriteriums sichert das nächste Axiom:

(3) $\mathcal{H}$ *ist ein vollständiger Raum*, d.h. jede Cauchy-Folge von Vektoren aus $\mathcal{H}$ konvergiert gegen ein Grenzelement in $\mathcal{H}$.

Unter einer *Cauchy-Folge* versteht man wie üblich eine Folge $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, \ldots$, die „in sich konvergent" ist in dem Sinne, daß bei hinreichend großem m der Abstand $\| \, |\psi_m\rangle - |\psi_n\rangle \, \|$ *für alle* $n > m$ unter jede vorgegebene Schranke ε gedrückt werden kann.

Das Axiom stellt sicher, daß der Hilbertraum bezüglich der Bildung derartiger „in sich" konvergenter Folgen abgeschlossen ist, was bei allgemeinen unitären Räumen unendlicher Dimension nicht selbstverständlich ist.

Schließlich möchte man wie in endlichdimensionalen Vektorräumen jeden Vektor durch Komponentenzerlegung bezüglich einer Basis darstellen können. Dies wird sichergestellt durch das Axiom

(4) $\mathcal{H}$ *ist separabel*, d.h. es existiert in $\mathcal{H}$ mindestens ein *abzählbarer* Satz von linear unabhängigen Vektoren $|\psi_n\rangle$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$, der eine Basis von $\mathcal{H}$ bildet in dem Sinne, daß *jedes* $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ sich im Sinne der starken Konvergenz durch eine Entwicklung (6.19) nach dieser Basis darstellen läßt.

Wegen der Abzählbarkeit kann die Basis $\{|\psi_n\rangle\}$, wenn nötig, durch das bekannte Schmidtsche Verfahren schrittweise orthonormiert werden, so daß wir o.B.d.A. die Existenz einer *Orthonormalbasis* mit

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \tag{6.20}$$

annehmen können. Die Koeffizienten c_n in (6.19) sind dann leicht zu bestimmen:

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle \ , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \ , \tag{6.21}$$

so daß sich die Basiseigenschaft des Systems $\{|\psi_n\rangle\}$, auch Vollständigkeit genannt, durch

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n \Big| \, |\psi\rangle \quad \forall \, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{6.22}$$

ausdrücken läßt. Dies wird auch unter Weglassung von $|\psi\rangle$ in der kompakten Form einer Operatorgleichung

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbf{1} \tag{6.23}$$

geschrieben: Die links von der vertikalen Hilfslinie in (6.22) stehende Folge von Operationen wirkt insgesamt wie die identische Abbildung $\mathbf{1}$ in $\mathcal{H}$.

Zu beachten ist, daß (6.22/6.23) *nur für Orthonormalbasen* richtig ist. Für eine „schiefwinklige" Basis sind die Koeffizienten nicht gemäß (6.21) bestimmbar.

6.2 Die beiden Standardbeispiele

Die beiden folgenden speziellen Hilberträume treten in der Quantenmechanik ständig auf:

(a) Der *Raum $\mathcal{S}$ der quadratkonvergenten Folgen* (oder Spaltenvektoren) von komplexen Zahlen. Die Spaltenvektoren

$$a = (a_\nu) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} , \quad a_\nu \in \mathbb{C} \tag{6.24}$$

mit der Eigenschaft

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} |a_\nu|^2 < \infty \quad \text{(d.h. konvergent)} \tag{6.25}$$

bilden einen Hilbertraum, wenn man sie mit der üblichen zeilenweisen Addition und dem Skalarprodukt

$$\langle (a_\mu) | (b_\nu) \rangle = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu^* b_\nu \tag{6.26}$$

ausstattet; die Reihe in (6.25) wird dann zum Normquadrat $\|(a_\nu)\|^2$ in $\mathcal{S}$. Die Rolle des zu (a_ν) dualen Elements übernimmt der *transponierte und komplex konjugierte („adjungierte") Vektor*

$$a^\dagger = (a^T)^* = (a_1^*, a_2^*, a_3^*, \ldots) \, . \tag{6.27}$$

Eine Orthonormalbasis wird offensichtlich durch die Vektoren

$$a^{(n)} \quad \text{mit} \quad a_\nu^{(n)} = \delta_{\nu n} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{6.28}$$

gebildet, bei denen in der Zeile $\nu = n$ die 1, sonst überall die 0 steht.

Den Hilbertraum $\mathcal{S}$ erhält man auf natürliche Weise, wenn man in einem abstrakten Hilbertraum $\mathcal{H}$ jeden Vektor $|\psi\rangle$ durch den Satz seiner Entwicklungskoeffizienten $\{c_n\}$ in der Entwicklung (6.19) nach einer vereinbarten festen Orthonormalbasis charakterisiert: Wegen der Eigenschaften (6.4) bis (6.6) des Skalarprodukts ist ja

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{mn} c_m^* c_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n |c_n|^2 \, , \tag{6.29}$$

d.h. die zuletzt geschriebene Quadratsumme stets konvergent. Der *konkrete Raum $\mathcal{S}$ bildet also eine „Darstellung"*, d.h. ein isomorphes Bild des abstrakten Hilbertraums.

(b) Der *Raum* $\mathcal{L}^2$ *der quadratisch integrierbaren Funktionen* $f(\vec{x})$ *auf dem reellen* $\mathbb{R}^3$ mit Werten aus $\mathbb{C}$, die also

$$\int d^3x\, |f(\vec{x})|^2 < \infty \tag{6.30}$$

erfüllen[3]. Mit der üblichen punktweisen Addition der Funktionswerte und dem Skalarprodukt

$$(f,g) = \int d^3x\, f^*(\vec{x})\, g(\vec{x}) \tag{6.31}$$

ausgestattet, ist dieser Raum ein Hilbertraum, den wir als *Raum der Einteilchen-Wellenfunktionen sowohl in der Orts- wie in der Impulsdarstellung* bereits verwendet haben. Wir schreiben $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}, \mathcal{L}^2_{\vec{p}}$, wenn wir diese Funktionenräume unterscheiden wollen, und analog $\mathcal{L}^2_x, \mathcal{L}^2_p$ bei eindimensionalen Systemen oder $\mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)}$ für den Raum der quadratintegrablen Funktionen auf der Einheitskugel, usw.

Eine Orthonormalbasis ist z.B. für $\mathcal{L}^2_x$ durch die Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators (Kap. 11) in der Ortsdarstellung, für $\mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)}$ durch die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ von Kapitel 3 gegeben. Dagegen sind die ebenen Wellen von Kapitel 2, weil weder Elemente von $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ gemäß dem Kriterium (6.30) noch abzählbar, kein Beispiel für eine $\mathcal{L}^2$-Basis im Sinne des Axioms (4). Auch die *Bindungszustände* (5.55) *des H-artigen Atoms, obwohl quadratintegrabel und abzählbar, sind keine Basis von* $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$, weil sie für sich nicht vollständig sind; erst nach Hinzunahme der (uneigentlichen) Eigenfunktionen des kontinuierlichen Spektrums $(E > 0)$ entsteht hier – im verallgemeinerten Sinne der Gl. (4.31) – eine Orthonormalbasis.

6.3 Unterräume und Tensorprodukte

Eine Teilmenge $\mathcal{L} \subset \mathcal{H}$ heißt Linearmannigfaltigkeit, wenn jede endliche Linearkombination von Vektoren aus $\mathcal{L}$ wieder in $\mathcal{L}$ liegt. Eine Linearmannigfaltigkeit $\mathcal{U}$, die außerdem vollständig, d.h. selbst ein Hilbertraum ist, heißt Teilraum oder *Unterraum* von $\mathcal{H}$. Ein wichtiges Beispiel ist die Menge aller Linearkombinationen

$$|\chi\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n |\chi_n\rangle\ , \quad \langle\chi_m|\chi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{6.32}$$

von N festen orthonormalen Vektoren $|\chi_n\rangle$, sie heißt der *von den* $|\chi_n\rangle$ *aufgespannte Unterraum* von $\mathcal{H}$.

$\mathcal{H}$ heißt *direkte Summe der orthogonalen Teilräume* $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \mathcal{U}_3, \ldots$, in Formeln

$$\mathcal{H} = \mathcal{U}_1 \oplus \mathcal{U}_2 \oplus \mathcal{U}_3 \oplus \ldots\ , \tag{6.33}$$

[3] Dabei sind zwei Funktionen als dasselbe $\mathcal{L}^2$-Element zu betrachten, wenn sie sich nur auf einer Menge vom Maß Null unterscheiden.

wenn die Teilräume $\mathcal{U}_i$ orthogonal sind in dem Sinne, daß

$$\langle\psi_k|\psi_l\rangle = 0 \quad \text{für alle} \quad |\psi_k\rangle \in \mathcal{U}_k\ ,\ |\psi_l\rangle \in \mathcal{U}_l\ , \quad k \neq l$$

gilt, und wenn überdies jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ auf genau eine Weise als Linearkombination

$$|\psi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\ , \quad |\psi_i\rangle \in \mathcal{U}_i \tag{6.34}$$

darstellbar ist. Der Vektor $|\psi_i\rangle$ *heißt die Projektion von* $|\psi\rangle$ *in den Unterraum* $\mathcal{U}_i$, die Größe

$$\langle\psi_i|\psi\rangle = \langle\psi_i|\psi_i\rangle\ , \quad i = 1, 2, 3 \ldots \tag{6.35}$$

die Komponente von $|\psi\rangle$ in $\mathcal{U}_i$. Sind $\{|\varphi_{i,n}\rangle\}$ Orthonormalbasen in den Räumen $\mathcal{U}_i$, so ist ihre Vereinigung $\bigcup_i \{|\varphi_{i,n}\rangle\}$ Orthonormalbasis in ganz $\mathcal{H}$.

Ein Sonderfall ist das abzählbar unendliche System der eindimensionalen Unterräume, die jeweils von einem Vektor $|\psi_n\rangle$ einer Orthonormalbasis von $\mathcal{H}$ aufgespannt werden und aus allen Vektoren $c|\psi_n\rangle, c \in \mathbb{C}$ bestehen („*Strahl*" in Richtung $|\psi_n\rangle$). Hier wird die Zerlegung (6.34) mit der Entwicklung (6.22) identisch.

Beispiel: Der Raum $\mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)}$ ist die direkte Summe der orthogonalen Teilräume

$$\mathcal{U}_l = \left\{\text{Menge der Eigenfunktionen von } \vec{l}^{\,2} \text{ zum Eigenwert } l(l+1)\right\}\ . \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \tag{6.36}$$

Der Raum $\mathcal{U}_l$ hat die Dimension $2l+1$ und wird von den Kugelfunktionen $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ mit $m = -l, \ldots, +l$ aufgespannt. Die Projektion von $f(\vartheta,\varphi) \in \mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)}$ in $\mathcal{U}_l$ ist gegeben durch

$$f_l(\vartheta,\varphi) = \sum_{m=-l}^{+l} \left\{\int d^2\hat{x}'\ f(\hat{x}')\,Y^*_{lm}(\hat{x}')\right\} Y_{lm}(\hat{x})\ . \tag{6.37}$$

Eine andere Art von Zerlegung des Gesamthilbertraumes ergibt sich in den physikalisch wichtigen Fällen, wo das System – sei es exakt, sei es in einer bestimmten Näherung – in unabhängige *Teilsysteme* zerfällt, die jeweils ihre eigenen Hilberträume

$$\mathcal{H}^{(1)}, \mathcal{H}^{(2)}, \ldots, \mathcal{H}^{(N)} \tag{6.38}$$

besitzen. Wir können dann die Elemente des Hilbertraumes $\mathcal{H}$ des Gesamtsystems in folgender Weise aufbauen. Sei $\left\{|\varphi^{(i)}_n\rangle \mid n = 1, 2, 3, \ldots\right\}$ Orthonormalbasis im Raum $\mathcal{H}^{(i)}$, dann stellen die *formalen Multilinearbildungen*

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1\,n_2 \ldots n_N} c^{(\psi)}_{n_1\,n_2 \ldots n_N} |\varphi^{(1)}_{n_1}\rangle|\varphi^{(2)}_{n_2}\rangle \ldots |\varphi^{(N)}_{n_N}\rangle \tag{6.39}$$

mit der Additionsvorschrift

$$|\psi\rangle + |\varphi\rangle = \sum_{n_1\, n_2 \ldots n_N} [c^{(\psi)}_{n_1\, n_2 \ldots n_N} + c^{(\varphi)}_{n_1\, n_2 \ldots n_N}]\, |\varphi^{(1)}_{n_1}\rangle |\varphi^{(2)}_{n_2}\rangle \ldots |\varphi^{(N)}_{n_N}\rangle \tag{6.40}$$

und dem Skalarprodukt

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \sum_{m_1\, m_2 \ldots m_N} \sum_{n_1\, n_2 \ldots n_N} c^{(\varphi)*}_{m_1\, m_2 \ldots m_N}\, c^{(\psi)}_{n_1\, n_2 \ldots n_N}\, \langle\varphi^{(1)}_{m_1}|\varphi^{(1)}_{n_1}\rangle \ldots \langle\varphi^{(N)}_{m_N}|\varphi^{(N)}_{n_N}\rangle \\ &= \sum_{n_1\, n_2 \ldots n_N} c^{(\varphi)*}_{n_1\, n_2 \ldots n_N}\, c^{(\psi)}_{n_1\, n_2 \ldots n_N}\end{aligned} \tag{6.41}$$

einen Hilbertraum dar, der als *direktes oder Tensorprodukt* jener Einzelräume bezeichnet und

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(N)} \tag{6.42}$$

geschrieben wird. Wenn die Koeffizienten $c^{(\psi)}$ sämtlich gemäß

$$c^{(\psi)}_{n_1\, n_2 \ldots n_N} = c^{(\psi)}_{n_1} \cdot c^{(\psi)}_{n_2} \cdot \ldots \cdot c^{(\psi)}_{n_N} \tag{6.43}$$

faktorisieren, heißt $|\psi\rangle$ *Produktzustand* oder tensorielles Produkt der Faktorzustände $\sum_{n_i} c^{(\psi)}_{n_i} |\varphi^{(i)}_{n_i}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \prod_{i=1}^{N} \left\{ \sum_{n_i} c^{(\psi)}_{n_i} |\varphi^{(i)}_{n_i}\rangle \right\} . \tag{6.44}$$

Die speziellen Produktzustände

$$|\psi_{n_1\, n_2 \ldots n_N}\rangle = |\varphi^{(1)}_{n_1}\rangle |\varphi^{(2)}_{n_2}\rangle \ldots |\varphi^{(N)}_{n_N}\rangle \tag{6.45}$$

bilden eine Orthonormalbasis in $\mathcal{H}$.

Beispiele bilden die Zerlegung

$$\mathcal{L}^2_{\vec{x}} = \mathcal{L}^2_r \otimes \mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)} \tag{6.46}$$

des Raumes $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ in den Hilbertraum der Radialfunktionen

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^2_r = \Big\{ &\text{Funktionen } f(r) \text{ auf } r = 0 \ldots \infty \\ &\text{mit } \int_0^\infty dr\, r^2 \left| \frac{1}{r}\, f(r) \right|^2 < \infty \text{ und } f(0) = f(\infty) = 0 \Big\}\end{aligned} \tag{6.47}$$

und den uns schon bekannten Raum $\mathcal{L}_{(\vartheta,\varphi)}$. Ist $\{f_n(r) \mid n = 1, 2, 3, \ldots\}$ eine Basis in $\mathcal{L}^2_r$, so bilden die Produktfunktionen

$$\varphi_{n,l,m}(\vec{x}) = \frac{1}{r}\, f_n(r)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{6.48}$$

eine Basis in $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$. – Ein anderes Beispiel bietet der Raum $\mathcal{L}^2_{(\vec{x}_1,\vec{x}_2)}$ der Ortsraum-Wellenfunktionen eines Zweiteilchensystems, der gemäß Abschnitt 4.5 als

$$\mathcal{L}^2_{(\vec{x}_1,\vec{x}_2)} = \mathcal{L}^2_{\vec{R}} \otimes \mathcal{L}^2_{\vec{r}} \tag{6.49}$$

aus den zur Schwerpunkts- und Relativbewegung gehörigen Hilberträumen aufgebaut werden kann; der Raum $\mathcal{L}^2_{\vec{r}}$, der „nach Abseparieren der Schwerpunktsbewegung“ verbleibt, wird hier als *baryzentrischer Raum* des Systems bezeichnet. – Die beiden Beispiele zeigen, daß das Zerfallen in „Teilsysteme“ sich nicht nur auf bestimmte Gruppierungen von Teilchen, sondern auch auf *verschiedene Koordinaten oder Kombinationen von Koordinaten derselben Teilchengruppierung* beziehen kann.

Kapitel 7

Observable, Spektralsatz und Vertauschbarkeit

7.1 Lineare Operatoren im Hilbertraum

Unter einem linearen Operator in $\mathcal{H}$, wie wir ihn zur mathematischen Darstellung von Meßgrößen benötigen werden, versteht man eine Abbildung A, die jedem Vektor $|\psi\rangle$ einer Linearmannigfaltigkeit $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}$, des Definitionsbereichs von A, *eindeutig* einen Bildvektor $A|\psi\rangle$ in einer anderen Linearmannigfaltigkeit $\mathcal{R}(A)$, dem Wertebereich von A, zuordnet dergestalt, daß für alle $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{D}(A)$ und alle $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$A\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right) = c_1(A|\psi_1\rangle) + c_2(A|\psi_2\rangle)\,. \tag{7.1}$$

Die Abbildung braucht nicht umkehrbar eindeutig zu sein. Sie ist es genau dann, wenn der *„Nullraum"* des Operators A, d.h. die Menge der Vektoren von $\mathcal{D}(A)$, die auf den Nullvektor 0 abgebildet werden, nur aus dem Nullvektor besteht, denn genau dann haben verschiedene Urbilder $|\psi\rangle$ auch verschiedene Bilder $A|\psi\rangle$. Es existiert dann der *inverse Operator* A^{-1} mit

$$A^{-1}A = \mathbf{1}_{\mathcal{D}(A)} \quad \text{(identische Abb. von } \mathcal{D}(A))\,. \tag{7.2}$$

Der einfachste Typ linearer Operatoren ist der des *beschränkten linearen Operators* B: Er ist auf ganz $\mathcal{H}$ definiert und „streckt" die Länge eines Vektors höchstens um einen maximalen Faktor $M > 0$:

$$\mathcal{D}(B) = \mathcal{H} \quad ; \quad \|\, B|\psi\rangle \,\| \leq M \|\, |\psi\rangle \,\| \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}\,. \tag{7.3}$$

Die kleinste derartige Schranke, d.h. die positive Zahl

$$\|B\| = \max_{|\psi\rangle \in \mathcal{H}} \frac{\|\, B\,|\psi\rangle\,\|}{\|\, |\psi\rangle\,\|}\,, \tag{7.4}$$

heißt dann die *Norm des Operators B*. Beschränkte lineare Operatoren haben die Eigenschaft, nicht nur bei Linearkombination, sondern auch bei Multiplikation, d.h. Nacheinanderausführung, wieder Operatoren derselben Art zu geben und bilden damit das einfachste Beispiel einer *Operatoralgebra* innerhalb der Menge der linearen Operatoren in $\mathcal{H}$.

Für die Quantenmechanik ist diese wohluntersuchte Operatorenklasse leider keineswegs ausreichend; *viele physikalisch wichtige Operatoren sind unbeschränkt*. Das sieht man bereits am Beispiel des Raumes $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$, wo die Operatoren zu Orts- und Impulskomponenten gegeben sind durch

$$X_k \; : \; \psi(x_1, x_2, x_3) \;\; \rightarrow \;\; x_k \cdot \psi(x_1, x_2, x_3) \qquad (k = 1, 2, 3) \, , \tag{7.5a}$$

$$P_k \; : \; \psi(x_1, x_2, x_3) \;\; \rightarrow \;\; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(x_1, x_2, x_3) \qquad (k = 1, 2, 3) \, . \tag{7.5b}$$

Verhält sich eine quadratintegrable Funktion $\psi \in \mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ etwa für $|x_1| \to \infty$ wie $const. \cdot |x_1|^{-\frac{3}{2}}$, so entsteht durch Multiplikation mit x_1 eine Funktion, deren Normierungsintegral divergiert und die deshalb nicht mehr zu $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ gehört. Hat andererseits ψ etwa bei $x_1 = 0$ eine schwache, integrable Singularität vom Typ $const. \cdot x_1^{-\frac{1}{3}}$, so wird diese durch Differentiation nach x_1 zu $x_1^{-\frac{4}{3}}$ verschärft, so daß dort wiederum das Normierungsintegral divergiert. Man muß sich damit abfinden, daß *viele physikalisch wichtige Operatoren nicht auf ganz $\mathcal{H}$ definierbar* sind.

Man begnügt sich in diesen Fällen damit, die *Operatoren auf in $\mathcal{H}$ dichten Linearmannigfaltigkeiten $\mathcal{D}(A)$* zu definieren, so daß jeder $\mathcal{H}$-Vektor wenigstens durch Vektoren aus $\mathcal{D}(A)$ beliebig genau approximierbar ist, was für viele Fragen der Quantenmechanik ausreicht. In $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ etwa ist ein geeigneter Definitionsbereich durch die Menge der beliebig oft differenzierbaren und für $|x_1| \to \infty$ schneller als jede Potenz abfallenden Funktionen, $\mathcal{F}$ (sog. Schwartzscher Raum) gegeben: Dort sind offenbar beliebige Potenzen und Potenzprodukte von $\vec{X}$ und $\vec{P}$ wohldefiniert.

Der *zu einem Operator A (mit in $\mathcal{H}$ dichtem Definitionsbereich $\mathcal{D}(A)$) adjungierte Operator $A^\dagger$* wird wie folgt definiert: $\mathcal{D}(A^\dagger)$ ist die Menge aller $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, zu denen es ein $|\varphi'\rangle \in \mathcal{H}$ mit

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle \; = \langle\varphi'|\psi\rangle \quad \forall \, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \tag{7.6a}$$

gibt, und auf diesem Definitionsbereich ist

$$A^\dagger|\varphi\rangle = |\varphi'\rangle \quad \forall \, |\varphi\rangle \in \mathcal{D}(A^\dagger) \, . \tag{7.6b}$$

Es gilt also für A und $A^\dagger$ die Beziehung

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle \;\; = \;\; \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle \tag{7.7a}$$

$$\;\; = \;\; \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle^* \, , \tag{7.7b}$$

d.h. A kann in Skalarprodukten durch Übergang zum adjungierten Operator auf den jeweils anderen Faktor „übergewälzt“ werden. – Für adjungierte Operatoren gelten – auf geeigneten Definitionsbereichen – die Beziehungen

$$(aA + bB)^\dagger = a^* A^\dagger + b^* B^\dagger \, , \tag{7.8a}$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \, , \tag{7.8b}$$

$$\langle\psi|A^\dagger = \text{ dualer Vektor zu } A|\psi\rangle \, . \tag{7.8c}$$

Im allgemeinen ist $A^{\dagger\dagger} = (A^\dagger)^\dagger$ im Sinne obiger Definition nicht gleich A, da die Definitionsbereiche völlig verschieden sein können (als Linearmannigfaltigkeiten haben sie trivialerweise mindestens den Nullvektor gemeinsam); die Beziehung gilt jedoch auf dem Durchschnitt der Definitionsbereiche:

$$(A^\dagger)^\dagger|\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad \text{für} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}((A^\dagger)^\dagger)\,. \tag{7.9}$$

Ein linearer Operator A heißt *hermitesch*, wenn für ihn gilt:

$$\mathcal{D}(A^\dagger) \supseteq \mathcal{D}(A) \;\; (\textit{dicht}) \quad \text{und} \quad A^\dagger|\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A)\,. \tag{7.10}$$

Für einen solchen Operator ist die im Hinblick auf die Quantenmechanik als *Erwartungswert* bezeichnete Zahl

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \tag{7.11}$$

für jeden Vektor aus $\mathcal{D}(A)$ *reell*, und es gilt

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^* \quad \forall\, |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \quad (A \text{ hermitesch}). \tag{7.12}$$

Wenn (7.10) bis auf ein Vorzeichen, d.h.

$$\mathcal{D}(A^\dagger) \supseteq \mathcal{D}(A) \quad \text{und} \quad A^\dagger|\psi\rangle = -A|\psi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \tag{7.13}$$

gilt, heißt A *anti- oder schiefhermitesch*. Wegen (7.9) kann ein linearer Operator F stets gemäß

$$F = \underbrace{\frac{1}{2}(F^\dagger + F)}_{F_H = F_H^\dagger} + \underbrace{\frac{1}{2}(F - F^\dagger)}_{F_A = -F_A^\dagger} \tag{7.14}$$

in einen hermiteschen und einen antihermiteschen Anteil zerlegt werden. Ist A hermitesch, so ist nach (7.8a) iA antihermitesch.

Für die Quantenmechanik bedeutsam sind nun vor allem die hermiteschen Operatoren, bei denen in (7.10) sogar die Gleichheit der Definitionsbereiche gilt: Ein Operator heißt *selbstadjungiert, wenn* $A^\dagger = A$ im Sinne von

$$\boxed{\mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{D}(A) \;\; (\textit{dicht}) \quad \text{und} \quad A^\dagger|\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A)} \tag{7.15}$$

zutrifft. Für diese Operatoren gilt $A^{\dagger\dagger} = A$ ohne Einschränkung. Sind A, B zwei selbstadjungierte Operatoren mit überlappendem Definitionsbereich, so bilden die beiden (nichthermiteschen) Operatoren

$$C_+ = A + iB \quad , \quad C_- = A - iB \tag{7.16a}$$

ein *„zueinander adjungiertes Operatorenpaar"* in dem Sinne, daß

$$(C_+)^\dagger = C_- \quad , \quad (C_-)^\dagger = C_+ \quad \text{auf} \quad \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) \tag{7.16b}$$

gilt. Ein Beispiel sind die Operatoren $l_\pm = l_x \pm i l_y$ von Kapitel 3.

Schließlich erwähnen wir den Begriff des *positiv semidefiniten Operators*: Für ihn gilt

$$\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0 \qquad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A)\,. \tag{7.17}$$

Für jedes A ist das Produkt $A^\dagger A$, sofern wohldefiniert (d.h. für $\mathcal{D}(A^\dagger) \cap \mathcal{R}(A) \neq \emptyset$), positiv semidefinit, denn auf jenem Bereich ist ja

$$\langle\psi|A^\dagger A|\psi\rangle = \langle A\psi|A\psi\rangle = \|\, A|\psi\rangle \,\|^2 \geq 0 \,. \tag{7.18}$$

Insbesondere ist *für selbstadjungiertes A das Quadrat (d.h. die wiederholte Abbildung) A^2 auf $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{R}(A)$ ein positiv semidefiniter Operator*.

7.2 Eigenwertproblem selbstadjungierter Operatoren

Gibt es im Definitionsbereich $\mathcal{D}(A)$ eines linearen Operators Vektoren $|\psi_n\rangle$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ mit

$$A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle \,, \quad a_n \in \mathbb{C} \,, \tag{7.19}$$

so heißt jedes $|\psi_n\rangle$ Eigenzustand oder *Eigenvektor von A zum Eigenwert* a_n. Zu einem Eigenwert können mehrere linear unabhängige Eigenvektoren $|\psi_{n,1}\rangle$, $|\psi_{n,2}\rangle, \ldots, |\psi_{n,d(n)}\rangle$ gehören (Entartung); ihre Anzahl $d(n)$ heißt dann *Entartungsgrad* des Eigenwerts a_n und der von ihnen aufgespannte $d(n)$-dimensionale Unterraum $\mathcal{A}_n$ von $\mathcal{H}$ der *Eigenraum von A* zu a_n; alle in ihm liegenden Vektoren sind Eigenvektoren zu a_n von A.

In der Quantenmechanik interessiert das „Eigenwertproblem" (7.19) vorwiegend für selbstadjungierte A. Hier gilt, wie schon auf S.23 für den speziellen Raum $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ diskutiert, allein auf Grund der Hermitezität

$$a_n = \frac{\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = \frac{\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle^*}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = a_n^* \,, \tag{7.20a}$$

$$(a_m - a_n)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \langle A\psi_m|\psi_n\rangle - \langle\psi_m|A|\psi_n\rangle = 0 \,, \tag{7.20b}$$

d.h. alle Eigenwerte (das „Spektrum") liegen auf der reellen Achse, und Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal; durch Orthogonalisierung innerhalb eventueller entarteter Eigenräume erreicht man, daß *o.B.d.A. die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators ein Orthonormalsystem* bilden.

Wir betrachten nun zunächst ausschließlich *selbstadjungierte Operatoren A mit „rein diskretem" Spektrum*, d.h. auf der rellen Achse isoliert liegenden Eigenwerten a_n (die aber Häufungspunkte haben können). Die zu a_n eventuell gehörenden linear unabhängigen Eigenvektoren seien durch einen Index $k = 1, 2, \ldots, d(n)$ abgezählt, also

$$A|\psi_{n,k}\rangle = a_n|\psi_{n,k}\rangle \,, \tag{7.21}$$

$$\langle\psi_{n',k'}|\psi_{n,k}\rangle = \delta_{n'n}\delta_{k'k} \,. \tag{7.22}$$

Die einzelnen Eigenräume von A können wir durch sogenannte *Projektionsoperatoren* charakterisieren. Ist $\mathcal{U}$ Unterraum von $\mathcal{H}$, so definieren wir den Projektionsoperator oder kurz *Projektor* $\Pi_{\mathcal{U}}$ *auf* $\mathcal{U}$ durch

$$\Pi_{\mathcal{U}}|\psi\rangle = \text{Projektion von } |\psi\rangle \text{ in } \mathcal{U} \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \,. \tag{7.23}$$

Ein solcher Operator ist auf ganz $\mathcal{H}$ definiert und, da beim Projizieren ein Vektor zwar verkürzt aber nie verlängert werden kann, beschränkt (und zwar mit der Norm $\|\Pi_{\mathcal{U}}\| = 1$). Aus

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\Pi_{\mathcal{U}}|\psi\rangle &= \langle\varphi|\text{Proj. von } \psi \text{ in } \mathcal{U}\rangle \\ &= \langle\text{Proj. von } \varphi \text{ in } \mathcal{U}|\text{Proj. von } \psi \text{ in } \mathcal{U}\rangle = \langle\text{Proj. von } \varphi \text{ in } \mathcal{U}|\psi\rangle = \langle\Pi_{\mathcal{U}}\varphi|\psi\rangle\end{aligned}$$

sieht man, daß $\mathcal{D}({\Pi_{\mathcal{U}}}^\dagger)$ ebenfalls ganz $\mathcal{H}$ und ${\Pi_{\mathcal{U}}}^\dagger = \Pi_{\mathcal{U}}$, d.h. jeder Projektor selbstadjungiert ist. Außerdem besitzt er die Eigenschaft der „*Idempotenz*“,

$${\Pi_{\mathcal{U}}}^2 = \Pi_{\mathcal{U}} \, , \tag{7.24}$$

weil nochmaliges Projizieren in denselben Teilraum die Projektion nicht mehr verändert. Die drei Eigenschaften

$$\Pi^\dagger = \Pi \quad , \quad \Pi^2 = \Pi \quad , \quad \|\,\Pi\,\| = 1 \tag{7.25}$$

charakterisieren Projektoren eindeutig, d.h. jeder lineare Operator mit den Eigenschaften (7.25) ist Projektor auf einen gewissen Unterraum von $\mathcal{H}$. – Wird $\mathcal{U}$ durch ein Orthonormalsystem $\{|\varphi_n\rangle \mid n = 1, 2, \ldots, d(\mathcal{U})\}$ aufgespannt, so ist für jeden Vektor

$$\Pi_{\mathcal{U}}|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d(\mathcal{U})} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \, , \quad \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{7.26}$$

oder in Analogie zu (6.23) kurz

$$\Pi_{\mathcal{U}} = \sum_{n=1}^{d(\mathcal{U})} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \sum_{n=1}^{d(\mathcal{U})} \Pi_n \, , \tag{7.27}$$

$$\text{mit} \quad \Pi_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \, . \tag{7.28}$$

Ist $\mathcal{U}$ *direkte Summe der orthogonalen Unterräume* $\mathcal{U}_i$ und sind Π_i die entsprechenden Projektoren, so gilt wegen der Orthogonalität offenbar

$$\Pi_i\Pi_j|\psi\rangle = \begin{cases} \Pi_i|\psi\rangle \, , & i = j \\ \quad 0 & , \; i \neq j \end{cases}$$

oder kurz

$$\Pi_i\Pi_j = \delta_{ij}\Pi_i \, . \tag{7.29}$$

Der Projektor auf ganz $\mathcal{U}$ ist dann sofort durch

$$\Pi_{\mathcal{U}} = \sum_i \Pi_i$$

gegeben. Ist insbesondere $\mathcal{U}$ der ganze Hilbertraum $\mathcal{H}$, also $\Pi_{\mathcal{U}} = \mathbf{1}$, so nennt man die Summenformel

$$\sum_i \Pi_i = \mathbf{1} \tag{7.30}$$

eine *„Zerlegung der Einheit" nach dem Satz der „orthogonalen Projektoren"* Π_i. Zu jedem Π_i ist durch

$$Q_i = \sum_{j \neq i} \Pi_j = \sum_j (1 - \delta_{ij})\, \Pi_j \tag{7.31}$$

ein *komplementärer Projektor* gegeben, der auf den ganzen zu $\mathcal{U}_i$ orthogonalen Raum projiziert; es gilt dann

$$\Pi_i + Q_i = \mathbf{1} \quad , \quad \Pi_i Q_i = Q_i \Pi_i = 0 \quad \forall\, i\,. \tag{7.32}$$

Wenden wir diese Überlegungen auf die orthogonalen Eigenräume $\mathcal{A}_n$ des Eigenwertproblems (7.21) an, so ist hier gemäß (7.27) der Projektor auf $\mathcal{A}_n$

$$\Pi_n = \sum_{k=1}^{d(n)} \Pi_{n,k} \quad \text{mit} \quad \Pi_{n,k} = |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}|\ ; \tag{7.33}$$

die $\Pi_{n,k}$ projizieren jeweils auf den eindimensionalen Teilraum zu einem einzigen Eigenvektor. Die für die Quantenmechanik (im Hinblick auf Messungen) wichtige Frage ist nun, *wann die direkte Summe aller dieser Eigenräume ganz $\mathcal{H}$, d.h. das Eigenvektorensystem vollständig* ist. Die Aussage des sog. Spektraltheorems der Funktionalanalysis (das wir in dieser Vorlesung nur referieren, aber an nichttrivialen Beispielen illustrieren) ist nun, daß dies *genau für die selbstadjungierten Operatoren* (7.15) zutrifft. Für sie gilt also (*noch immer unter Beschränkung auf den Fall des rein diskreten Spektrums*)

$$\sum_n \sum_{k=1}^{d(n)} |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}| \ = \ \mathbf{1}\,. \tag{7.34a}$$

(Insbesondere existieren also, wenn $\mathcal{H}$ von unendlicher Dimension ist, wegen Axiom (4) abzählbar unendlich viele linear unabhängige Eigenvektoren.) Durch Einsetzen von (7.34a) in $A = A \cdot \mathbf{1}$ ergibt sich eine entsprechende Zerlegung, die sog. *Spektraldarstellung von A*, für den Operator selbst, so daß insgesamt gilt:

$$\Pi_m \Pi_n = \delta_{mn} \Pi_n \quad , \quad \Pi_n = \sum_k |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}|\,, \tag{7.34b}$$

$$\sum_n \Pi_n = \sum_{n,k} \Pi_{n,k} = \mathbf{1}\,, \tag{7.34c}$$

$$A = \sum_n a_n \Pi_n = A^\dagger \qquad [\text{auf } \mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)]\,. \tag{7.34d}$$

Die *Zerlegung eines beliebigen Vektors* $|\psi\rangle$ nach Projektionen in diese Eigenräume ist dann als

$$|\psi\rangle = \mathbf{1} \cdot |\psi\rangle = \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \tag{7.35a}$$

$$= \sum_{n,k} \Pi_{n,k} |\psi\rangle = \sum_{n,k} |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}|\psi\rangle \tag{7.35b}$$

zu schreiben, wobei die *Betragsquadrate der Entwicklungskoeffizienten* durch

$$|\langle\psi_{n,k}|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}|\psi\rangle = \langle\psi|\Pi_{n,k}|\psi\rangle \tag{7.36a}$$

und ihre Summe über den Unterraum durch

$$\sum_{k=1}^{d(n)} |\langle\psi_{n,k}|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\Pi_n|\psi\rangle \ , \tag{7.36b}$$

d.h. durch die *Erwartungswerte der zugehörigen Projektoren* gegeben sind.

7.3 Kontinuierliches Spektrum und Spektralscharen

Wir wissen bereits aus dem Arbeiten mit speziellen $\mathcal{H}$-Darstellungen, daß viele physikalisch wichtige Operatoren ein teilweise oder völlig kontinuierliches Spektrum besitzen, insbesondere im Raum $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ der Ortsdarstellung die Orts- und Impulsoperatoren (7.5a/b). Man sieht leicht, daß für sie die obigen Überlegungen nicht einfach übernommen werden können. Z.B. müßte eine Lösung des Eigenwertproblems von (7.5a),

$$(x_k - \xi_k)\,\psi_{\vec{\xi}}(x_1, x_2, x_3) = 0 \ , \tag{7.37}$$

für alle Werte der Koordinate x_k $(k = 1, 2, 3)$ außer ξ_k verschwinden; sie könnte also nur auf einer Menge vom Maß Null (einem einzigen Punkt) $\neq 0$ sein und wäre daher stets mit dem Nullvektor von $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ zu identifizieren. Zwar hat (7.37) die *Distributionslösung*

$$\psi_{\vec{\xi}}(x_1, x_2, x_3) = \delta^3(\vec{x} - \vec{\xi}\,) = \delta(x_1 - \xi_1)\,\delta(x_2 - \xi_2)\,\delta(x_3 - \xi_3) \ , \tag{7.38}$$

aber sie ist kein Element von $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$, schon weil $|\psi_{\vec{\xi}}|^2$ überhaupt nicht existiert. Ähnlich hat das Eigenwertproblem von (7.5b) formal die ebenen Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(x_1, x_2, x_3) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{i(k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3)} \tag{7.39}$$

als Lösungen, aber diese Funktionen sind nicht quadratintegrabel, also nicht in $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$. Es ist damit klar, daß *im strengen Sinne (d.h. in $\mathcal{H}$) die Operatoren $\vec{X}, \vec{P}$ überhaupt keine Eigenvektoren und Eigenwerte haben.* Andererseits haben wir gesehen, daß wir im Hinblick auf die Interpretation von Orts- und Impulsmessungen Entwicklungen nach dem System der „uneigentlichen" Eigenfunktionen (7.39) oder (7.38) unbedingt benötigen.

Eine Verallgemeinerung der Gln. (7.34a-d), die derartige Operatoren (sofern selbstadjungiert) einzubeziehen gestattet, läßt sich so erhalten: Man führt die auf der reellen a-Achse definierte Projektorenfamilie

$$\mathcal{E}(a) = \sum_n \Theta_+(a - a_n)\,\Pi_n = \sum_{n \text{ mit } a_n \leq a} \Pi_n \tag{7.40}$$

mit der Stufenfunktion

$$\Theta_+(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \tag{7.41}$$

ein, die sich zwischen den Randwerten

$$\mathcal{E}(-\infty) = 0 \quad , \quad \mathcal{E}(+\infty) = \mathbf{1} \tag{7.42}$$

bei wachsendem a an den Stellen der Eigenwerte a_n unstetig ändert derart, daß dort jeweils der Projektor auf den Eigenraum $\mathcal{A}_n$ hinzugezählt wird. Es gilt also

$$\mathcal{E}(a_2) \geq \mathcal{E}(a_1) \quad \text{für} \quad a_2 \geq a_1 \tag{7.43}$$

in dem Sinne, daß $\mathcal{E}(a_2)$ auf den größeren Teilraum projiziert, und daß die Projektorfunktion jeweils von rechts her stetig ist gemäß

$$\lim_{\varepsilon \to 0_+} \mathcal{E}(a + \varepsilon) = \mathcal{E}(a) \, . \tag{7.44}$$

Eine projektorwertige Funktion $\mathcal{E}(a)$ auf der reellen Achse mit den Eigenschaften (7.42-7.44) heißt allgemein eine *Spektralschar; für selbstadjungierte Operatoren mit diskretem Spektrum* hat sie speziell die „Stufenform“ (7.40), d.h. sie ist *stückweise konstant bis auf Sprünge an den Stellen der Eigenwerte*. Mit dieser Spektralschar lassen sich die Gln. (7.34c/d) als (operatorwertige) Riemann-Stieltjes-Integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{E}(a) = \mathbf{1} \quad , \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{E}(a)\, a = A \tag{7.45}$$

schreiben, wobei (wegen der Beschränktheit aller Projektoren $\mathcal{E}(a)$) die Integrale als Grenzwerte von Riemann-Stieltjes-Summen im Sinne der Operatornorm (7.4) erklärt werden können. Nach der Definition des Stieltjes-Integrals geben diese Bildungen mit (7.40) gerade die Summen (7.34c/d) zurück.

Der von uns in speziellen $\mathcal{H}$-Räumen als „kontinuierliches Spektrum“ bezeichnete Fall läßt sich nun dadurch einbeziehen, daß man in Verallgemeinerung von (7.40) Spektralscharen mit den Eigenschaften (7.42-7.44) zuläßt, die auf einem Teilbereich $T(A)$ der reellen a-Achse (das kann auch die gesamte reelle Achse sein) sich nicht stufenartig sondern kontinuierlich, und zwar monoton nichtfallend im Sinne von (7.43), ändern. *Als kontinuierliches Spektrum wird dann die Menge $C(A) \subset T(A)$ der Punkte bezeichnet, in denen $\mathcal{E}(a)$ „echt wächst“*, d.h. für die sich kein Intervall $[a - \varepsilon, a + \varepsilon]$ finden läßt, in dem $\mathcal{E}(a)$ konstant ist. Das *allgemeine Spektraltheorem besagt dann, daß eine Spektralschar – im allgemeinen bestehend aus einem solchen „kontinuierlichen“ Teil $\mathcal{E}_C(a)$ und einem unstetigen Teil $\mathcal{E}_D(a)$ der Form* (7.40) –, *welche eine Zerlegung der Einheit und eine Spektraldarstellung des Operators A gemäß* (7.45) *vermittelt, genau für die selbstadjungierten Operatoren A in $\mathcal{H}$ existiert.* Die Integration über den „kontinuierlichen“ Teil $\mathcal{E}_C$ braucht dabei nur über die Menge $C(A)$ erstreckt zu werden, da außerhalb $C(A)$ ja $\mathcal{E}_C(A)$ eine Konstante, d.h. $d\mathcal{E}_C(a) = 0$ ist.

Im Bereich des kontinuierlichen Spektrums sind für jedes $a \in C(A)$ und jedes *endliche* Δ die Operatoren

$$\Pi_{a-\frac{\Delta}{2}\,\ldots\,a+\frac{\Delta}{2}} = \int_{a-\frac{\Delta}{2}}^{a+\frac{\Delta}{2}} d\mathcal{E}(a') = \mathcal{E}(a+\frac{\Delta}{2}) - \mathcal{E}(a-\frac{\Delta}{2}) \qquad (\,[a-\frac{\Delta}{2}, a+\frac{\Delta}{2}] \subseteq T(A)\,) \tag{7.46}$$

echte Projektionsoperatoren in $\mathcal{H}$, wie sich mittels der Projektoreigenschaft von $\mathcal{E}(a)$ sofort nachrechnen läßt, aber ihr Grenzwert für $\Delta \to 0$ ist nach (7.44) kein nichttrivialer Projektor, sondern stets der Nulloperator. (Andererseits ist

$$\frac{1}{\Delta}\Pi_{a-\frac{\Delta}{2}\,\ldots\,a+\frac{\Delta}{2}} \tag{7.47}$$

weder selbst Projektor, noch hat es für $\Delta \to 0$ einen Grenzwert *als* Projektor, d.h. eine projektorwertige Ableitung.) Darin spiegelt sich völlig korrekt der schon betonte Umstand wider, daß bei einem Kontinuum von Meßwerten nur die Frage nach einem *endlichen Werteintervall* sinnvoll ist, während für die Abfrage eines völlig scharfen Einzelwertes die Akzeptanz des Meßgeräts gegen Null gehen müßte.

Das Spektraltheorem läßt sich auf *operatorwertige Funktionen* $F(A)$ – definiert durch Polynome oder hinreichend konvergente Potenzreihen in A – ausdehnen und gibt dann

$$F(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{E}(a)\, F(a) \quad \text{auf} \quad \mathcal{D}(F(A))\;, \tag{7.48}$$

und der Erwartungswert der Meßgröße F im Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ lautet dann

$$\langle\psi|F(A)|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\langle\psi|\mathcal{E}(a)|\psi\rangle\, F(a)\,. \tag{7.49}$$

An die Stelle der Betragsquadrate (7.36a) tritt, da wir von einzelnen Eigenvektoren hier nicht mehr sprechen können, die Größe

$$\begin{aligned}\langle\psi|\,\Pi_{a-\frac{\Delta}{2}\,\ldots\,a+\frac{\Delta}{2}}\,|\psi\rangle &= \int_{a-\frac{\Delta}{2}}^{a+\frac{\Delta}{2}} d\langle\psi|\mathcal{E}(a')|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\mathcal{E}(a+\frac{\Delta}{2})|\psi\rangle - \langle\psi|\mathcal{E}(a-\frac{\Delta}{2})|\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{7.50}$$

Genau diese Beziehungen sind es, die wir benötigen, um die folgende *Wahrscheinlichkeitsinterpretation* der Quantenmechanik nunmehr abstrakt zu formulieren:

(a) Jeder Meßgröße ist ein linearer selbstadjungierter Operator A – bzw. eine Operatorfunktion $F(A)$ eines solchen – im Hilbertraum des Systems zugeordnet, die „*Observable*“ A. Die zugehörige Spektralschar $\mathcal{E}(a)$ definiert durch die Sprungstellen ihres unstetigen Anteils (7.40) das diskrete, durch den „Träger“ $C(A)$ ihres Kontinuumsanteils $\mathcal{E}_C$ das kontinuierliche Spektrum von A.

(b) Mögliches Resultat einer Messung jener Meßgröße ist im Bereich des diskreten Spektrums einer der isolierten Eigenwerte a_n, im Bereich des kontinuierlichen Spektrums die Feststellung, daß der Meßwert in einem Intervall $[a - \frac{1}{2}\Delta, a + \frac{1}{2}\Delta]$ liegt.

(c) Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser Meßresultate bei einer Messung an einem Zustand $|\psi\rangle$ ist im Falle des diskreten Eigenwertes durch (7.36b), im Kontinuumsfalle durch (7.50), d.h. jeweils durch den *Erwartungswert des Projektors auf den zum Meßresultat gehörenden Unterraum*, gegeben („Meßaxiom").

Aus dieser Interpretation wird die physikalische Bedeutung der Projektoren wie Π_n oder $\Pi_{a-\frac{\Delta}{2}\,\dots\,a+\frac{\Delta}{2}}$ deutlich: Sie sind jeweils die mathematische Darstellung einer „*Abfrage*", ob das System sich im zugehörigen Unterraum befindet oder nicht, und stehen somit in einem sehr allgemeinen Sinne für die möglichen *Eigenschaften* des Systems. Jede Apparatur, die ein quantenmechanisches System in einem bestimmten Zustand oder Teilraum seines Zustandsraumes präpariert oder mißt und gegen den komplementären Teilraum diskriminiert, kann mathematisch durch einen Projektor in $\mathcal{H}$ repräsentiert werden.

7.4 Uneigentliche Eigenvektoren; Erweiterter Zustandsraum

Obwohl die Spektralscharen es gestatten, die quantenmechanische Beschreibung ganz in $\mathcal{H}$, d.h. mit echten Hilbertvektoren und Projektoren durchzuführen, ist es weitaus bequemer und eleganter, „uneigentliche" Eigenvektoren – wie in (7.39) oder (7.38) im Beispiel $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ – in den Formalismus einzubeziehen und (unter Beachtung ihres unphysikalischen, weil nicht normierbaren Charakters) mit ihnen zu rechnen. Die moderne Formulierung der Quantenmechanik *erweitert daher $\mathcal{H}$ zu einem allgemeineren linearen Raum $\mathcal{N}^\times \supset \mathcal{H}$, der kein Skalarproduktraum mehr ist*, in dem dafür aber auch dem kontinuierlichen Spektrum selbstadjungierter Operatoren gewisse Eigenvektoren entsprechen. Da die Operatoren mit ganz oder teilweise kontinuierlichem Spektrum sich bei quantenmechanischen Systemen stets als Potenzprodukte oder Operatorfunktionen weniger „erzeugender Operatoren" – in der Regel der sechs Operatoren $X_k, P_k\,(k = 1, 2, 3)$ für jedes beteiligte Teilchen – darstellen lassen, geht man dabei so vor, daß man in $\mathcal{H}$ zunächst eine dichte Teilmenge, den sog. *nuklearen Raum* $\mathcal{N}$, aufsucht, die (ungeachtet des Namens!) i.a. nicht abgeschlossen und daher kein Unterraum, aber so eingeschränkt ist, daß alle für das System relevanten Operatorfunktionen dort definiert sind. Z.B. wird in vielen Fällen (die allgemeinste mathematische Charakterisierung ist für uns nicht wesentlich) der schon erwähnte Schwartzsche Raum $\mathcal{F}$, auf dem alle Potenzprodukte von X_k und P_k wohldefiniert sind, für $\mathcal{N}$ geeignet sein. – Man betrachtet nun den *zu $\mathcal{N}$ dualen Raum $\mathcal{N}^\times$ der stetigen linearen Funktionale auf $\mathcal{N}$*: Er ist, da $\mathcal{N}$ nicht

Hilbertraum ist, nicht mehr isomorph zu $\mathcal{N}$, sondern erheblich größer und sogar größer als $\mathcal{H}$! Man sieht dies sofort am Beispiel des $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$, wo ja z.B. die Funktionale

$$\psi_{\vec{x}_0}: \quad \psi(\vec{x}) \in \mathcal{F} \quad \to \quad \psi(\vec{x} = \vec{x}_0) \in \mathbb{C}\,, \tag{7.51a}$$

$$\psi_{\vec{k}_0}: \quad \psi(\vec{x}) \in \mathcal{F} \quad \to \quad \tilde{\psi}(\vec{k} = \vec{k}_0) \in \mathbb{C} \tag{7.51b}$$

(mit $\tilde{\psi}(\vec{k})$ = Fouriertransformierte von $\psi(\vec{x})$), offensichtlich nicht mehr zu $\mathcal{H}$ gehörende Funktionen bzw. Distributionen darstellen: Das erste definiert bekanntlich die δ-Distribution $\delta^3(\vec{x} - \vec{x}_0)$, das zweite steht für den Fourier-Integralkern $(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{x})$. Ein solches $\mathcal{N}^\times$-Element (Funktional), das nicht mehr im zu $\mathcal{H}$ isomorphen Teil von $\mathcal{N}^\times$ (beim $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ also: nicht mehr in der Menge der durch Integration mit quadratintegrablen Gewichtsfunktionen vermittelten Funktionale) liegt, heißt *uneigentlicher Vektor* $|\xi\rangle$; sein Wert für ein spezielles Urbildelement $|\varphi\rangle \in \mathcal{N}$ wird per Definition als *Skalarprodukt*

$$\langle \xi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \xi \rangle^* \tag{7.52}$$

erklärt. Damit kann man einerseits, da $\mathcal{N}$ dicht in $\mathcal{H}$ ist, auch $\langle \xi | \psi \rangle$ für $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \backslash \mathcal{N}$ durch eine Grenzwertbildung erklären, andererseits die Definition adjungierter und selbstadjungierter Operatoren auf $\mathcal{N}^\times$ ausweiten. Insbesondere wird für ein Element $|\xi\rangle \in \mathcal{N}^\times$ das Bild $X_k|\xi\rangle$ unter dem Ortsoperator erklärt als das Funktional mit den Werten

$$\langle X_k \xi | \varphi \rangle = \langle \xi | X_k | \varphi \rangle \quad \forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{N}\,. \tag{7.53}$$

In dem so erweiterten Zustandsraum $\mathcal{N}^\times$ haben nun auch selbstadjungierte Operatoren wie $\vec{X}$ und $\vec{P}$ vollständige Sätze von (uneigentlichen) Eigenvektoren, definiert beim konkreten $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ durch die Funktionen (7.38) bzw. (7.39), im abstrakten Raum als die Funktionale $|\vec{x}\rangle$ bzw. $|\vec{k}\rangle$ aus $\mathcal{N}^\times$, für die

$$\langle \vec{x} | X_k | \varphi \rangle = x_k \langle \vec{x} | \varphi \rangle \qquad (k = 1, 2, 3) \quad \forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{N} \tag{7.54a}$$

$$\langle \vec{k} | P_l | \varphi \rangle = \hbar k_l \langle \vec{k} | \varphi \rangle \qquad (l = 1, 2, 3) \quad \forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{N} \tag{7.54b}$$

gilt. Mit (7.53) und (7.52) kann dies als

$$X_k |\vec{x}\rangle = x_k |\vec{x}\rangle \qquad (k = 1, 2, 3)\,, \tag{7.55}$$

$$P_l |\vec{k}\rangle = \hbar k_l |\vec{k}\rangle \qquad (l = 1, 2, 3)\,, \tag{7.56}$$

d.h. in Form der bekannten Eigenwertgleichungen geschrieben werden. Nach diesem Schema ergeben sich dann auch uneigentliche Eigenvektoren $|\psi(a, \kappa)\rangle$ zum kontinuierlichen Spektrum allgemeinerer selbstadjungierter Operatoren A, wobei der Index κ eventuelle Entartungen erfaßt,

$$A|\psi(a, \kappa)\rangle = a|\psi(a, \kappa)\rangle\,, \quad a \in C(A)\,. \tag{7.57}$$

Für sie lassen sich – evtl. nach Multiplizieren mit geeigneten Konstanten – analog zu (7.22) *verallgemeinerte Orthonormierungsrelationen*

$$\langle \psi(a', \kappa') | \psi(a, \kappa) \rangle = \delta(a' - a)\, \delta(\kappa' - \kappa) \tag{7.58}$$

aufstellen, die für $(a', \kappa') = (a, \kappa)$ nochmals die Nichtnormierbarkeit der uneigentlichen Vektoren zeigen. Weiter ergeben sich in Verallgemeinerung von (7.34a-d) die *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_{n,k} |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}| \; + \int_{C(A)} da \int d\kappa \; |\psi(a,\kappa)\rangle\langle\psi(a,\kappa)| = \mathbf{1} \tag{7.59}$$

oder

$$\sum_{n} \Pi_n \; + \int_{C(A)} da \, \Pi(a) = \mathbf{1} \tag{7.60}$$

mit den „*uneigentlichen Projektoren*“

$$\Pi(a) = \int d\kappa \; |\psi(a,\kappa)\rangle\langle\psi(a,\kappa)| = \int d\kappa \; \Pi(a,\kappa) \; , \tag{7.61}$$

für die $\Pi^2(a)$ nicht mehr definiert ist, die aber die *verallgemeinerte Orthogonalitätsbeziehung*

$$\Pi(a') \, \Pi(a) = \delta(a' - a) \, \Pi(a) \tag{7.62}$$

erfüllen, und die Spektraldarstellungen

$$A \;=\; \sum_n a_n \Pi_n \; + \int_{C(A)} da \; a \, \Pi(a) \; , \tag{7.63}$$

$$F(A) \;=\; \sum_n F(a_n) \, \Pi_n \; + \int_{C(A)} da \; F(a) \, \Pi(a) \; . \tag{7.64}$$

Sie zeigen, daß bei Verwendung der uneigentlichen Vektoren und Projektoren für die Spektralschar $\mathcal{E}(a)$ von (7.45/7.48) nun formal

$$d\mathcal{E}(a) = da \, \Pi(a) \tag{7.65}$$

und für die *eigentlichen Intervallprojektoren* (7.46)

$$\Pi_{a-\frac{\Delta}{2} \, \ldots \, a+\frac{\Delta}{2}} = \int_{a-\frac{\Delta}{2}}^{a+\frac{\Delta}{2}} da' \; \Pi(a') \tag{7.66}$$

geschrieben werden kann. – Ihnen gegenüberzustellen (vgl. die Ausführungen über gemischte versus reine Zustände in Abschnitt 9.1 ist für die Eigenvektoren die Superposition

$$|\psi\rangle = \int_{\Delta a} da \int_{\Delta\kappa} d\kappa \; |\psi(a,\kappa)\rangle \tag{7.67}$$

(in der älteren Literatur als „Eigendifferential“ bezeichnet), die weder eigentlicher noch uneigentlicher Eigenvektor von A, dafür aber, wie man mit (7.58) leicht nachrechnet, *von endlicher Norm und daher Element des (als Teilraum von $\mathcal{N}^\times$ aufgefaßten)* *eigentlichen Hilbertraumes* $\mathcal{H}$ ist. Sie ist ein Spezialfall der allgemeineren *„Paketbildung"*

$$|\psi\rangle = \int_{C(A)} da \int d\kappa \; g(a,\kappa)\, |\psi(a,\kappa)\rangle \in \mathcal{H} \tag{7.68}$$

mit quadratintegrabler Gewichtsfunktion g und der Norm

$$\langle\psi|\psi\rangle \;=\int_{C(A)} da \int d\kappa \, |g(a,\kappa)|^2 \,, \tag{7.69}$$

die wir vom kräftefreien Teilchen her schon kennen.

Anmerkung:

Die zur Einführung der uneigentlichen Vektoren verwendeten „ineinandergeschachtelten" linearen Räume $\mathcal{N} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{N}^\times$ werden als *Gelfand-Tripel* bezeichnet.

7.5 Nichtvertauschbarkeit und Unschärferelationen

Um den Zustand eines Systems möglichst genau zu definieren, möchte man Meßwerte möglichst vieler Observabler gleichzeitig angeben. Dafür bestehen in der Quantenmechanik charakteristische Einschränkungen: Wir sahen schon in (3.4a-c), daß die Vertauschbarkeit

$$[A,B] = 0 \tag{7.70}$$

notwendige Bedingung dafür ist, daß zwei Observable A, B ein gemeinsames Eigenvektoren*system* besitzen. (*Einzelne* gemeinsame Eigenvektoren kann es auch bei Nichtvertauschbarkeit geben, z.B. ist ein von ϑ, φ unabhängiges $\psi(r)$ Eigenfunktion zu allen drei Bahndrehimpulskomponenten l_1, l_2, l_3 mit Eigenwert 0.) Wir können in der Sprache des Hilbertraums nun allgemein die Konsequenzen angeben, die aus der *Nichtvertauschbarkeit zweier selbstadjungierter Operatoren*,

$$[A,B] = iC \neq 0 \qquad (A^\dagger = A, B^\dagger = B)\,, \tag{7.71}$$

sich ergeben. (Das i in (7.71) wird eingeführt, um den Operator C hermitesch zu machen, da $[A,B]$ für selbstadjungierte Operatoren antihermitesch ist.) Relation (7.71) ergibt natürlich nur auf dem Definitionsbereich

$$\mathcal{D}_{[A,B]C} = \mathcal{D}(A\cdot B) \cap \mathcal{D}(B\cdot A) \cap \mathcal{D}(C) \tag{7.72}$$

einen Sinn.

Wir betrachten für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ die quadratischen Schwankungen

$$(\Delta A)^2 \;=\; \langle\psi|(A - \langle A\rangle\cdot\mathbf{1})^2|\psi\rangle = \|\,(A-\langle A\rangle)|\psi\rangle\,\|^2 \,, \tag{7.73a}$$
$$(\Delta B)^2 \;=\; \langle\psi|(B - \langle B\rangle\cdot\mathbf{1})^2|\psi\rangle = \|\,(B-\langle B\rangle)|\psi\rangle\,\|^2 \,, \tag{7.73b}$$

mit $\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$ usw. Wir erhalten nach der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung (6.11) für deren Produkt

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \quad \geq \quad & |\langle (A - \langle A\rangle)\psi | (B - \langle B\rangle)\psi\rangle|^2 \\ & = |\langle\psi|(A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)|\psi\rangle|^2 \end{aligned} \tag{7.74}$$

und verwenden für das Operatorprodukt die allgemeine Zerlegung

$$F \cdot G = \frac{1}{2}\{F, G\} + \frac{i}{2}(\,\frac{1}{i}[F, G]\,) \tag{7.75}$$

mit dem Antikommutator (4.60), die für selbstadjungiertes F und G gerade die Zerlegung (7.14) des Operatorprodukts in einen hermiteschen und antihermiteschen Anteil darstellt. Daher ist in

$$\begin{aligned}&\langle\psi|(A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)|\psi\rangle \\ &\quad = \langle\psi|\,\frac{1}{2}\{A - \langle A\rangle, B - \langle B\rangle\}\,|\psi\rangle + i\,\langle\psi|\,\frac{1}{2i}[A, B]\,|\psi\rangle\end{aligned} \tag{7.76}$$

der erste Term rein reell, der zweite rein imaginär, und wir können für (7.74) schreiben

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \quad \geq \quad & \left|\langle\psi|\,\frac{1}{2}\{A - \langle A\rangle, B - \langle B\rangle\}\,|\psi\rangle\right|^2 \\ & + \left|\,\frac{1}{2}\langle\psi|\,\frac{1}{i}[A, B]\,|\psi\rangle\,\right|^2 \;\geq\; \left|\,\frac{1}{2}\langle\psi|C|\psi\rangle\,\right|^2 .\end{aligned} \tag{7.77a}$$

Wir haben damit die *allgemeine Unschärferelation*

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle\psi|\,[A, B]\,|\psi\rangle|} \tag{7.77b}$$

bewiesen. Haben speziell zwei Operatoren P und Q die sog. kanonische Vertauschungsrelation

$$[P, Q] = \frac{\hbar}{i} \cdot \mathbf{1} \tag{7.78}$$

(sie heißen dann *zueinander kanonisch konjugierte Operatoren*), wie es für P_k und X_l bei $k = l$ zutrifft, so gilt bei normiertem $|\psi\rangle$

$$\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{1}{2}\hbar\,, \tag{7.79}$$

was die präzise Fassung von (2.8) darstellt.

Es ist zu beachten, daß (7.77a/b) *nur auf dem Bereich* (7.72) *gilt* und sinnvoll ist, da man sich sonst schnell in Widersprüche verwickelt. Z.B. haben im $\mathcal{L}^2_\varphi$-Raum der Funktionen von φ ($\varphi = 0 \ldots 2\pi$) die Operatoren $P_\varphi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, Q_\varphi = \varphi$ den kanonischen Kommutator (7.78), so daß man für jeden Vektor $\psi(\varphi)$ die Ungleichung (7.79) erwartet. Andererseits gibt es aber Funktionen – nämlich die Eigenfunktionen $(2\pi)^{-1/2}\exp(im\varphi),\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, von P_φ –, für die $\Delta P_\varphi = 0$ ist, während zugleich $\Delta Q_\varphi = \Delta\varphi$ von der Definition her nie größer als 2π sein kann, so daß für diese Funktionen $\Delta P_\varphi \cdot \Delta\varphi = 0$ ist. Der Widerspruch löst sich, wenn man bedenkt, daß, wie schon bei (3.17) diskutiert, P_φ als *selbstadjungierter* Operator nur auf dem Bereich der quadratintegrablen Funktionen $\psi(\varphi)$ mit

$$\psi(2\pi) = e^{i\alpha}\psi(0) \ , \quad \alpha = \text{Konstante} \tag{7.80}$$

definiert ist, und daß Multiplikation mit φ im allgemeinen diese Periodizität zerstört – d.h. $\varphi \cdot \psi(\varphi)$ nicht mehr in $\mathcal{D}(P_\varphi)$ liegt –, sofern nicht zusätzlich

$$\psi(2\pi) = \psi(0) = 0 \tag{7.81}$$

ist. Die Funktionen $e^{im\varphi}$ erfüllen zwar (7.80), aber nicht (7.81) und liegen daher nicht in $\mathcal{D}(P_\varphi Q_\varphi)$, so daß (7.79) nicht anwendbar ist. – Man kann dieses Beispiel verallgemeinern und schließen, daß *bei Gültigkeit von* (7.78) *Eigenvektoren zu A und B nie in* (7.72) liegen können, da man sonst für sie sehr schnell $\langle\psi|\,[A,B]\,|\psi\rangle = 0$ zeigen könnte.

Kapitel 8

Darstellungen und Transformationstheorie

8.1 Präzisierung des Darstellungsbegriffs

Hat man für ein quantenmechanisches System einen Satz miteinander kommutierender Observabler

$$A = \{A_1, A_2, \ldots, A_f\} \quad \text{mit} \quad [A_i, A_j] = 0 \tag{8.1}$$

gefunden, der nur noch triviale Erweiterungen – nämlich durch Operatorfunktionen dieser f Operatoren – zuläßt („*Maximalsatz vertauschbarer Observabler*"), so heißt *f die Zahl der Freiheitsgrade* des Systems. f kann nur aus der Erfahrung bestimmt werden; für ein System von N spinlosen Teilchen z.B. hat es den klassischen Wert $3N$. Für jedes System gibt es – schon wegen der Möglichkeit der Bildung von Operatorfunktionen – beliebig viele Maximalsätze. Für ein einzelnes spinloses Teilchen z.B. haben wir bisher die Sätze

$$\vec{X} = \{X_1, X_2, X_3\}\,, \tag{8.2}$$

$$\vec{P} = \{P_1, P_2, P_3\}\,, \tag{8.3}$$

$$\{T = \frac{1}{2m}\vec{P}^2, \vec{l}^{\,2}, l_3\}\,, \tag{8.4}$$

benutzt, während

$$\{H = T + V, \vec{l}^{\,2}, l_3\} \tag{8.5}$$

nur für $[V, \vec{l}\,] = 0$, d.h. ein Teilchen im kugelsymmetrischen Potential, ein solcher Satz ist.

Die Festlegung (durch Präparation oder Messung) des Systemzustandes auf einen *simultanen Eigenzustand eines Maximalsatzes vertauschbarer Observabler*,

$$|\alpha\rangle = |a_1, a_2, \ldots, a_f\rangle \quad \text{mit} \quad A_i|\alpha\rangle = a_i|\alpha\rangle\,, \quad i = 1, 2, \ldots, f\,, \tag{8.6}$$

(der auch uneigentlicher Eigenvektor zu einigen A_i sein darf und dann als Idealisierung für eine Festlegung auf kleine Intervalle Δ der betreffenden Meßgrößen steht) oder auf eine wohldefinierte Linearkombination solcher Zustände stellt die genaueste nach der Quantenmechanik mögliche Spezifikation des Zustandes dar; es liegt dann ein sog. *reiner Zustand* vor. Statt der Eigenwerte a_i selbst können natürlich auch sie eindeutig kennzeichnende „*Quantenzahlen*", wie der Impulsbetrag k in $\hbar^2 k^2/2m$ oder die Drehimpulsquantenzahl l in $\hbar^2 l(l+1)$, angegeben werden.

Reine Zustände $|\psi\rangle$ sind durch Angabe der Menge der Entwicklungskoeffizienten

$$\langle\alpha|\psi\rangle = \langle a_1, a_2, \ldots, a_f|\psi\rangle \quad \text{für alle } \alpha \tag{8.7}$$

bezüglich des simultanen Eigenvektorensystems eines Maximalsatzes vollständig festgelegt. Wegen der Vollständigkeitsrelation

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\!\int}_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbf{1} \tag{8.8}$$

(wobei $\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\!\int}_{\alpha}$ für eine Summation über die diskreten und Integration über die kontinuierlichen a_i steht) kann das Skalarprodukt $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ als

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\!\int}_{\alpha} \langle\alpha|\psi_1\rangle^* \langle\alpha|\psi_2\rangle \tag{8.9}$$

berechnet werden.

Die *Koeffizientensätze* (8.7) *für alle* $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ *bilden nun selbst einen zu* $\mathcal{H}$ *isomorphen Hilbertraum mit dem Skalarprodukt* (8.9). Sie bilden die *A-Darstellung oder* α*-Darstellung der möglichen Systemzustände*. Unser bisheriger, lose definierter Begriff der Darstellung wird damit präzisiert: Eine Darstellung ist eine Abbildung des abstrakten Systemhilbertraumes $\mathcal{H}$ auf den konkreten Hilbertraum der Koeffizienten-(Skalarprodukt-) Sätze (8.7) bezüglich des simultanen Eigenvektorensystems eines Maximalsatzes vertauschbarer Observabler. Die geometrische Bedeutung ist klar: Die orthonormalen Eigenvektoren (8.6) bilden ein „Achsenkreuz" im Hilbertraum, und alle Vektoren werden durch ihre „Koordinatensätze" (8.7) bezüglich dieses Achsenkreuzes beschrieben.

Die Wirkung des Operators B auf Vektoren $|\psi\rangle$ wird in der α-Darstellung durch

$$\langle\alpha'|B|\psi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\!\int}_{\alpha} \langle\alpha'|B|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \tag{8.10}$$

beschrieben. Bei rein diskreten α ist dies die Wirkung einer *Matrix* (von im allgemeinen unendlicher Dimension) mit den Elementen

$$B_{\alpha'\,\alpha} = \langle\alpha'|B|\alpha\rangle \tag{8.11}$$

auf den Spaltenvektor der $\langle\alpha|\psi\rangle$; bei rein kontinuierlichem α stellt es eine lineare *Integraltransformation*

$$\int d\alpha\, \langle\alpha'|B|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \tag{8.12}$$

mit dem Kern $B(\alpha', \alpha) = \langle\alpha'|B|\alpha\rangle$ dar. Die „*Matrixdarstellung*" $\langle\alpha'|B|\alpha\rangle$ *des Operators* B gestaltet sich besonders einfach, wenn $B^\dagger = B$ ist und eine Darstellung $\{|\beta\rangle\}$

benutzt wird, deren Basisvektoren u.a. auch Eigenvektoren zu B mit Eigenwerten b sind; dann ist im diskreten Fall

$$\langle\beta'|B|\beta\rangle = b\,\delta_{\beta'\beta} \tag{8.13}$$

eine Diagonalmatrix mit den b als Diagonalelementen und im kontinuierlichen Fall

$$\langle\beta'|B|\beta\rangle = b\,\delta^f(\beta' - \beta) \tag{8.14}$$

ein distributionsartiger „diagonaler Integralkern". Man sagt, daß B *„durch die Basis* $\{|\beta\rangle\}$ *diagonalisiert"* wird.

Als Beispiele betrachten wir die zum Maximalsatz (8.2) für ein spinloses Teilchen gehörende Darstellung der Zustände $|\psi\rangle$ durch

$$\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle = \langle x_1, x_2, x_3|\psi\rangle\ , \tag{8.15}$$

d.h. durch ihre Projektionen auf die uneigentlichen Ortseigenvektoren von Gl. (7.55), mit dem Skalarprodukt

$$\int d^3x\ \langle\vec{x}|\psi_1\rangle^*\langle\vec{x}|\psi_2\rangle\ . \tag{8.16}$$

In ihr erkennen wir die Ortsdarstellung mit dem Hilbertraum $\mathcal{L}^2_{\vec{x}}$ wieder: Die *Schrödingersche Ortsraumwellenfunktion ist vom abstrakten Standpunkt mit dem Satz der Skalarprodukte* (8.15) *zu identifizieren*. Ähnlich ist die durch (8.3) erzeugte Darstellung

$$\varphi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \langle p_1, p_2, p_3|\psi\rangle \tag{8.17}$$

unsere alte Impulsdarstellung. Der Maximalsatz (8.4) erzeugt eine Darstellung $|k, l, m\rangle$ mit kontinuierlichem $k = 0\ldots\infty$ und diskreten l und m, mit der Gl. (3.97) als

$$c_{lm}(k, t) = \langle k; l, m|\psi(t)\rangle \tag{8.18}$$

geschrieben wird. – Dagegen bilden die uns bisher bekannten simultanen Eigenvektoren zu (8.5) beim H-artigen Atom mit $V(r) \propto -1/r$, nämlich die des diskreten Spektrums von H mit den Quantenzahlen E_N oder N, l und m, noch keine Darstellung, weil sie nicht vollständig sind, solange nicht die uneigentlichen Eigenvektoren des kontinuierlichen Spektrums von H dazugenommen werden. Immerhin können wir (5.55) als

$$\langle\vec{x}\,|N, l, m\rangle = \frac{1}{r}\,f_{N,l}(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{8.19}$$

schreiben.

Als Beispiele für Matrixdarstellungen von selbstadjungierten Operatoren können wir die Diagonalform von X_k im System seiner eigenen (uneigentlichen) Eigenvektoren,

$$\langle\vec{x}'|X_k|\vec{x}\rangle = x_k\,\delta^3(\vec{x}' - \vec{x})\ , \tag{8.20}$$

oder die Ortsdarstellung der Impulsoperatoren,

$$\langle \vec{x}'|P_k|\vec{x}\rangle = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\,\delta^3(\vec{x}'-\vec{x})}{\partial x'_k}\,, \tag{8.21}$$

angeben, wobei $\partial\delta(z)/\partial z$ die durch

$$\int dz\,\frac{\partial\delta(z)}{\partial z}\,f(z) = -\left(\frac{df}{dz}\right)_{z=0}$$

definierte Distribution ist. Der Operator V der Wechselwirkung eines Teilchens mit einem äußeren Kraftfeld wird in der $\vec{x}$-Darstellung durch einen Integralkern

$$\langle \vec{x}'|V|\vec{x}\rangle \tag{8.22}$$

dargestellt; nur wenn V ein sog. *lokales Potential*, d.h. mit den Ortsoperatoren vertauschbar ist, nimmt V in der Basis $|\vec{x}\rangle$ die Diagonalgestalt

$$\langle \vec{x}'|V|\vec{x}\rangle = v(\vec{x})\;\delta^3(\vec{x}'-\vec{x}) \quad \text{für} \quad [V,\vec{X}] = 0 \tag{8.23}$$

an und wirkt dann auf die Ortsraumwellenfunktion (8.15) als reine Multiplikation mit der Potentialfunktion $v(\vec{x})$. *„Nichtlokale" Potentiale*, bei denen (8.23) nicht mehr zutrifft und die in Ortsdarstellung daher eine Integraltransformation mit dem nichtdiagonalen Kern (8.22),

$$\langle \vec{x}'|V|\psi\rangle = \int d^3x\;\langle \vec{x}'|V|\vec{x}\rangle\langle \vec{x}|\psi\rangle\,, \tag{8.24}$$

bewirken, treten bei Vielteilchensystemen häufig auf.

Die in Abschnitt 6.3 abstrakt eingeführten Tensorprodukte und Produktzustände erhalten in speziellen Darstellungen die Bedeutung von *Produktwellenfunktionen*. Für ein System von N spinlosen Teilchen etwa bilden die Operatoren der N Ortsvektoren

$$\vec{X}^{(1)}, \vec{X}^{(2)}, \ldots, \vec{X}^{(N)} \tag{8.25}$$

einen Maximalsatz, zu dem die Basis

$$|\vec{x}^{\,(1)}\vec{x}^{\,(2)}\ldots\vec{x}^{\,(N)}\rangle = |\vec{x}^{\,(1)}\rangle|\vec{x}^{\,(2)}\rangle\ldots|\vec{x}^{\,(N)}\rangle \tag{8.26}$$

(als Beispiel für (6.45)) gehört, d.h. ein Aufbau des Systemhilbertraumes als Tensorprodukt aus den Hilberträumen der Einzelteilchen. Der Produktzustand vom Typ (6.45) mit der Ortsdarstellung

$$\langle \vec{x}^{\,(1)}\ldots\vec{x}^{\,(N)}|\psi\rangle = \langle \vec{x}^{\,(1)}|\varphi^{(1)}_{n_1}\rangle\cdot\ldots\cdot\langle \vec{x}^{\,(N)}|\varphi^{(N)}_{n_N}\rangle \tag{8.27}$$

beschreibt eine *unabhängige Bewegung* der N Einzelteilchen.

8.2 Transformationen zwischen Darstellungen

Eine häufig wiederkehrende Aufgabe der Quantenmechanik ist die „Umrechnung“ von einer Darstellung $|\alpha\rangle$ in eine neue Darstellung $|\beta\rangle$ desselben Raumes. Wegen (8.8) kann man die „neuen“ Basisvektoren stets gemäß

$$|\beta\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle \tag{8.28}$$

nach den „alten“ entwickeln, und für die Koeffizientensätze gilt

$$\langle\beta|\psi\rangle = \sum_\alpha \langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle\ . \tag{8.29}$$

Hier treten die Elemente der „*Transformationsmatrix*“ bzw. bei kontinuierlichen Quantenzahlen des „*Transformationskerns*“

$$T_{\beta\alpha} \quad \text{bzw.} \quad T(\beta,\alpha) = \langle\beta|\alpha\rangle \quad \text{mit} \quad \langle\beta|\psi\rangle = \sum_\alpha T_{\beta\alpha}\,\langle\alpha|\psi\rangle \tag{8.30}$$

auf; in (8.28) sind es die Elemente der adjungierten Matrix

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = T^*_{\beta\alpha} = (T^\dagger)_{\alpha\beta}\ . \tag{8.31}$$

Diese Matrizen bzw. Integralkerne besitzen, wiederum wegen (8.8), die Eigenschaften

$$\sum_\alpha T_{\beta'\alpha}T^*_{\beta\alpha} \;=\; \sum_\alpha \langle\beta'|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\beta'\beta}\ , \tag{8.32a}$$

$$\sum_\beta T^*_{\beta\alpha'}T_{\beta\alpha} \;=\; \sum_\beta \langle\alpha'|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle = \delta_{\alpha'\alpha} \tag{8.32b}$$

oder kurz

$$(T^\dagger T)_{\alpha'\alpha} = \delta_{\alpha'\alpha} \quad , \quad (TT^\dagger)_{\beta'\beta} = \delta_{\beta'\beta}\ , \tag{8.32c}$$

wobei für ganz oder teilweise kontinuierliche Darstellungen die rechten Seiten in (8.32a-c) wieder ganz oder teilweise als δ-Distributionen zu lesen sind. Solche Matrizen bzw. Kerne heißen *unitär*; sie haben die Eigenschaft, daß sie – wie es für die physikalische Äquivalenz von Darstellungen erforderlich ist – die *Skalarprodukte* (8.9) *und damit alle meßbaren Größen invariant* lassen:

$$\sum_\beta \langle\beta|\psi_1\rangle^*\langle\beta|\psi_2\rangle \;=\; \sum_{\alpha'\alpha}\langle\psi_1|\alpha'\rangle \underbrace{\sum_\beta \langle\alpha'|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle}_{\delta_{\alpha'\alpha}} \langle\alpha|\psi_2\rangle = \sum_\alpha \langle\alpha|\psi_1\rangle^*\langle\alpha|\psi_2\rangle\ . \tag{8.33}$$

Ordnet man die Vektoren der beiden Orthonormalbasen in irgend einer Reihenfolge an, so stellt die Abbildung U, die jedem $|\alpha\rangle$ das in dieser Reihenfolge entsprechende $|\beta\rangle$ zuordnet,

$$|\alpha\rangle \;\to\; U|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad , \quad \langle\alpha'| \;\to\; \langle\alpha'|U^\dagger = \langle\beta'|\ , \tag{8.34}$$

einen linearen Operator dar, der (über die Vollständigkeitseigenschaft von $\{|\alpha\rangle\}$) auf ganz $\mathcal{H}$ definiert ist und die Eigenschaften

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbf{1} \quad (\text{oder } U^{-1} = U^\dagger) \tag{8.35}$$

besitzt, die einen sog. *unitären Operator* definieren. Dies läßt sich etwa in der $|\alpha\rangle$-Darstellung mit

$$\langle\alpha'|U|\alpha\rangle = \langle\alpha'|\beta\rangle = T^*_{\beta\alpha'} \tag{8.36}$$

direkt nachrechnen. *Jeder Darstellungswechsel im Hilbertraum definiert also einen unitären Operator U und umgekehrt.* Die Beziehung

$$\langle\beta'|A|\beta\rangle = \langle\alpha'|U^\dagger AU|\alpha\rangle \tag{8.37}$$

zeigt, daß der Abbildung (8.34) eine *Ähnlichkeitstransformation der Operatoren mit dem unitären Operator U oder „unitäre Äquivalenz“*

$$A \;\to\; U^{-1}AU \quad \text{mit} \quad U^{-1} = U^\dagger \tag{8.38}$$

entspricht. Unitäre Operatoren sind wegen

$$\langle U\psi_1|U\psi_2\rangle = \langle\psi_1|U^\dagger U|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle \tag{8.39}$$

insbesondere *isometrisch*, d.h. skalarprodukterhaltend; sie entsprechen den starren Drehungen (dargestellt durch orthogonale Matrizen) im $\mathbb{R}^3$, die Längen und Winkel invariant lassen.

Viele früher in speziellen Darstellungen gewonnene Resultate können wir nun als Transformationsmatrizen vom Typ (8.30) identifizieren. Z.B. kann

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\,, \tag{8.40}$$

die Ortsdarstellung des uneigentlichen Impulseigenvektors, nun auch als *Transformationskern von der $|\vec{p}\rangle$- in die $|\vec{x}\rangle$-Darstellung* gelesen werden und analog die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \langle\hat{r}(\vartheta,\varphi)|l,m\rangle \tag{8.41}$$

als Transformationsmatrix von der diskreten $|l,m\rangle$- in die kontinuierliche $|\hat{r}(\vartheta,\varphi)\rangle$-Darstellung. Die Entwicklung (3.103) der ebenen Welle schließlich erscheint als

$$\langle\vec{x}|\hbar\vec{k}\rangle = \int_0^\infty dk'\,k'^2 \sum_{l,m} \langle\vec{x}|k',l,m\rangle\langle k',l,m|\hbar\vec{k}\rangle \tag{8.42}$$

mit den Transformationsmatrizen

$$\langle\vec{x}|k,l,m\rangle \;=\; \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, i^l\, \frac{\hat{\jmath}_l(kr)}{kr}\, Y_{lm}(\hat{r})\,, \tag{8.43}$$

$$\langle k',l,m|\hbar\vec{k}\rangle \;=\; \frac{\delta(k'-k)}{k'k}\, Y^*_{lm}(\hat{k})\,. \tag{8.44}$$

Kapitel 9

Statistischer Operator und Zustandsreduktion

9.1 Gemischte Zustände – Statistischer Operator

Die Präparation eines reinen Zustandes ist ein seltener Idealfall und bei Systemen mit großer Anzahl f von Freiheitsgraden praktisch unmöglich. Z.B. sind oft nur die Eigenwerte eines „submaximalen" Satzes von weniger als f vertauschbaren Observablen bekannt; das System befindet sich dann mit 100% Wahrscheinlichkeit in einem Unterraum $\mathcal{U}$ von $\mathcal{H}$, der mehrdimensional und evtl. sogar noch von unendlicher Dimension ist, und mit 0% Wahrscheinlichkeit im Komplementärraum, aber innerhalb von $\mathcal{U}$ ist keine genauere Festlegung des Systemzustandes verfügbar, so daß kein definierter Zustandsvektor $|\psi\rangle$ angebbar ist. Ein allgemeinerer Fall ist der, daß man lediglich einen Satz von Wahrscheinlichkeiten p_α mit

$$0 \le p_\alpha \le 1 \quad , \quad \sum_\alpha p_\alpha = 1 \tag{9.1}$$

dafür angeben kann, daß das System sich in den eindimensionalen Unterräumen $\mathcal{U}_\alpha$ (mit zugehörigen Projektoren $\Pi_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$) zu den Eigenwerten α eines Maximalsatzes aufhält.

Dieselbe Situation entsteht, wenn mehrere gleichartige Systeme in verschiedenen reinen Zuständen präpariert, dann aber in einem bestimmten Verhältnis gemischt werden, etwa eine Menge von Atomen mit Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 2$, von denen je 20% einen der fünf zugehörigen L_z-Eigenwerte $m = -2$ bis $+2$ haben. In allen diesen Fällen sog. *unvollständig präparierter oder gemischter Zustände* wäre die Angabe eines Zustandsvektors $|\psi\rangle$, etwa als wohldefinierte Linearkombination der Basisvektoren $|\alpha\rangle$, inkorrekt, weil sie mehr Information vortäuschen würde, als tatsächlich gegeben ist.

Die Beschreibung gemischter Zustände geht von der Beobachtung aus, daß ein reiner Zustand statt durch $|\psi\rangle$ auch durch den Projektor

$$\Pi_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (\text{wenn } \langle\psi|\psi\rangle = 1) \tag{9.2}$$

auf den zugehörigen eindimensionalen Teilraum eindeutig charakterisiert werden kann. (Diese Beschreibung hat sogar Vorteile, weil $|\psi\rangle$ nur bis auf eine beliebige

Phase $e^{i\alpha}$ festgelegt ist, die sich in Π_ψ heraushebt!) Der Erwartungswert eines linearen Operators A kann unter Benutzung irgend einer Orthonormalbasis $\{|\varphi_n\rangle\}$ als

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|A|\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle\varphi_n|A|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|(A\cdot\Pi_\psi)|\varphi_n\rangle \end{aligned} \tag{9.3}$$

geschrieben werden. Die Größe

$$\mathrm{Tr}\, B = \sum_n \langle\varphi_n|B|\varphi_n\rangle \tag{9.4}$$

heißt die *Spur des Operators* B; sie hat, sofern sie konvergiert, die Eigenschaften

$$\mathrm{Tr}\,(B_1\cdot B_2\cdot\ldots\cdot B_N) = \mathrm{Tr}\,(B_N\cdot B_1\cdot\ldots\cdot B_{N-1}) \tag{9.5}$$

(Invarianz gegen „zyklische“ Vertauschung der Operatorfaktoren) und als Folge davon

$$\mathrm{Tr}\,(M^{-1}BM) = \mathrm{Tr}\,B \tag{9.6}$$

(Invarianz gegen Ähnlichkeitstransformation mit einem invertierbaren Operator M). Insbesondere ist also die *Spur unabhängig von der Wahl der Basis* $\{|\varphi_n\rangle\}$, weil nach (8.34) ein Basiswechsel durch Ähnlichkeitstransformation mit einem unitären Operator U erfolgt. In dieser Schreibweise haben wir also für einen reinen Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\,(A\cdot\Pi_\psi)\,. \tag{9.7}$$

Diese Beschreibung läßt sich nun geradewegs auf den „gemischten“ Fall verallgemeinern, indem man das System statt durch (9.2) durch die mit den Wahrscheinlichkeiten (9.1) gewichtete Projektorensumme

$$W = \sum_\alpha p_\alpha \Pi_\alpha \qquad (\,\Pi_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|\,)\,, \tag{9.8}$$

den *statistischen Operator*, charakterisiert. Dieser Operator ist offensichtlich in der α-Darstellung diagonal,

$$\langle\alpha'|W|\alpha\rangle = \delta_{\alpha'\alpha}\,p_\alpha\,, \tag{9.9}$$

die *Wahrscheinlichkeiten* p_α *sind seine Eigenwerte.* Lautet die Information allgemeiner, daß das System sich mit den Wahrscheinlichkeiten p_γ in den eindimensionalen Teilräumen zu den Linearkombinationen

$$|\gamma\rangle = \sum_\alpha g_{\gamma\alpha}|\alpha\rangle \quad \text{mit} \quad \langle\gamma'|\gamma\rangle = \delta_{\gamma'\gamma} \tag{9.10}$$

aufhält, so ist der statistische Operator als

$$W = \sum_{\gamma} p_\gamma |\gamma\rangle\langle\gamma| = \sum_{\alpha'\alpha} |\alpha'\rangle w_{\alpha'\alpha} \langle\alpha| \tag{9.11a}$$

$$\text{mit } w_{\alpha'\alpha} = \sum_{\gamma} g_{\gamma\alpha'}\, p_\gamma\, g^*_{\gamma\alpha} \quad (= w^*_{\alpha\alpha'}) \tag{9.11b}$$

anzusetzen, d.h. in der $|\alpha\rangle$-Basis *nicht diagonal*; seine Matrixdarstellung $w_{\alpha'\alpha} = \langle\alpha'|W|\alpha\rangle$ wird dann auch als *Dichtematrix* bezeichnet. An allgemeinen Eigenschaften von W sind hervorzuheben:

(a) *W ist selbstadjungiert*, da es eine Summe von Projektoren mit reellen Koeffizienten ist,

$$W^\dagger = W\ , \tag{9.12}$$

und überdies *beschränkt*, da seine Eigenwerte die Summe 1 haben:

$$\|\, W|\psi\rangle \,\| \le \sum_{\alpha} p_\alpha \,\|\, \Pi_\alpha |\psi\rangle \,\| \le \overbrace{(\sum_{\alpha} p_\alpha)}^{1} \,\|\, |\psi\rangle \,\|\ . \tag{9.13}$$

(b) Es gelten die *Spurrelationen*

$$\mathrm{Tr}\, W = \sum_{\alpha'\alpha} p_\alpha \langle\alpha'|\Pi_\alpha|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} p_\alpha = 1\ , \tag{9.14}$$

$$\mathrm{Tr}\,(W^2) = \sum_{\alpha'} \sum_{\alpha_1\alpha_2} p_{\alpha_1} p_{\alpha_2} \langle\alpha'|\underbrace{\Pi_{\alpha_1}\Pi_{\alpha_2}}_{\delta_{\alpha_1\alpha_2}\Pi_{\alpha_1}}|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} p_\alpha^2 \le 1\ . \tag{9.15}$$

(c) Der *Sonderfall eines reinen Zustandes* ergibt sich für

$$p_\gamma = \begin{cases} 1 & \text{für } \gamma = \gamma_0\ , \\ 0 & \text{für alle übrigen } \gamma\ , \end{cases} \tag{9.16}$$

denn dann wird $W = |\gamma\rangle\langle\gamma| = \Pi_\gamma$. Dies tritt genau dann ein, wenn in (9.15) $\mathrm{Tr}\,(W^2) = 1$ ist.

(d) *Erwartungswerte* von selbstadjungierten Operatoren A, die man für gemischte Zustände (9.8) als

$$\langle A\rangle = \sum_{\alpha} p_\alpha \langle\alpha|A|\alpha\rangle \tag{9.17}$$

definieren wird, lassen sich mit der in (9.3) vorgenommenen Umformung als

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\,(AW) \quad (\, = \mathrm{Tr}\,(WA)\,) \tag{9.18}$$

berechnen. Kennt man die Spektraldarstellung (7.45) von A, so kann man auch das äquivalente Stieltjes-Integral

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d[\mathrm{Tr}(W\mathcal{E}(a))] \cdot a \tag{9.19}$$

benutzen.

Als *Beispiel* betrachten wir im Hilbertraum zu den Winkelfreiheitsgraden (ϑ, φ) eines Teilchens mit der Orthonormalbasis $|l, m\rangle$ einmal den reinen Zustand

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \cdot |1, 0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot |1, 1\rangle \,, \tag{9.20}$$

zum anderen den gemischten Zustand

$$W = \frac{1}{3} \cdot |1, 0\rangle\langle 1, 0| + \frac{2}{3} \cdot |1, 1\rangle\langle 1, 1| \,, \tag{9.21}$$

und berechnen beide Male den Erwartungswert von

$$L_x = \hbar l_x = \frac{\hbar}{2}(l_+ + l_-) \tag{9.22}$$

unter Benutzung von (3.40). Für (9.20) wird

$$\langle L_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\Big[\frac{\sqrt{2}}{3} \underbrace{\langle 1, 1|l_+|1, 0\rangle}_{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{2}}{3} \underbrace{\langle 1, 0|l_-|1, 1\rangle}_{\sqrt{2}}\Big] = \frac{2}{3}\hbar \,, \tag{9.23}$$

für (9.21) dagegen

$$\langle L_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\Big[\frac{1}{3} \underbrace{\langle 1, 0|l_+ + l_-|1, 0\rangle}_{0} + \frac{2}{3} \underbrace{\langle 1, 1|l_+ + l_-|1, 1\rangle}_{0}\Big] = 0 \,. \tag{9.24}$$

9.2 Zustandsänderung durch Messungen

Ein zu einem Anfangszeitpunkt präparierter Zustand (9.8) oder (9.11a) kann sich im Laufe der Zeit auf zweierlei Arten verändern. Solange keine weiteren Präparations- oder Meßakte erfolgen, folgt das System seiner eigenen Dynamik („normale" Zeitentwicklung; Kap. 10). Wir fassen hier die Zeitpunkte ins Auge, wo durch weitere Messungen in diesen „normalen" Zeitablauf eingegriffen wird. Hierbei tritt – wenn auch meist nur für einen ganz kurzen Zeitraum – das System in intensive Wechselwirkung mit einer *Meßapparatur*, die stets ein *makroskopisches* (d.h. extrem viele Freiheitsgrade aufweisendes und meist in guter Näherung die Gesetze der klassischen Physik befolgendes) zweites System darstellt, so daß für eine genaue Beschreibung der Vorgänge während des Meßaktes eigentlich das gekoppelte Gesamtsystem quantenmechanisch behandelt werden müßte. Da eine solche Beschreibung im Hinblick auf die Kompliziertheit realer Meßapparaturen ohnehin früher oder später einschneidende Idealisierungen und Vereinfachungen erfordert, begnügen wir uns hier mit der einfachsten, *völlig schematisierten*, aber für die Anwendung der Quantenmechanik auch völlig ausreichenden Feststellung, daß das System während des als zeitlich punktartig idealisierten Meßaktes zur Zeit t unter dem Zwang der Wechselwirkung mit dem maskroskopischen Meßapparat *diskontinuierlich, jedoch unter Erhaltung der Normierung* $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ *bzw.* $\mathrm{Tr}\, W = 1$, *von einem Anfangszustand* $W_I = W(t-0)$ *in einen neuen Zustand* $W_{II} = W(t+0)$ *„gedreht"* wird, der sich dann zunächst wieder „normal" weiterentwickelt. Für den Zusammenhang zwischen W_I und W_{II} gelten dabei folgende Feststellungen:

(a) Ist über das quantenmechanische System außer seiner bloßen Existenz überhaupt nichts bekannt, so ist seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit offenbar „homogen" über alle Unterräume $\mathcal{U}_\alpha$ von $\mathcal{H}$ verteilt, und man wird in Verallgemeinerung von (9.8)

$$W'(t-0) = \mathbf{1} \tag{9.25}$$

ansetzen. Dies ist, wie die Bezeichnung W' andeutet, *im strengen Sinne kein statistischer Operator*, da seine Spur divergiert. Die mit ihm gebildeten Erwartungswerte $\langle A\rangle' = \mathrm{Tr}\, A$ taugen deshalb, sofern sie überhaupt existieren, lediglich zur Berechnung *relativer Wahrscheinlichkeiten* wie

$$\frac{\langle A_1\rangle'}{\langle A_2\rangle'} = \frac{\mathrm{Tr}\, A_1}{\mathrm{Tr}\, A_2}\,. \tag{9.26}$$

Dies ist insbesondere dann sinnvoll, wenn $\langle A_{1,2}\rangle'$ die (unnormierten) Wahrscheinlichkeiten für das Auffinden des Systems in gewissen endlichdimensionalen Teilräumen $\mathcal{U}_{1,2}$, d.h. $A_{1,2}$ die Projektoren $\Pi_{\mathcal{U}_1}, \Pi_{\mathcal{U}_2}$ darstellen, denn die *Spur eines Projektors ist gleich der Dimension des Teilraumes*, auf den er projiziert.

(b) Wird bei dieser „Vorinformation" $W_I' = \mathbf{1}$ nun ein Eigenwert b einer Observablen B (oder die simultanen Eigenwerte eines „submaximalen" Satzes von Observablen B_i) gemessen, so erfolgt der diskontinuierliche Übergang

$$W'(t-0) = \mathbf{1} \quad \longrightarrow \quad W'(t+0) = \Pi_b\,, \tag{9.27}$$

wobei Π_b der Projektor auf den Unterraum zu jenem Eigenwert bzw. Eigenwertsatz ist. Ist dieser Unterraum *von unendlicher Dimension – und dies ist insbesondere der Fall, wenn* Π_b *ganz oder teilweise auf Intervalle in kontinuierlichen Spektren* projiziert –, so ist dies noch immer ein „unnormierter" statistischer Operator, mit dem lediglich relative Wahrscheinlichkeiten

$$\frac{\mathrm{Tr}\,(A_1\Pi_b)}{\mathrm{Tr}\,(A_2\Pi_b)} \tag{9.28}$$

berechnet werden können. Ist aber $\mathcal{U}_b$ von endlicher Dimension, so kann man in (9.27) auch den „echten“, normierten statistischen Operator

$$W(t+0) = \frac{\Pi_b}{\mathrm{Tr}\,\Pi_b} \tag{9.29}$$

einsetzen, der sich nun gemäß der späteren Gl. (10.20) „normal“ weiterentwickelt, bis weitere Meßakte erfolgen.

Als Beispiel für den ersten Fall betrachten wir den Akt der Lokalisierung eines Teilchens auf den Bereich $x_0 - \Delta/2 \le x \le x_0 + \Delta/2$, $y_0 - \Delta/2 \le y \le y_0 + \Delta/2$, während die z-Koordinate völlig unbekannt bleibt. Das zugehörige W' ist

$$W'(t+0) = \int_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} dx \int_{y_0-\frac{\Delta}{2}}^{y_0+\frac{\Delta}{2}} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \; |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \tag{9.30}$$

mit den uneigentlichen Projektoren $|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$. Ein Beispiel für den zweiten Fall ist die Messung eines Bahndrehimpuls-Betragsquadrates $\hbar^2 l(l+1)$ *ohne* gleichzeitige Messung der Drehimpulskomponente in einer bestimmten Raumrichtung; ihr entspricht, wenn vorher $W'(t-0) = \mathbf{1}$ vorlag,

$$W(t+0) = \frac{1}{2l+1}\,\Pi_l \quad \text{mit} \quad \Pi_l = \sum_{m=-l}^{+l} |l,m\rangle\langle l,m|\,. \tag{9.31}$$

(c) Liegt bei $t-0$ *mehr „Vorinformation“* W_I *als die triviale* von (9.25) vor, so ist (9.27/9.29) offenbar nicht ausreichend – es sei denn, es erfolge eine vollständige Präparation, wobei Π_b zum Projektor Π_α auf einen eindimensionalen Teilraum und $W(t+0)$ unabhängig von der Vorinformation zum reinen Zustand $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ wird. In jedem anderen Falle, d.h. *für* $\dim\mathcal{U}_b > 1$, *muß innerhalb von* $\mathcal{U}_b$ *die „alte“ Information zumindest bezüglich relativer Wahrscheinlichkeiten bestehen bleiben*, da die Messung ja innerhalb $\mathcal{U}_b$ keine kleineren Teilräume mehr auszeichnet. An die Stelle von (9.27) tritt daher im allgemeinen Falle

$$\boxed{W'_I = W'(t-0) \longrightarrow W'(t+0) = \Pi_b\, W'_I\, \Pi_b \;=\; W'_{II}} \tag{9.32a}$$

oder, wenn $\dim\mathcal{U}_b < \infty$,

$$\boxed{W_I = W(t-0) \longrightarrow W(t+0) = \frac{\Pi_b W_I \Pi_b}{\mathrm{Tr}\,(W_I \Pi_b)} = W_{II}} \tag{9.32b}$$

(beim Nennerfaktor $\mathrm{Tr}\,(\Pi_b W_I \Pi_b)$ beachte (9.5)!). Dieser diskontinuierliche Übergang, von dem (9.27) ein Spezialfall ist, wird als *Zustandsreduktion* beim

Meßprozeß bezeichnet. Man rechnet leicht nach, daß mit (9.32a/b) für Meßwahrscheinlichkeiten bezüglich echter Unterräume $\mathcal{U}_{c_1}, \mathcal{U}_{c_2}$ von $\mathcal{U}_b$ gilt:

$$\frac{\mathrm{Tr}\,(\Pi_{c_1} W_{II})}{\mathrm{Tr}\,(\Pi_{c_2} W_{II})} = \frac{\mathrm{Tr}\,(\Pi_{c_1} W_{I})}{\mathrm{Tr}\,(\Pi_{c_2} W_{I})} \qquad \text{für} \quad \Pi_{c_1}, \Pi_{c_2} < \Pi_b\,, \tag{9.33}$$

denn hier ist ja $\Pi_{c_{1,2}} \Pi_b = \Pi_{c_{1,2}}$.

Die Projektoren Π_b sind natürlich in der Basis der simultanen Eigenvektoren der gemessenen Observablen B_i diagonal, aber wegen

$$[W_{II}, B_i] = \Pi_b\,[W_I, B_i]\,\Pi_b \tag{9.34}$$

muß dies nicht notwendig auch für den Zustand W_{II} selbst gelten: Der durch eine Messung von Observablen B_i etablierte neue Zustand W_{II} ist bezüglich deren Eigenwerten diagonal (d.h. schwankungsfrei) nur dann, wenn die „Vorinformation“ W_I mit diesen Observablen verträglich, d.h. vertauschbar war.

Anmerkungen:

(a) In der klassischen Physik unterstellen wir stets stillschweigend, daß Messungen im Prinzip mit beliebig kleiner Störung des zu messenden Systems ausführbar sind. Die obige Diskussion zeigt, daß davon in der Quantenmechanik keine Rede sein kann; Messungen sind prinzipiell massive, den Zeitablauf diskontinuierlich abändernde Eingriffe in das System, und die Formulierung ihrer Auswirkung etwa durch (9.32a/b) ist wichtiger Bestandteil der Theorie.

(b) Liegt ein gemischter Zustand eines Systems vor, so muß man sich davor hüten, davon zu reden, das System befinde sich ja eigentlich in einem gewissen reinen Zustand, den man nur leider nicht genau kenne. Solche Behauptungen sind nach den Regeln der Quantenmechanik inhaltsleer, weil nie verifizier- oder falsifizierbar: Um sie nachzuprüfen, müßte man Meßakte vornehmen, die gemäß (9.32a/b) genau jenes W_I unvermeidlich zerstören würden, über das man die Behauptungen aufgestellt hat. Der statistische Operator ist kein Notbehelf, sondern die korrekte, vollständige und einzige Beschreibung des quantenmechanischen Zustandes.

Kapitel 10

Bilder der zeitlichen Entwicklung

10.1 Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild

Die Beschreibung der „normalen“, nicht durch Messungen unterbrochenen Zeitentwicklung können wir z.B. so vornehmen, daß wir den Zustandsvektor bzw. statistischen Operator des Systems, wie früher die Wellenfunktion der $\vec{x}$-Darstellung, als differenzierbare vektor- bzw. operatorwertige Funktion der Zeit t auffassen. Dabei ist t *weder Observable noch Eigenwert einer Observablen*, sondern einfach ein reeller Parameter.

Wir betrachten zunächst einen zur Zeit t_0 präparierten reinen Zustand $|\psi(t_0)\rangle$. Der lineare Operator $U(t, t_0)$, der *jedem* möglichen $|\psi(t_0)\rangle$ (d.h. jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$) das daraus zu einer anderen Zeit t entstehende $|\psi(t)\rangle$ zuordnet, beschreibt vollständig die Dynamik des Systems; er wird *Zeitentwicklungs- oder Evolutionsoperator* genannt:

$$|\psi(t_0)\rangle \;\to\; |\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \; . \tag{10.1}$$

Da jeder Bildzustand $|\psi(t)\rangle$ Ausgangspunkt weiterer Zeitentwicklung sein kann, muß $\mathcal{R}(U) = \mathcal{D}(U) =$ ganz $\mathcal{H}$ sein, und die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit,

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad \forall\, t \, , \tag{10.2}$$

erfordert dann, daß $U(t, t_0)$ unitär ist:

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = \mathbf{1} \quad \text{oder} \quad U^{-1}(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0) \, . \tag{10.3}$$

Bei Aufteilung der Zeitentwicklung in zwei Etappen $t_0 \ldots t_1$ und $t_1 \ldots t_2$ muß

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0) \tag{10.4}$$

gelten, woraus für $t_2 = t_0$

$$U(t_2, t_1) = [U(t_1, t_2)]^{-1} = U^\dagger(t_1, t_2) \tag{10.5}$$

folgt, denn es ist ja definitionsgemäß

$$U(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad \text{(für alle } t_0\text{)}. \tag{10.6}$$

Parameterabhängige Operatoren, die wie hier kontinuierlich aus der Identität sich entwickeln, charakterisiert man stets am besten durch ihr Verhalten in der *Nähe* *der Identität („infinitesimale“ Operatoren).* Für kleine Zeitintervalle dt gilt

$$U(t+dt,t) = \mathbf{1} + \delta U(t,dt) \tag{10.7a}$$

$$\delta U(t,dt) = \left[\frac{\partial U(t',t)}{\partial t'}\right]_{t'=t} \cdot dt\,. \tag{10.7b}$$

Die Unitaritätseigenschaft ergibt, daß

$$(\mathbf{1}+\delta U^\dagger)(\mathbf{1}+\delta U) = \mathbf{1} + (\delta U^\dagger + \delta U) + O((\delta U)^2)$$

gleich $\mathbf{1}$, d.h. δU antihermitesch sein muß,

$$\delta U^\dagger = -\delta U\,. \tag{10.8}$$

Außerdem ist es nach (10.7b) proportional zu dt. Schreibt man also

$$\delta U(t,dt) = \frac{1}{i\hbar} H(t)\,dt\,, \tag{10.9}$$

so ist der *hierdurch definierte Operator $H = H(t)$, der Hamiltonoperator des Systems, selbstadjungiert,*

$$H^\dagger(t) = H(t) \quad \forall\, t\,, \tag{10.10}$$

und von der Dimension Energie; in der Tat erweist er sich als der Operator zur Gesamtenergie des Systems. Er heißt im Hinblick auf (10.9) auch der *„erzeugende Operator“ oder Generator der (infinitesimalen) Zeitentwicklung.* Die Schreibweise betont, daß er im allgemeinen selbst zeitabhängig ist; seine Werte zu verschiedenen Zeiten brauchen nicht zu kommutieren:

$$[H(t_1), H(t_2)] \overset{\text{i.a.}}{\neq} 0 \quad \text{für} \quad t_1 \neq t_2\,. \tag{10.11}$$

Durch Kombination von (10.7a) und (10.9) mit der aus (10.4) folgenden Beziehung

$$U(t+dt,t_0) - U(t,t_0) = [U(t+dt,t) - \mathbf{1}]\,U(t,t_0) \tag{10.12}$$

ergibt sich die Differentialgleichung für U

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,U(t,t_0) = H(t)\,U(t,t_0)\,, \tag{10.13}$$

in der t_0 als Parameter auftritt und die mit der Anfangsbedingung (10.6) zu lösen ist. Äquivalent zu diesem Anfangswertproblem ist die Integralgleichung

$$U(t,t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,H(t')\,U(t',t_0)\,, \tag{10.14}$$

eine *lineare, inhomogene Integralgleichung vom Volterraschen Typ,* d.h. mit der Variablen t als oberer Integralgrenze. Für die Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors (10.1) ergibt sich

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle\,, \tag{10.15}$$

also die uns bekannte, aber nun für abstrakte Zustandsvektoren geschriebene *Schrödingergleichung*. Für die Zeitveränderlichkeit der *Meßwahrscheinlichkeiten*

$$P_{\mathcal{U}}(t) = \langle\psi(t)|\Pi_{\mathcal{U}}|\psi(t)\rangle \tag{10.16}$$

ergibt sich daraus wie in (4.57)

$$\frac{d}{dt}P_{\mathcal{U}}(t) = \langle\psi(t)|\,\frac{i}{\hbar}[H(t),\Pi_{\mathcal{U}}]\,|\psi(t)\rangle\,, \tag{10.17}$$

was selbst wieder ein Erwartungswert eines selbstadjungierten Operators ist.

Bei gemischten Zuständen müssen wir die Zeitentwicklung eines statistischen Operators

$$W(t_0) = \sum_{\alpha'\alpha} w_{\alpha'\alpha}(t_0)|\alpha'\rangle\langle\alpha| \quad , \quad \mathrm{Tr}\, W(t_0) = 1 \tag{10.18}$$

verfolgen. Die $|\alpha\rangle$ sind dabei simultane Eigenvektoren eines aus Operatoren wie $\vec{X}, \vec{P}, \vec{L}, T$ usw. aufgebauten und daher zeitunabhängigen Maximalsatzes von Observablen und tragen daher keinen Index t_0; wohl aber entwickeln sie sich für $t \neq t_0$ gemäß (10.1) in andere Zustände

$$|\alpha\rangle \;\to\; U(t,t_0)|\alpha\rangle \quad , \quad \langle\alpha| \;\to\; \langle\alpha|U^\dagger(t,t_0)\,. \tag{10.19}$$

Damit ergibt sich für die *Zeitentwicklung von W* die Ähnlichkeitstransformation

$$W(t) = U(t,t_0)\,W(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,, \tag{10.20}$$

die gemäß (9.6) die Gesamtwahrscheinlichkeit erhält:

$$\mathrm{Tr}\, W(t) = \mathrm{Tr}\, W(t_0) \quad \forall\, t\,. \tag{10.21}$$

Um sie differentiell zu charakterisieren, bildet man mit (10.13)

$$\frac{d}{dt}W(t) = \Big(\frac{1}{i\hbar}HU\Big)W(t_0)U^\dagger + UW(t_0)\Big(-\frac{1}{i\hbar}U^\dagger H\Big)$$

und erhält die sog. *quantenmechanische Liouville-Gleichung oder von-Neumann-Gleichung*

$$\frac{d}{dt}W(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t),W(t)]\,. \tag{10.22}$$

Sie zeigt insbesondere, daß ein Anfangszustand, dessen statistischer Operator $W(t_0)$ in der Energie diagonal, d.h. mit H vertauschbar ist, unverändert bleibt, wenn H selbst nicht explizit zeitabhängig ist:

$$W(t) = W(t_0) = const.\,, \quad \text{wenn} \quad \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad \text{und} \quad [H, W(t_0)] = 0\,. \tag{10.23}$$

Dieser Fall liegt insbesondere bei den Gleichgewichtszuständen der statistischen Mechanik vor. Für die *Zeitveränderlichkeit der Erwartungswerte*

$$\langle A\rangle_t = \mathrm{Tr}\,[A\cdot W(t)] \tag{10.24}$$

nicht explizit zeitabhängiger Operatoren A ergibt sich, wenn man die aus (9.5) folgende Umformung

$$\mathrm{Tr}\,(A \cdot [H, W]) = \mathrm{Tr}\,([A, H] \cdot W) \tag{10.25}$$

benutzt, die Verallgemeinerung von (4.57) für gemischte Zustände

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = -\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\,([A, H(t)] \cdot W(t)) = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A]\rangle_t \,. \tag{10.26}$$

Eine wichtige Anwendung der letzten Beziehung ergibt sich daraus, daß nach der Unschärferelation (7.77b)

$$\frac{1}{2}\left|\langle [H, A]\rangle_t\right| \leq (\Delta A)_t \cdot (\Delta H)_t \tag{10.27}$$

gilt[1]. Man erhält damit *für jedes Zeitintervall $t \ldots t + dt$ und jede Observable A*

$$(\Delta H)_t \cdot dt \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle A\rangle_t}{(\Delta A)_t}\right| \,, \tag{10.28}$$

was die präzise Fassung der sog. *„Energie-Zeit-Unschärferelation"* darstellt. Da der Absolutbetrag rechter Hand dimensionslos und bei vielen praktischen Problemen zu allen Zeiten etwa von der Größenordnung 1 ist, wird sie oft salopp als „$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$" geschrieben, was aber natürlich quantenmechanisch keinen Sinn ergibt, da der Zeit t, wie betont, kein selbstadjungierter Operator und damit auch keine Schwankung zugeordnet ist.

10.2 Berechnung des Evolutionsoperators

Ist der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad \forall\, t \,, \tag{10.29}$$

so hat (10.13/10.6) die eindeutige Lösung

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} = U(t - t_0) \,, \tag{10.30}$$

die nur noch von der Differenz $t - t_0$ abhängt, d.h. die Dynamik ist dann invariant gegen zeitliche Translationen $(t, t_0) \to (t + \Delta t, t_0 + \Delta t)$. Die Exponentialfunktion in (10.30) ist durch ihre Reihenentwicklung definiert und macht wegen

$$U^\dagger(t - t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} = U^{-1}(t - t_0) \tag{10.31}$$

die Unitarität von U manifest. Statt Gl. (10.4), in der die beiden Operatorfaktoren am mittleren Zeitpunkt t_1 „zusammenpassen" müssen, gilt nun allgemeiner

$$e^{-\frac{i}{\hbar}t_m H}\, e^{-\frac{i}{\hbar}t_n H} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t_m + t_n)H} \,, \tag{10.32}$$

d.h. das Produkt zweier Evolutionsoperatoren gibt stets wieder einen solchen: Die *Evolutionsoperatoren zu verschiedenen Zeitintervallen $t - t_0$ bilden im Falle* (10.29) *eine einparametrige Gruppe unitärer Operatoren mit dem Parameter $-\infty < t - t_0 < +\infty$, die auch abelsch,* d.h. kommutativ ist und mit $U(1)$ bezeichnet wird.

[1] Wir haben dies dort für reine Zustände gezeigt; es gilt aber ebenso für gemischte.

Natürlich ist (10.30) nur eine formale Lösung, solange man nicht die exakten Eigenwerte von H kennt. Hat man diese aber bestimmt, d.h. ist die Spektraldarstellung

$$H = \sum_{n,k} E_n |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}| \; + \int_{C(H)} dE \int d\kappa \; E \; |\psi_{E,\kappa}\rangle\langle\psi_{E,\kappa}| \tag{10.33}$$

bekannt, so kann man (7.48) anwenden und erhält

$$\begin{aligned} U(t-t_0) &= \sum_{n,k} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}| \\ &\quad + \int_{C(H)} dE \int d\kappa \; e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E} |\psi_{E,\kappa}\rangle\langle\psi_{E,\kappa}| \, , \end{aligned} \tag{10.34}$$

also folgendes Bild der Zeitentwicklung: *Die Komponenten des Ausgangszustandes* $|\psi(t_0)\rangle$ *in den verschiedenen Eigenräumen von* H *werden jeweils mit den für stationäre Zustände charakteristischen Phasenfaktoren* $\exp(-i\omega(t-t_0))$ *mit Frequenzen* $\omega = E/\hbar$ *multipliziert und dann wieder superponiert.* Zur vollständigen Aufschlüsselung dieser Eigenräume wird man zweckmäßig *mit* H *vertauschbare Observable* aufsuchen und einen Maximalsatz

$$\{H, A_1, A_2, \ldots, A_{f-1}\} \quad \text{mit} \quad [A_i, H] = 0 \tag{10.35}$$

bilden, dessen simultane Eigenwertsätze dann die Paare (E_n, k) bzw. (E, κ) in (10.34) konkretisieren. Für solche Observable sind nach (10.17) bzw. (10.26) alle Meßwahrscheinlichkeiten – gegeben durch Erwartungswerte von Projektoren zu den entsprechenden Eigenwerten bzw. Eigenwertintervallen – zeitlich konstant; sie heißen daher *Erhaltungsgrößen oder Konstanten der Bewegung*.

In der $|\vec{x}\rangle$-Darstellung für ein einzelnes Teilchen ist (10.34), angewandt auf $|\psi(t_0 = 0)\rangle$, natürlich identisch mit der Gl. (4.27), und

$$\mathcal{G}(\vec{x}', \vec{x}; t-t_0) = \langle\vec{x}'|e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}|\vec{x}\rangle \, , \tag{10.36}$$

ist die exakte Greensche Funktion (4.28).

Bei explizit zeitabhängigem Hamiltonoperator,

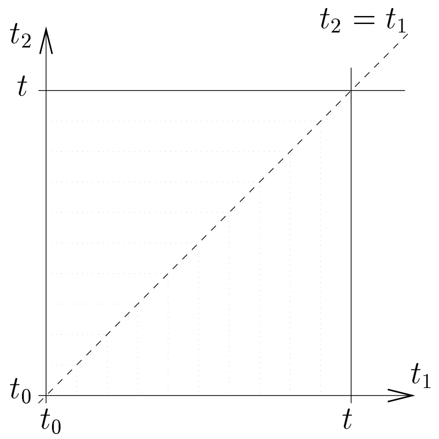
$$\frac{\partial H}{\partial t} \neq 0 \, , \tag{10.37}$$

gilt (10.30) nicht mehr und die Behandlung der Zeitentwicklung gestaltet sich in der Regel wesentlich schwieriger. Von exakt lösbaren einfachen Sonderfällen abgesehen, hat man hier als *allgemeine* Lösungsmethode lediglich die sog. *iterative Lösung* von (10.14)

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, H(t') \left[\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'} dt'' \, H(t'') \, U(t'', t_0)\right] \\ &= \mathbf{1} + \Big(-\frac{i}{\hbar}\Big)^1 \int_{t_0}^{t} dt_1 \, H(t_1) \\ &\quad + \Big(-\frac{i}{\hbar}\Big)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, H(t_1) \, H(t_2) + \ldots \end{aligned} \tag{10.38}$$

Ihre einzelnen Terme lassen sich in eine symmetrischere Form bringen, die am Term zweiter Ordnung illustriert sei: Durch Umbenennung der Integrationsvariablen erhält man

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2) = \frac{1}{2}\left\{\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2) \;+\; \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, f(t_2,t_1)\right\}$$



Da die beiden Integrationsgebiete zusammen das Quadrat $t_0 \le t_1, t_2 \le t$ bilden (vgl. Skizze) kann man dies als

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \left\{ \begin{array}{ll} f(t_1,t_2) & \text{für } t_2 < t_1 \\ f(t_2,t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{array} \right\} \tag{10.39}$$

schreiben; entsprechend fügt man beim Term n-ter Ordnung die $n!$ verschiedenen durch Variablenvertauschung entstehenden Integrationsgebiete zum n-dimensionalen Kubus $t_0 \le t_1, t_2, \ldots, t_n \le t$ zusammen.

Definiert man das *zeitgeordnete oder chronologische Produkt* zeitabhängiger Operatoren durch

$$P[A(t_1)B(t_2)] = \Theta(t_1 - t_2)A(t_1)B(t_2) + \Theta(t_2 - t_1)B(t_2)A(t_1) \tag{10.40a}$$

und allgemeiner durch

$$P[A_1(t_1)\ldots A_n(t_n)] = A_{i_1}(t_{i_1})A_{i_2}(t_{i_2})\ldots A_{i_n}(t_{i_n}) \qquad \text{mit} \quad t_{i_n} \le t_{i_{n-1}} \le \ldots \le t_{i_2} \le t_{i_1}\ , \tag{10.40b}$$

d.h. durch Anordnung der Operatorfaktoren in von rechts nach links aufsteigender Zeitreihenfolge, so kann man schließlich (10.38) in Form der *Dysonschen Reihe*

$$U(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i/\hbar)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n\, P[H(t_1)\ldots H(t_n)] \tag{10.41}$$

schreiben; das P-Produkt ist definitionsgemäß in allen Faktoren (d.h. gegen beliebige Vertauschungen) symmetrisch. (10.41) wird auch formal als „zeitgeordnete Exponentialreihe"

$$U(t,t_0) = P\left\{e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')}\right\} \tag{10.42}$$

geschrieben. Eine Vereinfachung ergibt sich, wenn H zwar noch zeitabhängig ist, aber die Eigenschaft

$$[H(t_1), H(t_2)] = 0 \quad \forall\,(t_1,t_2) \tag{10.43}$$

besitzt; dann kann man offenbar das P in (10.41) einfach weglassen und erhält

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')}\ , \tag{10.44}$$

was für zeitlich konstantes H auf (10.30) zurückführt.

10.3 Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild

Die Gleichungen (10.24) und (10.20) in der Form

$$\langle A \rangle_t = \mathrm{Tr}\,(AUW(t_0)U^\dagger) = \mathrm{Tr}\,[(U^\dagger AU)W(t_0)] \tag{10.45}$$

zeigen, daß man die Zeitentwicklung der meßbaren Größen auch ganz anders beschreiben kann: Man behält für den *Zustand W den Anfangswert $W(t_0)$* bei – er stellt dann lediglich eine Zusammenfassung der Anfangsbedingungen dar – und läßt dafür die Observablen A sich gemäß

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)\, A_S\, U(t, t_0) \tag{10.46}$$

entwickeln, wobei $A_S = A_H(t_0)$ die zeitunabhängige Observable A der bisherigen Formulierung bezeichnet. (Hat A noch eine explizite, von außen aufgeprägte Zeitabhängigkeit, so schreiben wir $A_S(t)$.) Diese für die Berechnung von Meßwahrscheinlichkeiten völlig äquivalente Auffassung heißt *Heisenberg-Bild* im Gegensatz zum bisher benutzten *Schrödinger-Bild* mit zeitabhängigen Zuständen. Die Zeitabhängigkeit (10.46) der Heisenberg-Observablen kann man mit (10.13) durch die sog. *Heisenbergsche Bewegungsgleichung*

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar}\,[H_H(t), A_H(t)] \tag{10.47}$$

charakterisieren, die in diesem Bild an die Stelle der Schrödinger-Gleichung (10.15) tritt. Man beachte sowohl den Vorzeichen- als auch den begrifflichen Unterschied zur von-Neumann-Gleichung (10.22), die dem Schrödinger-Bild angehört! Ist A explizit zeitabhängig ($\partial A_S/\partial t \neq 0$), so tritt zu (10.47) natürlich ein Term

$$U^\dagger(t, t_0)\, \frac{\partial A_S}{\partial t}\, U(t, t_0) = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H \tag{10.48}$$

(die letztere Schreibweise ist Konvention) hinzu.

Da $U(t, t_0)$ unitär ist, bleiben die Spektren der Heisenberg-Observablen (10.46) und damit die möglichen Meßwerte unverändert, denn aus

$$A_{i,S}|\alpha\rangle = a_i|\alpha\rangle \tag{10.49a}$$

folgt durch Anwendung von $U^\dagger$

$$A_{i,H}(t)\,[U^\dagger(t, t_0)|\alpha\rangle] = a_i\,[U^\dagger(t, t_0)|\alpha\rangle] \tag{10.49b}$$

mit denselben Eigenwerten. Dagegen *„drehen“ sich die Eigenvektoren*, die im Schrödinger-Bild zeitlich konstant waren, hier offenbar im Zeitverlauf gemäß

$$|\alpha(t)\rangle_H = U^\dagger(t, t_0)|\alpha\rangle\ , \tag{10.50}$$

d.h. „kontragredient“ zu der Zeitentwicklung (10.1) des Systemzustandes im Schrödinger-Bild. Im Heisenberg-Bild sind also nicht schlechthin „die Zustände zeitunabhängig“, sondern nur der *Systemzustand*, während die Eigenvektoren der Observablen unitär transformiert werden.

Im Heisenberg-Bild ist anhand von (10.47) sofort übersehbar, wann eine nicht explizit zeitabhängige Observable *Konstante der Bewegung* ist, nämlich genau dann, wenn

$$[H_H(t), A_H(t)] = 0 \quad \forall\, t \tag{10.51}$$

ist. Ist H konstant und somit nach (10.30)

$$A_H(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}\, A_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}\,, \tag{10.52}$$

so erhält man sofort die für diesen Fall in (10.35) notierte Bedingung $[H_S, A_S] = 0$ zurück.

Außerdem zeigt das Heisenberg-Bild sehr klar die *Analogien wie die Unterschiede zur klassischen Mechanik*, da für Systeme, die nur die klassischen Bahnfreiheitsgrade (mit zugehörigen kanonisch konjugierten Operatorpaaren P_k, Q_k) besitzen, die Bewegungsgleichung (10.47) mit

$$H_H = H(\{P_{k,H}\}, \{Q_{k,H}\}, t) \tag{10.53}$$

völlig analog zur Poisson-Klammer-Formulierung der klassischen Mechanik ist, wenn man die formale Ersetzung

$$\{H, A\}_{\text{Poisson}} \;\to\; \frac{i}{\hbar}\,[H_H, A_H] \tag{10.54}$$

vornimmt. Da aus den Vertauschungsrelationen (7.78)

$$[Q_H^n, P_H] \;=\; -\frac{\hbar}{i}\,nQ_H^{n-1} \;=\; -\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial Q_H}Q_H^n\,, \tag{10.55a}$$

$$[P_H^n, Q_H] \;=\; \frac{\hbar}{i}\,nP_H^{n-1} \;=\; \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial P_H}P_H^n \tag{10.55b}$$

folgt, nehmen für ein aus den Potenzprodukten von Q's und P's aufgebautes H die Gln. (10.47) für Koordinaten- und Impulsoperatoren die Gestalt

$$\frac{d}{dt}Q_{k,H}(t) \;=\; +\frac{\partial H(P_H, Q_H, t)}{\partial P_{k,H}}\,, \tag{10.56a}$$

$$\frac{d}{dt}P_{k,H}(t) \;=\; -\frac{\partial H(P_H, Q_H, t)}{\partial Q_{k,H}}\,, \tag{10.56b}$$

d.h. die Form *operatorwertiger kanonischer Gleichungen* an. Die Analogie hat ihre Grenzen dort, wo das klassische H – etwa, weil es gemischte höhere Potenzprodukte der P und Q enthält – beim Übergang zur Quantenmechanik modifiziert werden muß, z.B. durch die zur Wahrung der Selbstadjungiertheit notwendigen Symmetrisierungsterme; die rechten Seiten von (10.56a/b) unterscheiden sich dann von den entsprechenden klassischen Ausdrücken durch Zusatzterme, die explizite Potenzen $\hbar^n$ mit $n \geq 1$ als Vorfaktoren enthalten und somit im „klassischen Limes" $\hbar \to 0$ wieder verschwinden.

10.4 Wechselwirkungs- oder Dirac-Bilder

Läßt sich der Hamiltonoperator nach dem Schema

$$H(t) = H_0 + V_S(t) \quad , \quad \frac{\partial H_0}{\partial t} \equiv 0 \tag{10.57}$$

zerlegen, so kann ein weiteres Bild der Zeitentwicklung, das eine Mittelstellung zwischen den bisher benutzten einnimmt, zweckmäßig sein: Man verteilt gemäß den Formeln

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi_W(t) | A_W(t) | \psi_W(t) \rangle \tag{10.58}$$

mit den Bezeichnungen

$$A_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\, A_S\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} \tag{10.59}$$

$$|\psi_W(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\, U(t,t_0)\, |\psi(t_0)\rangle \tag{10.60}$$

den *durch H_0 bedingten sog. „ungestörten" Teil der Zeitabhängigkeit auf die Observablen* und die durch $V(t)$ bedingte Restabhängigkeit auf die Zustände; für gemischte Zustände tritt natürlich an die Stelle von (10.60)

$$\begin{aligned} W_W(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\, U(t,t_0)\, W(t_0)\, U^\dagger(t,t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} \\ &\qquad \left(= e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\, W_S(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} \right) , \end{aligned} \tag{10.61}$$

und an die Stelle von (10.58) $\mathrm{Tr}\,(A_W(t) W_W(t))$. Beachte, daß der in (10.60) auftretende modifizierte Evolutionsoperator

$$U_W(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} U(t,t_0) \tag{10.62}$$

selbst im Falle der Gln. (10.29/10.30) *nicht* zu $e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)V}$ vereinfacht werden kann, denn H_0 und $V(t)$ sind i.a. nicht miteinander vertauschbar, und es gilt

$$e^{-\frac{i}{\hbar}t(H_0+V)} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}tH_0}\, e^{-\frac{i}{\hbar}tV} \quad \text{für} \quad [H_0, V] \neq 0 \, , \tag{10.63}$$

wie der Vergleich der Exponentialreihen schnell zeigt. Die Zeitveränderlichkeit dieses Operators und damit von $|\psi_W\rangle$ bzw. W_W ist durch

$$\frac{\partial}{\partial t} U_W(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} \underbrace{\left(\frac{i}{\hbar} H_0 + \frac{1}{i\hbar} H(t) \right)}_{-\frac{i}{\hbar}V_S(t)} U(t,t_0)$$

oder

$$\frac{\partial}{\partial t} U_W(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar} V_W(t) \cdot U_W(t,t_0) \tag{10.64}$$

$$\text{mit} \quad V_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\, V_S(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0} \tag{10.65}$$

– und mit der Anfangsbedingung $U_W(t,t_0) = \mathbf{1}$ – oder wieder durch die Integralgleichung (10.14) mit

$$U \to U_W \quad , \quad H \to V_W \tag{10.66}$$

gegeben. Dieses sog. *Wechselwirkungsbild* ist vor allem dann zweckmäßig, wenn H_0 *in irgend einem Sinne „dominanter" Anteil von H und $V_S(t)$ dementsprechend als „kleine Störung" behandelbar* ist, weil dann die Lösung in Form der Dyson-Reihe

$$U_W(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n n!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n \; P[V_W(t_1) \ldots V_W(t_n)] \tag{10.67}$$

eine Entwicklung nach Potenzen dieser Störung darstellt und näherungsweise in niedriger Ordnung abgebrochen werden darf.

Kapitel 11

Darstellungsfreie Behandlung des Oszillators

11.1 Eigenwerte und Eigenvektoren von H

Der eindimensionale harmonische Oszillator, also ein System mit einem Freiheitsgrad und einem kanonisch konjugierten Observablenpaar,

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i} \cdot \mathbf{1} \, , \tag{11.1}$$

dessen Hamiltonoperator die Gestalt

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{m}{2} \omega^2 X^2 \tag{11.2}$$

hat ($\omega =$ klassische Oszillatorfrequenz), ist das Paradebeispiel eines Systems, dessen Energiespektrum und Eigenvektoren sich ohne Zuhilfenahme spezieller Darstellungen mit abstrakten Hilbertraum-Methoden ermitteln lassen. Dazu bildet man mittels der „Oszillatorlänge"

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{11.3}$$

das dimensionslose adjungierte Operatorpaar

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{b}{\hbar} P - \frac{i}{b} X \right) \, , \tag{11.4a}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{b}{\hbar} P + \frac{i}{b} X \right) \, , \tag{11.4b}$$

für das sich aus (11.1) die Vertauschungsrelation

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \left([P, X] - [X, P] \right) = \mathbf{1} \tag{11.5}$$

ergibt. Mit den Umkehrbeziehungen zu (11.4),

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{b} (a^\dagger + a) \quad , \quad X = \frac{b}{i\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \, , \tag{11.6}$$

läßt sich der Hamiltonoperator (11.2) schreiben als

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\,(a^\dagger a + aa^\dagger) = \hbar\omega\,(a^\dagger a + \frac{1}{2}\,\mathbf{1})\,. \tag{11.7}$$

Da der selbstadjungierte Operator

$$N = a^\dagger a \tag{11.8}$$

positiv semidefinit im Sinne von (7.18) ist, hat das *Spektrum von H damit die untere Schranke* $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Mit (11.5) findet man die Vertauschungsrelationen

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad , \quad [N, a] = -a\,. \tag{11.9}$$

Ist also $|\nu\rangle$ ein (wegen der Selbstadjungiertheit sicher existierender) Eigenvektor von N zum reellen Eigenwert ν und damit auch von H zum Eigenwert $E_\nu = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})$, so sieht man aus

$$\begin{aligned} H(a^\dagger|\nu\rangle) &= \hbar\omega(Na^\dagger + \frac{1}{2}a^\dagger)|\nu\rangle \\ &= \hbar\omega(a^\dagger N + \frac{3}{2}a^\dagger)|\nu\rangle = (E_\nu + \hbar\omega)(a^\dagger|\nu\rangle)\,, \end{aligned} \tag{11.10a}$$

$$\begin{aligned} H(a|\nu\rangle) &= \hbar\omega(Na + \frac{1}{2}a)|\nu\rangle \\ &= \hbar\omega(aN - \frac{1}{2}a)|\nu\rangle = (E_\nu - \hbar\omega)(a|\nu\rangle)\,, \end{aligned} \tag{11.10b}$$

daß dann die Zustände $a^\dagger|\nu\rangle$ bzw. $a|\nu\rangle$ ebenfalls Eigenzustände mit um $\hbar\omega$ erhöhtem bzw. erniedrigtem Eigenwert sind; $a^\dagger$ und a sind ähnlich wie l_+, l_- Stufenoperatoren, und zwar nennt man $a^\dagger$ *Erzeugungs- und* a *Vernichtungsoperator eines „Oszillatorquants"* $\hbar\omega$. Die Proportionalitätsfaktoren folgen durch Betrachtung der Normen

$$\|\, a^\dagger|\nu\rangle\,\|^2 = \langle\nu|\, aa^\dagger\,|\nu\rangle = \langle\nu|\, N + \mathbf{1}\,|\nu\rangle = (\nu+1)\,\langle\nu|\nu\rangle\,, \tag{11.11a}$$

$$\|\, a|\nu\rangle\,\|^2 = \langle\nu|\, a^\dagger a\,|\nu\rangle = \langle\nu|\, N\,|\nu\rangle = \nu\,\langle\nu|\nu\rangle\,, \tag{11.11b}$$

aus der Forderung $\|\,|\nu\rangle\,\| = \|\,|\nu+1\rangle\,\| = \|\,|\nu-1\rangle\,\| = 1$; die freibleibenden Phasen wählen wir so, daß

$$a^\dagger|\nu\rangle = \sqrt{\nu+1}\,|\nu+1\rangle \tag{11.12a}$$

$$a|\nu\rangle = \sqrt{\nu}\,|\nu-1\rangle \tag{11.12b}$$

gilt. Durch wiederholte Anwendung von a kann man also, von irgendeinem $|\nu\rangle$ ausgehend, schließlich im Widerspruch zur Positiv-Semidefinitheit von N Zustände mit negativen N-Eigenwerten konstruieren, sofern nicht die Folge dadurch abbricht, daß $a|\nu\rangle$ für $\nu < 1$ der Nullvektor wird. Gl. (11.12b) zeigt, daß dies genau für $\nu = 0$ eintritt; die Gleichung

$$a|0\rangle = 0 \qquad (\text{mit } \langle 0|0\rangle = 1) \tag{11.13}$$

ist die abstrakte Definition des *Grundzustandes* des Oszillators mit dem tiefsten Energieeigenwert

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (\text{„Nullpunktsenergie“})\,. \tag{11.14}$$

Nur Vektoren, deren Eigenwert E_ν um ein ganzes Vielfaches von $\hbar\omega$ über dem Wert (11.14) liegt, sind zulässige Eigenvektoren, weil von allen anderen E_ν-Werten ausgehend sofort der erwähnte Widerspruch konstruiert werden könnte. Damit hat der harmonische Oszillator das *rein diskrete Spektrum*

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{11.15}$$

und die zugehörigen *normierten Eigenvektoren* $|n\rangle$ sind aus dem Grundzustand $|0\rangle$ durch wiederholte Anwendung des Stufenoperators $a^\dagger$ gemäß (11.12a) zu erhalten:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n |0\rangle\,. \tag{11.16}$$

Daß kein kontinuierliches Spektrum auftritt, rührt daher, daß das Potential hier für $|x| \to \infty$ nicht gegen einen endlichen Wert geht, sondern unbegrenzt ansteigt.

Die Zustände (11.16) sind orthonormiert,

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}\,, \tag{11.17}$$

und bilden wegen der Selbstadjungiertheit von H eine Basis im Hilbertraum des Oszillators; die Spektralzerlegungen (7.34c/d) bzw. (7.45) lauten

$$\mathbf{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \quad , \quad H = \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty}\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle\langle n|\,. \tag{11.18}$$

Auch die Matrixdarstellungen der übrigen auftretenden *Operatoren in der „Oszillatordarstellung“* $\{|n\rangle\}$ lassen sich leicht angeben; aus (11.12a/b) folgt zunächst

$$\langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\,, \tag{11.19a}$$
$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} \tag{11.19b}$$

und damit nach (11.6) für Koordinate und Impuls

$$\langle n'|X|n\rangle = \frac{b}{i\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)\,, \tag{11.20a}$$
$$\langle n'|P|n\rangle = \frac{\hbar}{b\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)\,. \tag{11.20b}$$

Als Matrix ausgeschrieben ist also z.B.

$$\left(\langle n'|X|n\rangle\right) = \frac{-ib}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ +\sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & +\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & +\sqrt{3} & 0 & \ldots \\ & & \ldots & & \ldots \end{pmatrix}\,, \tag{11.21}$$

usw. Beachte, daß *sowohl X als auch P keine Diagonalelemente* haben, d.h. es ist für alle n

$$\langle n|X|n\rangle = 0 \quad , \quad \langle n|P|n\rangle = 0\,. \tag{11.22}$$

Dagegen findet man für die quadrierten Operatoren durch zweimalige Anwendung von (11.12a/b)

$$\begin{aligned}
\langle n'|X^2|n\rangle &= b^2\left\{\delta_{n'n}\Big(n+\frac{1}{2}\Big) - \frac{1}{2}\left[\delta_{n',n+2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\right.\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left. + \delta_{n',n-2}\sqrt{n(n-1)}\right]\right\}\,, \qquad (11.23a) \\
\langle n'|P^2|n\rangle &= \frac{\hbar^2}{b^2}\left\{\delta_{n'n}\Big(n+\frac{1}{2}\Big) + \frac{1}{2}\left[\delta_{n',n+2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\right.\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left. + \delta_{n',n-2}\sqrt{n(n-1)}\right]\right\} \qquad (11.23b)
\end{aligned}$$

und damit

$$(\Delta X)^2_{_n} = b^2\Big(n+\frac{1}{2}\Big) \quad , \quad (\Delta P)^2_{_n} = \frac{\hbar^2}{b^2}\Big(n+\frac{1}{2}\Big) \tag{11.24}$$

oder

$$(\Delta X\cdot\Delta P)_{_n} = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\,. \tag{11.25}$$

Der *Oszillatorgrundzustand* $(n = 0)$ *realisiert also das nach* (7.79) *kleinste mögliche Unschärfenprodukt!* Die im Gegensatz zum klassischen Oszillator endliche Grundzustandsenergie (11.14) kann man, da (11.24) ja zugleich die Erwartungswerte

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{11.26}$$

der beiden Terme des Hamiltonoperators (11.2) angibt, als tiefsten von der Unschärferelation erlaubten Energieeigenwert betrachten.

11.2 Eigenfunktionen in Orts- und Impulsdarstellung

Daß Gl. (11.13) tatsächlich den Grundzustand vollständig definiert, sieht man z.B. in der Ortsdarstellung, vermittelt durch die uneigentlichen Eigenvektoren $|x\rangle$ von X. Dort wird (11.13) unter Benutzung von (11.4a) zu

$$\langle x|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\langle x|\;\frac{b}{\hbar}P - \frac{i}{b}X\;|0\rangle = \frac{b}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{b^2}x\right)\langle x|0\rangle = 0\,, \tag{11.27a}$$

d.h. zu einer linearen Differentialgleichung 1. Ordnung für die Grundzustandswellenfunktion $\langle x|0\rangle$. In der dimensionslosen Variablen

$$\xi = \frac{x}{b} \tag{11.27b}$$

lautet sie

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_0(\xi) = 0 \qquad \left(\psi_n\left(\frac{x}{b}\right) = \langle x|n\rangle\right) . \tag{11.27c}$$

Ihre gemäß

$$\langle 0|0\rangle = b \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, |\psi_0(\xi)|^2 = 1 \tag{11.28}$$

normierte Lösung lautet

$$\psi_0(\xi) = (b\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} . \tag{11.29}$$

Das ist eine Gauß-Funktion mit Maximum beim klassischen Gleichgewichtspunkt $x = 0$ mit der Abfallsbreite $b\sqrt{2}$. Die Wellenfunktionen der angeregten Zustände folgen aus (11.16):

$$\psi_n(\xi) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\right]^n \psi_0(\xi) . \tag{11.30a}$$

Mittels der Operatoridentität

$$\xi - \frac{d}{d\xi} = -e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} \, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{11.30b}$$

kann dies in der Form

$$\psi_n(\xi) = i^n \, (b\sqrt{\pi} \, 2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \, H_n(\xi) \tag{11.30c}$$

mit den sog. *Hermiteschen Polynomen*

$$H_n(\xi) = (-)^n \, e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{11.30d}$$

geschrieben werden; die ersten dieser Polynome sind

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \qquad & H_2(\xi) &= 2(2\xi^2 - 1), \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \qquad & H_3(\xi) &= 4(2\xi^3 - 3\xi). \end{aligned} \tag{11.31}$$

Allgemein ist $H_n(\xi)$ ein Polynom n-ten Grades mit der *„Parität"* $(-)^n$, d.h. der Eigenschaft

$$H_n(-\xi) = (-)^n H_n(\xi) \tag{11.32}$$

bezüglich der Spiegelung der Koordinate x am Ursprung, und mit n *reellen Nullstellen*, so daß der Index n zugleich die „Knotenzahl" der Ortsraumwellenfunktion $\psi_n(\frac{x}{b})$ angibt.

Der Übergang zur Impulsdarstellung durch Fouriertransformation ist für die Oszillatorfunktion besonders einfach: Es gilt mit $k = p/\hbar$

$$\langle \hbar k|n\rangle = \varphi_n(bk) = (-i)^n \frac{b}{\sqrt{\hbar}} \, \psi_n(bk) \, , \tag{11.33}$$

d.h. *in der Variablen bk hat die n-te Impulsraumwellenfunktion bis auf einen Faktor $(-i)^n b/\sqrt{\hbar}$ dieselbe Form wie die Ortsraumwellenfunktion in der Variablen (x/b)*. Dies sieht man leicht daran, daß (11.29) sich bei der Fouriertransformation in der Variablen $\eta = bk$ bis auf den Faktor $b/\sqrt{\hbar}$ reproduziert und der Operator $a^\dagger$ in η gemäß

$$-i\left[\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\eta - \frac{d}{d\eta}\right)\right] \tag{11.34}$$

wirkt; letztlich ist es eine Folge des symmetrischen quadratischen Aufbaus von H in P und X.

11.3 Bewegung des „minimalen" Wellenpakets

Der nichtstationäre Zustand des Oszillators

$$|\psi(t_0)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p_0 X} e^{-\frac{i}{\hbar}x_0 P}|0\rangle \tag{11.35}$$

besitzt die Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}\langle x|\psi(t_0)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}\, e^{-x_0\frac{d}{dx}}\,\langle x|0\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}\,\langle x - x_0|0\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}\,(b\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{1}{2}((x-x_0)/b)^2}\end{aligned} \tag{11.36}$$

und daher, wie man leicht nachrechnet, die Erwartungswerte

$$\langle X\rangle_{t_0} = x_0 \quad , \quad \langle P\rangle_{t_0} = p_0\ . \tag{11.37}$$

Er stellt also einen räumlich um x_0 (statt $x = 0$) zentrierten und mit einem mittleren Impuls p_0 versehenen Oszillatorgrundzustand dar. Wir wollen seine zeitliche Entwicklung verfolgen und dazu zunächst $|\psi(t_0)\rangle$ zweckmäßig umformen. Dazu benutzen wir den Hilfssatz, daß für zwei lineare Operatoren A, B, die beide mit ihrem eigenen Kommutator vertauschbar sind,

$$[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0\ , \tag{11.38a}$$

die *Glaubersche Operatoridentität*

$$e^{A+B} = e^A\, e^B\, e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{11.38b}$$

gilt. Zum Beweis geht man davon aus, daß die Operatorfunktion

$$f(\lambda) = e^{\lambda A}\, e^{\lambda B} \tag{11.39}$$

Lösung der linearen Differentialgleichung erster Ordnung

$$\frac{df}{d\lambda} = [A + e^{\lambda A} B\, e^{-\lambda A}] \cdot f(\lambda) \tag{11.40}$$

mit dem Anfangswert $f(0) = \mathbf{1}$ ist. Nun gilt allgemein für zwei Operatoren A, B, wie man durch Einsetzen der Exponentialfunktion direkt beweist,

$$e^{\lambda A} B\, e^{-\lambda A} = B + \frac{\lambda}{1!}[A,B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,B]] + \frac{\lambda^3}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \ldots\,, \tag{11.41}$$

die sog. *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel*. Im vorliegenden Fall verschwinden wegen (11.38a) die wiederholten Kommutatoren und es gilt

$$e^{\lambda A} B\, e^{-\lambda A} = B + \lambda[A,B] \qquad \text{(für (11.38a))}\,. \tag{11.42}$$

Die damit entstehende Differentialgleichung

$$\frac{df}{d\lambda} = [A + B + \lambda[A,B]] \cdot f(\lambda) \tag{11.43}$$

läßt sich, da $(A+B)$ und $[A,B]$ sowohl untereinander als auch mit $f(\lambda)$ kommutieren, wie eine Zahlengleichung integrieren und gibt

$$f(\lambda) = e^{\lambda(A+B)}\, e^{\frac{1}{2}\lambda^2[A,B]}\,, \tag{11.44}$$

woraus für $\lambda = 1$ die Behauptung (11.38b) folgt.

Wir wenden diese Identität zunächst auf (11.35) mit

$$A = \frac{i}{\hbar} p_0 X \quad , \quad B = -\frac{i}{\hbar} x_0 P \quad , \quad [A,B] = \frac{i}{\hbar} p_0 x_0$$

an und erhalten mit (11.4)

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= e^{\frac{i}{2}\left(\frac{x_0 p_0}{\hbar}\right)}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 X - x_0 P)}\, |0\rangle \\ &= e^{\frac{i}{2}\left(\frac{x_0 p_0}{\hbar}\right)}\, e^{-i(z a^\dagger + z^* a)}\, |0\rangle\,, \end{aligned} \tag{11.45}$$

wobei

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x_0}{b} + i\,\frac{p_0 b}{\hbar}\right)\,. \tag{11.46}$$

Das Betragsquadrat dieser dimensionslosen Zahl,

$$|z|^2 = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{x_0}{b}\right)^2 + \left(\frac{p_0 b}{\hbar}\right)^2\right] = \frac{1}{\hbar\omega}\left[\frac{1}{2m}p_0^2 + \frac{m}{2}\omega^2 x_0^2\right] = \frac{E_C}{\hbar\omega}\,, \tag{11.47}$$

ist offenbar die den Mittelwerten (11.37) bei t_0 *klassisch zugeordnete Oszillatorenergie* E_C in Einheiten von $\hbar\omega$. Eine zweite Anwendung von (11.38b) mit

$$A = -iza^\dagger \quad , \quad B = -iz^* a \quad , \quad [A,B] = |z|^2$$

gibt dann die Darstellung

$$|\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{E_C}{\hbar\omega}\right) + \frac{i}{2}\left(\frac{x_0 p_0}{\hbar}\right)} \left\{ e^{-iza^\dagger} |0\rangle \right\}, \tag{11.48}$$

weil nach (11.13) $\exp(-iz^* a)|0\rangle = |0\rangle$ ist. Damit ist der spezielle Anfangszustand (11.35) bis auf einen Zahlenfaktor auf einen sog. *kohärenten Oszillatorzustand*

$$|z\rangle = e^{-iza^\dagger}|0\rangle \tag{11.49}$$

zurückgeführt. Er stellt eine *„erzeugende Funktion“* der stationären Oszillatorzustände dar in dem Sinne, daß die Koeffizienten in seiner Entwicklung nach Potenzen von z,

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iz)^n}{\sqrt{n!}} \overbrace{\left[\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle\right]}^{|n\rangle}, \tag{11.50}$$

gerade die normierten Oszillatoreigenvektoren (11.16) ergeben. Damit ist die Entwicklung von $|\psi(t_0)\rangle$ nach H-Eigenzuständen bekannt, und die Zeitentwicklung des „Wellenpakets“ (11.35) läßt sich mit dem nach (10.30) gebildeten Evolutionsoperator

$$U(t,t_0) = e^{-i\omega(t-t_0)(a^\dagger a+\frac{1}{2})} \tag{11.51}$$

sofort angeben:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{1}{2}(\frac{E_C}{\hbar\omega})+\frac{i}{2}(\frac{x_0p_0}{\hbar})} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iz)^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-i\omega(t-t_0)(n+\frac{1}{2})}\,|n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(\frac{E_C}{\hbar\omega})+\frac{i}{2}[\frac{x_0p_0}{\hbar}-\omega(t-t_0)]}\, e^{-iz(t)a^\dagger}\,|0\rangle \end{aligned} \tag{11.52a}$$

mit

$$z(t) = z\, e^{-i\omega(t-t_0)}\,. \tag{11.52b}$$

Die letzte Beziehung zusammen mit (11.46) zeigt, daß bis auf einen unwesentlichen Phasenfaktor $\exp[-i\frac{\omega}{2}(t-t_0)]$ die ursprüngliche Gestalt (11.35) bis auf die Ersetzungen

$$x_0 \;\to\; x_0\cos\omega(t-t_0) + \frac{p_0b^2}{\hbar}\sin\omega(t-t_0) \;=\langle X\rangle_t \tag{11.53a}$$

$$p_0 \;\to\; p_0\cos\omega(t-t_0) - \frac{\hbar x_0}{b^2}\sin\omega(t-t_0) \;=\langle P\rangle_t \tag{11.53b}$$

bei der Zeitentwicklung reproduziert wird. Die Mittelwerte vollführen also die nach dem Ehrenfestschen Theorem zu erwartende klassische Bewegung. Die Besonderheit von (11.35) und (11.52a/b) liegt dagegen darin, daß die Schwankungen

$$(\Delta X)_t = \frac{b}{\sqrt{2}} \quad , \quad (\Delta P)_t = \frac{\hbar}{b\sqrt{2}} \tag{11.54}$$

stets den Wert des unverschobenen Grundzustandes $|0\rangle$ beibehalten, d.h. daß das *Paket ohne Verzerrungen seiner räumlichen und Impulsverteilung oszilliert.* Für

$$x_0 \gg b \quad , \quad p_0 \gg \frac{\hbar}{b}\,, \tag{11.55a}$$

d.h. Amplituden, gegenüber denen die Schwankungen vernachlässigbar erscheinen, ergibt sich in sehr guter Näherung das Bild einer klassischen Oszillatorbewegung mit

$$E_C \gg \hbar\omega\,. \tag{11.55b}$$

III

Symmetrien und Invarianzen

Kapitel 12

Allgemeine Symmetrieoperationen – Translationsgruppe

12.1 Symmetrieoperationen am Beispiel der Translation

Ein quantenmechanisches System, beschrieben durch den Zustand $|\psi\rangle$ bzw. W, und die Geräte, mit denen wir Messungen am System vornehmen, beschrieben durch Projektionsoperatoren Π, denken wir uns sämtlich um einen Vektor $\vec{a}$ im Raum verschoben. Dabei geht jeder mögliche reine Systemzustand $|\psi\rangle$ in einen eindeutig zugeordneten „verschobenen" Zustand $|\psi'\rangle$ über, so daß die Abbildung

$$|\psi\rangle \;\to\; |\psi'\rangle = U(\vec{a})|\psi\rangle \tag{12.1}$$

einen vom Verschiebungsvektor $\vec{a}$ parametrisch abhängenden *Translationsoperator* $U(\vec{a})$ *auf ganz* $\mathcal{H}$ definiert. Ein gemischter Zustand transformiert sich wegen des bilinearen Aufbaus (9.11a) von W bei derselben Operation gemäß

$$W \;\to\; W' = U(\vec{a})\, W\, U(\vec{a})^\dagger\ . \tag{12.2}$$

Dasselbe Verhalten zeigen offenbar die Projektoren Π zu gewissen Systemeigenschaften, die sich ja nach (7.33) darstellen lassen:

$$\Pi \;\to\; \Pi' = U(\vec{a})\, \Pi\, U(\vec{a})^\dagger\ . \tag{12.3}$$

Wir können sofort einige Eigenschaften der Operatorenfamilie $U(\vec{a})$ angeben. Da Nacheinanderausführung zweier Verschiebungen $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ unabhängig von deren Reihenfolge dasselbe Resultat ergibt wie eine einzige Verschiebung um den Vektor $\vec{a}_1 + \vec{a}_2$, haben wir

$$U(\vec{a}_2)\, U(\vec{a}_1) = U(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) = U(\vec{a}_1)\, U(\vec{a}_2)\ . \tag{12.4}$$

Für $\vec{a}_2 = -\vec{a}_1$ erhalten wir als Resultat eine Verschiebung um den Nullvektor, die offenbar alle Zustände unverändert lassen muß, d.h.

$$U(-\vec{a})\, U(\vec{a}) = \mathbf{1} = U(\vec{a})\, U(-\vec{a})\ . \tag{12.5}$$

Dies zeigt einmal, daß auch der Bildbereich $\mathcal{R}(U)$ von U ganz $\mathcal{H}$ sein muß (denn jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ läßt sich als Bild von $U(\vec{a})|\psi\rangle$ unter der Translation $U(-\vec{a})$ auffassen) und zum anderen, daß die Abbildung umkehrbar eindeutig ist und das Inverse $U(-\vec{a})$ besitzt. Mathematisch besagen die Gln. (12.4/12.5), daß die *Translationsoperatoren $U(\vec{a})$ zu allen $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ eine (abelsche, d.h. kommutative) Gruppe* mit $\mathbf{1}$ als Neutralelement und dem Multiplikationsgesetz (12.4) bilden. Diese Überlegungen sind im übrigen völlig analog zu den bei Gl. (10.32) für die „Zeittranslation" bei zeitunabhängigem Hamiltonoperator angestellten.

Ist nun das System *abgeschlossen*, d.h. haben wir alle dazugehörigen Teilsysteme und Kraftfelder auch wirklich mitverschoben, so besagt die grundlegende *Erfahrungstatsache der Homogenität des Raumes* in der Sprache der Quantenmechanik, daß alle mit den verschobenen Apparaturen am verschobenen System bestimmten Meßwahrscheinlichkeiten ebenso ausfallen wie in der „unverschobenen" Situation, d.h.

$$\mathrm{Tr}\,(\Pi' W') = \mathrm{Tr}\,(U^\dagger U \Pi\, U^\dagger U W) = \mathrm{Tr}\,(\Pi W) \tag{12.6}$$

für *alle* Eigenschaften Π und alle (gemäß $\mathrm{Tr}\, W = 1$ normierten) Zustände W. Insbesondere gilt für reine Zustände (d.h. $W = |\psi\rangle\langle\psi|$ mit $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) und für die Projektoren $\Pi_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$, die die Messung der Eigenwerte eines Maximalsatzes vertauschbarer Observabler repräsentieren,

$$|\langle\alpha'|\psi'\rangle|^2 = |\langle U\alpha|U\psi\rangle|^2 = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 \ . \tag{12.7}$$

(Der allgemeinere Ausdruck (12.6) kann dann als mit den reellen Eigenwerten p_γ von W gewichtete Summe solcher Betragsquadrate aufgefaßt werden.)

Die Forderung (12.7) an U ist schwächer als die der Isometrie, $\langle U\alpha|U\psi\rangle = \langle\alpha|\psi\rangle$, da nur die Invarianz des *Absolutbetrages* des Skalarproduktes gefordert wird. Ein *Theorem von Wigner*, das wir hier nur referieren[1], besagt jedoch, daß man sich – nötigenfalls nach geeigneter Umdefinition der Phasenfaktoren, die bei der Definition der Orthonormalsysteme $\{|\alpha'\rangle\}$ und $\{|\alpha\rangle\}$ frei bleiben – auf nur zwei Arten von Operatoren U beschränken kann, die (12.7) erfüllen:

(a) U ist auch isometrisch, d.h.

$$\langle U\alpha|U\psi\rangle = \langle\alpha|\psi\rangle \quad \forall\, |\alpha\rangle, |\psi\rangle \ , \tag{12.8}$$

und, wie wir bisher stets stillschweigend vorausgesetzt haben, *linear*; dann folgt im Verein mit den vorher festgestellten Eigenschaften die *Unitarität* von U, d.h.

$$U \text{ linear} \quad \text{und} \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1} \ . \tag{12.9}$$

(b) U besitzt die Eigenschaft

$$\langle U\alpha|U\psi\rangle = \langle\psi|\alpha\rangle = \langle\alpha|\psi\rangle^* \quad \forall\, |\alpha\rangle, |\psi\rangle \tag{12.10}$$

[1] Für den Beweis vgl. etwa K. Gottfried, Quantum Mechanics, Vol. I, Fundamentals, p. 227f

und ist zugleich *„antilinear"*, d.h. es gilt

$$U(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^*(U|\psi_1\rangle) + c_2^*(U|\psi_2\rangle) \ . \tag{12.11}$$

Ein derartiger Operator heißt *antilinear-unitär* oder kurz *antiunitär*.

Die antiunitäre Alternative ist auf Grund von (12.7) bzw. (12.6) allein nicht auszuschließen. Man sieht jedoch leicht, daß *antilineare Operatoren U sicher dann nicht in Frage kommen, wenn die Operatoren U eine kontinuierlich von gewissen Zahlenparametern (z.B. $\vec{a}$ bei den Translationen) abhängende Gruppen bilden derart, daß jedes U sich als Funktion dieser Parameter kontinuierlich aus der Identität* **1** heraus entwickeln läßt. Denn dann (und nur dann) läßt *jedes U* sich als Quadrat eines anderen U mit geeignet gewähltem Parametersatz schreiben, bei den Translationen z.B.

$$U(\vec{a}) = U\left(\frac{1}{2}\vec{a}\right) U\left(\frac{1}{2}\vec{a}\right) . \tag{12.12}$$

Für antiunitäre U ergäbe dies sofort einen Widerspruch, weil nach (12.11/12.10) das Quadrat eines antiunitären Operators gerade *nicht* wieder antiunitär, sondern unitär ist. Damit ist der Anwendungsbereich für die antiunitären Operatoren von vornherein stark eingeschränkt; sie kommen nur als Operatoren zu *„diskreten"*, d.h. nicht beliebig „halbierbaren" Symmetrieoperationen in Frage. Auch bei diskreten Operationen muß von Fall zu Fall untersucht werden, ob sie durch unitäre oder antiunitäre Operatoren darzustellen sind; im Bereich der nichtrelativistischen Quantentheorie zeigt sich, daß nur eine einzige Operation, die der *Zeit- oder Bewegungsumkehr*, antiunitäre Operatoren erfordert.

Wir nennen künftig Operatoren wie in (12.1-12.3), die eine Gruppe mit der **1** als Neutralelement bilden und die Eigenschaft (12.6/12.7) besitzen, *Symmetrieoperatoren* des Systems, unabhängig davon, ob sie (wie hier) kontinuierlich von Parametern wie $\{a_1, a_2, a_3\}$ abhängen oder „diskrete", d.h. abzählbare und evtl. auch endliche Gruppen bilden. Beim hier betrachteten Beispiel der Translationen wurden diese Operatoren durch gewisse anschauliche raumzeitliche Transformationen, hier die Verschiebungen $\vec{a}$ im $\mathbb{R}^3$, gewissermaßen induziert; die Gruppe der Operatoren $U(\vec{a})$ auf $\mathcal{H}$ (*quantenmechanische Translationsgruppe*) stellt ein eindeutiges und im Sinne von (12.4) „verknüpfungstreues" Bild der Gruppe der Verschiebungen $\vec{a}$ im Anschauungsraum dar. Entsprechendes gilt z.B. für Drehungen (Kap. 13), Galileitransformationen oder die „diskrete" Operation der Raumspiegelung (Paritätsoperation). Der obige Begriff der Symmetrieoperation ist jedoch allgemein genug, um auch die sog. *internen Symmetrien* einzuschließen, die keine Beziehung zu den raumzeitlichen Veränderungen des Systems haben, sondern sich auf „innere" Freiheitsgrade beziehen. Das bekannteste Beispiel ist die *Operation der Vorzeichenumkehr der elektrischen Ladung* und anderer in der Elementarteilchenphysik wichtiger ladungsartiger Quantenzahlen wie Baryonen- oder Leptonenzahl, die es erlaubt, ein Teilchen und sein Antiteilchen als verschiedene Zustände desselben Systems aufzufassen. Ein komplizierteres Beispiel bilden die aus der Kernphysik bekannten *Isospintransformationen*, die Familien von zwei und mehr Teilchen ineinander transformieren und, obwohl nicht raumzeitlich, eine zur Drehgruppe isomorphe mathematische Struktur aufweisen.

12.2 Invarianzen und Gruppendarstellungen

Unsere abstrakte Definition der Symmetrieoperatoren nimmt noch keinen Bezug auf die Bewegungsgleichung bzw. den Hamiltonoperator H des Systems. Wir nennen ein quantenmechanisches System *invariant unter den Operatoren U einer Symmetriegruppe $\mathcal{G}$*, wenn

$$UHU^\dagger = H \quad \forall\, U \in \mathcal{G} \tag{12.13}$$

gilt, wobei wir uns der Einfachheit halber auf ein zeitunabhängiges H beziehen. Multiplikation mit U von rechts zeigt, daß (12.13) mit

$$[U, H] = 0 \quad \forall\, U \in \mathcal{G} \tag{12.14}$$

äquivalent ist. Insbesondere heißt also ein System *translationsinvariant*, wenn

$$[U(\vec{a}), H] = 0 \quad \forall\, \vec{a} \in \mathbb{R}^3 \tag{12.15}$$

gilt. Während räumliche Translationen für *jedes* physikalische System möglich oder mindestens denkbar sind und entsprechende Operatoren $U(\vec{a})$ induzieren, gilt (12.15) nur für spezielle Systeme, die so beschaffen sind, daß die in H auftretenden Kräfte (oder die idealisierend für gewisse Kräfte stehenden Randbedingungen) keine Raumpunkte oder -gebiete vor anderen auszeichnen. Bei diesen Systemen ist dann die *Zeitentwicklung mit allen räumlichen Verschiebungen vertauschbar*.

Ist $\mathcal{U}_E$ ein Eigenraum von H zum Eigenwert E mit einer Orthonormalbasis $\{|E, i\rangle\}$ und ist $|\psi_E\rangle = \sum_i |E, i\rangle\langle E, i|\psi_E\rangle$ irgend ein Eigenvektor in diesem Unterraum, so folgt aus (12.14)

$$H\,(U|\psi_E\rangle) = E\,(U|\psi_E\rangle) \quad \forall\, U \in \mathcal{G}\,, \tag{12.16}$$

d.h. Anwendung von Invarianztransformationen auf $|\psi_E\rangle$ ergibt stets wieder Eigenvektoren in demselben Eigenraum $\mathcal{U}_E$. Der Raum $\mathcal{U}_E$ wird durch die $U \in \mathcal{G}$ „in sich transformiert“, wobei gemäß

$$U|\psi_E\rangle = \sum_{i,j} |E, j\rangle\langle E, j|U|E, i\rangle\langle E, i|\psi_E\rangle \tag{12.17}$$

die Matrixdarstellungen der U in einer Orthonormalbasis von $\mathcal{U}_E$ als Transformationsmatrizen auftreten. (Bei überabzählbarer Entartung von E treten wie üblich Integrale an die Stelle der obigen Summen.) Nacheinanderausführung von U_1 und $U_2 \in \mathcal{G}$ entspricht einer Transformation mit dem Matrixprodukt

$$\langle E, j|U_2U_1|E, i\rangle = \sum_k \langle E, j|U_2|E, k\rangle\langle E, k|U_1|E, i\rangle\,. \tag{12.18}$$

Wir haben also eine *„homomorphe“*, d.h. eindeutige und multiplikationstreue Abbildung der Symmetriegruppe $\mathcal{G}$ auf die linearen Transformationen (bzw. deren Matrizen) eines linearen Vektorraums (hier $\mathcal{U}_E$) vor uns. $\mathcal{U}_E$ heißt dann ein *Darstellungsraum* und die *Matrixgruppe* $\mathcal{D} = \{\langle j|U|i\rangle \mid U \in \mathcal{G}\}$ eine *(lineare) Darstellung* *von $\mathcal{G}$.* Sind die Darstellungsmatrizen sämtlich unitär, so spricht man von einer *unitären Darstellung.*

Ist E nichtentartet, d.h. $\mathcal{U}_E$ ein eindimensionaler Raum, so kann jedes U (weil normerhaltend) bei Anwendung auf $|\psi_E\rangle$ diesen Vektor nur bis auf einen Phasenfaktor $\exp(i\varphi_U)$ reproduzieren, so daß physikalisch stets derselbe Zustand entsteht. (Die Beschreibung durch den statistischen Operator $|\psi_E\rangle\langle\psi_E|$ hat hier wieder Vorteile, weil aus ihm derartige Phasenfaktoren herausfallen.) Ist ein Zustand nicht in diesem verallgemeinerten Sinne „$\mathcal{G}$-invariant", so lassen sich aus ihm durch Anwendung von Operatoren U aus $\mathcal{G}$ linear unabhängige Zustände zum selben Eigenwert E erzeugen. Die *Invarianz erscheint in dieser Sicht als Ursache der Entartung; die Entartung wird aufgehoben, wenn zu H „symmetriebrechende", d.h. die Invarianz* (12.13) *verletzende Terme* hinzugefügt werden – im Translationsfalle etwa durch Einschalten äußerer Kraftfelder, die gewisse Kraftzentren oder Raumgebiete auszeichnen.

Ist E entartet, so braucht der bei Anwendung aller $\mathcal{D}$-Elemente auf ein festes $|\psi_E\rangle$ entstehende Bildraum noch nicht ganz $\mathcal{U}_E$ zu sein: Es kann in $\mathcal{U}_E$ noch *„invariante Teilräume"* geben, d.h. echte Teilräume, die unter der $\mathcal{G}$-Darstellung ganz in sich transformiert werden. Die *Darstellung heißt dann reduzibel*. Ist die Darstellung unitär, so ist auch der zu einem invarianten Teilraum $\mathcal{U}_{E,1}$ gehörende orthogonale Teilraum $\mathcal{V}_{E,1}$ invariant, denn für *alle* $|u_E\rangle \in \mathcal{U}_{E,1}$, $|v_E\rangle \in \mathcal{V}_{E,1}$ gilt dann

$$\langle u_E|U|v_E\rangle = \langle U^\dagger u_E|v_E\rangle = \langle U^{-1}u_E|v_E\rangle = 0 \,,$$

weil $U^{-1}|u_E\rangle$ ja wieder Element von $\mathcal{U}_{E,1}$ ist. Sowohl $\mathcal{U}_{E,1}$ als auch $\mathcal{V}_{E,1}$ können weitere invariante Teilräume enthalten. Hat man den Darstellungsraum als direkte Summe orthogonaler Teilräume

$$\mathcal{U}_E = \mathcal{U}_{E,1} \oplus \mathcal{U}_{E,2} \oplus \ldots \tag{12.19}$$

dargestellt derart, daß diese Teilräume sämtlich *irreduzibel* sind, also keine echten invarianten Unterräume mehr enthalten, so sagt man, der Raum bzw. die Darstellung selbst sei *„vollständig ausreduziert"*.

Die Vertauschungsrelation (12.14) garantiert, daß *mindestens ein $U \in \mathcal{G}$ zusammen mit H diagonalisiert* werden kann. Unitäre Operatoren besitzen ähnlich wie selbstadjungierte eine Spektralschar, d.h. ein vollständiges (eigentliches oder uneigentliches) Eigenvektorensystem, jedoch mit *Eigenwerten, die komplex und wegen der Normerhaltung vom Betrage 1, d.h. Phasenfaktoren* sind. Ob noch weitere $U \in \mathcal{G}$ gleichzeitig diagonalisiert werden können, hängt von den Vertauschungseigenschaften der U untereinander ab. Im Falle der Translationsgruppe sind nach (12.4) sämtliche $U(\vec{a})$ miteinander vertauschbar und deshalb, wenn (12.15) gilt, gemeinsam mit H diagonalisierbar. Man gewinnt aber auf diese Weise i.a. keinen Satz vertauschbarer Observabler, da ja die U i.a. nicht selbstadjungiert sind. Nur wenn

$$U^\dagger = U = U^{-1}, \quad \text{d.h.} \quad U^2 = \mathbf{1} \tag{12.20}$$

gilt, ist *U zugleich Symmetrieoperator und selbstadjungiert.* Die Eigenwerte können dann nur $+1$ und -1 sein. Dies ist z.B. bei der *Paritätsoperation* der Fall. Bei „kontinuierlichem“ $\mathcal{G}$ ist jedoch die Zuordnung selbstadjungierter Observabler zu den Symmetrieoperatoren auf eine indirektere, für den Fall der Zeittranslation bereits in (10.9) vorgeführte Weise möglich.

12.3 Impulse als Verschiebungsgeneratoren

Wir betrachten nun ausschließlich kontinuierliche Symmetriegruppen, zunächst wieder am Beispiel der Translationsgruppe. Hier können alle Operatoren $U(\vec{a})$ durch Iteration von *„infinitesimalen“*, d.h. nahe bei $\mathbf{1}$ gelegenen Transformationen, mit „kleinen“ Verschiebungsvektoren $d\vec{a}$, gewonnen werden:

$$U(d\vec{a}) = \mathbf{1} + \delta U \quad , \quad \delta U = \sum_{k=1}^{3} \left[\frac{\partial U(\vec{a})}{\partial a_k} \right]_{\vec{a}=0} da_k \ . \tag{12.21}$$

Aus der Unitarität von U schließt man wie bei (10.8) auf die Antihermitezität von δU,

$$\delta U^\dagger = -\delta U \ , \tag{12.22}$$

so daß die drei durch

$$\delta U = \frac{1}{i\hbar} \sum_{k=1}^{3} P_k \, da_k = \frac{1}{i\hbar} \, d\vec{a} \cdot \vec{P} \tag{12.23}$$

definierten Operatoren hermitesch und (wegen der Existenz einer Spektralschar für U) sogar selbstadjungiert sind,

$$P_k^\dagger = P_k \ , \quad k = 1, 2, 3 \, . \tag{12.24}$$

Die so definierten selbstadjungierten Operatoren heißen die (infinitesimalen) *Erzeugenden* oder *Generatoren* der Translationsgruppe. Um endliche Verschiebungen aus ihnen aufzubauen, kann man analog zu (10.12) für $\vec{a} = a \cdot \hat{a}$ und $d\vec{a} = da \cdot \hat{a}$

$$\frac{U((a + da) \cdot \hat{a}) - U(a \cdot \hat{a})}{da} = \frac{\partial U}{\partial a} = -\frac{i}{\hbar} (\hat{a} \cdot \vec{P}) \cdot U(\vec{a}) \tag{12.25}$$

schreiben und diese Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $U(0) = \mathbf{1}$ wie bei (10.30) zu dem manifest unitären Ausdruck

$$U(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{P}} \tag{12.26}$$

integrieren. Er illustriert das sog. *Stonesche Theorem*, wonach für jede kontinuierliche parameterabhängige Schar unitärer Operatoren $U(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ mit $U(0, 0, \ldots, 0) = \mathbf{1}$ eine Darstellung

$$U(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N) = \exp \left\{ -i \sum_{n=1}^{N} \alpha_n G_n \right\} \ , \quad G_n^\dagger = G_n \tag{12.27}$$

mit selbstadjungierten Generatoren $G_1, \ldots, G_N$ existiert.

Die *Vertauschungsrelationen* der P_k erschließt man aus denen der endlichen $U(\vec{a})$, indem man die Kommutativität (12.4) in der Form

$$U(\vec{b})\, U(\vec{a})\, U^\dagger(\vec{b}) = U(\vec{a}) \tag{12.28}$$

für infinitesimales $d\vec{a}$ statt $\vec{a}$ ausschreibt,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{b}\cdot\vec{P}}\vec{P}\, e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{b}\cdot\vec{P}} = \vec{P} \quad \forall\, \vec{b}\,, \tag{12.29}$$

und die linke Seite nach der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel (11.41) entwickelt. Läßt man auch $\vec{b}$ infinitesimal werden, so kann diese Entwicklung nach dem Term erster Ordnung abgebrochen werden und man hat

$$P_k - \frac{i}{\hbar}\sum_{l=1}^{3} db_l\,[P_l, P_k] = P_k \quad \forall\, d\vec{b}\,. \tag{12.30}$$

Das ist nur möglich, wenn

$$[P_l, P_k] = 0\,, \quad k, l = 1, 2, 3 \tag{12.31}$$

ist, d.h. alle drei P_k miteinander kommutieren. Die *Vertauschungsrelationen der Generatoren (hier $\vec{P}$) enthalten in komprimierter und von den „Gruppenparametern" (hier $\vec{a}$) freier Form die gesamte algebraische Struktur der betreffenden Symmetriegruppe*. Sie legen die mathematische Struktur dieser Gruppe (bis auf eventuelle „globale", aus dem infinitesimalen Verhalten in einer Umgebung von **1** nicht eindeutig erschließbare Eigenschaften) weitgehend fest.

Analog zu (12.29) sieht man, daß die Bedingung (12.13) für Translationsinvarianz mit

$$[\vec{P}, H] = 0 \tag{12.32}$$

äquivalent ist; allgemeiner ist eine *translationsinvariante Observable A* charakterisiert durch

$$[\vec{P}, A] = 0\,. \tag{12.33}$$

Um schließlich die P_k mit bekannten Operatoren zu identifizieren, betrachten wir die Ortsdarstellung von (12.1): Da $|\psi'\rangle$ der Zustand des um $\vec{a}$ starr verschobenen Systems ist, muß seine Ortsdarstellung bei $\vec{x}+\vec{a}$ denselben Zahlenwert haben wie die des unverschobenen Zustandes $|\psi\rangle$ bei $\vec{x}$:

$$\langle\vec{x}+\vec{a}|\psi'\rangle = \langle\vec{x}|\psi\rangle \quad \text{oder} \quad \langle\vec{x}|\psi'\rangle = \langle\vec{x}-\vec{a}|\psi\rangle \quad \text{oder} \tag{12.34a}$$

$$\langle\vec{x}|e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{P}}|\psi\rangle = \langle\vec{x}-\vec{a}|\psi\rangle\,. \tag{12.34b}$$

Andererseits erhält man durch Taylorentwicklung

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}-\vec{a}|\psi\rangle &= \langle\vec{x}|\psi\rangle - \vec{a}\cdot\vec{\nabla}\langle\vec{x}|\psi\rangle + \frac{1}{2}\sum_{k,l} a_k a_l \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_l}\langle\vec{x}|\psi\rangle \pm \ldots \\ &= e^{-\vec{a}\cdot\vec{\nabla}}\langle\vec{x}|\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{12.35}$$

Vergleich mit (12.34b) ergibt

$$\langle\vec{x}|\vec{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\langle\vec{x}|\psi\rangle \ , \tag{12.36}$$

womit die *Verschiebungsgeneratoren als die Impulsoperatoren identifiziert* sind. Ihr Spektrum ist damit rein kontinuierlich und überdeckt jeweils die gesamte reelle Achse. Man kann (12.23) *geradezu als abstrakte Definition der Impulsoperatoren* auffassen. Bei einem Mehrteilchensystem mit Ortsvariablen $\vec{x}^{\,(1)}, \ldots, \vec{x}^{\,(N)}$ ist (12.34) natürlich durch

$$\langle\vec{x}^{\,(1)}\ldots\vec{x}^{\,(N)}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{P}}\,|\psi\rangle = \langle\vec{x}^{\,(1)}-\vec{a}, \ldots, \vec{x}^{\,(N)}-\vec{a}|\psi\rangle \tag{12.37}$$

zu ersetzen und gibt dementsprechend

$$\langle\vec{x}^{\,(1)}\ldots\vec{x}^{\,(N)}|\vec{P}|\psi\rangle = \left(\sum_{n=1}^{N}\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}^{(n)}\right)\langle\vec{x}^{\,(1)}\ldots\vec{x}^{\,(N)}|\psi\rangle \ , \tag{12.38}$$

d.h. die Verschiebungsgeneratoren definieren hier den Operator des *Gesamtimpulses* des Systems. Will man Impulsoperatoren für Einzelteilchen definieren, so muß man Verschiebungen einzelner Teilchen (in einem aus Einteilchenräumen als Tensorprodukt aufgebauten $\mathcal{H}$) und deren Generatoren betrachten.

In der Basis der (uneigentlichen) Eigenvektoren (7.56) von $\vec{P}$ wird die Darstellung der Translationsoperatoren nun besonders einfach:

$$\langle\vec{k}'|U(\vec{a})|\vec{k}\rangle = \delta^3(\vec{k}'-\vec{k})\, e^{-i\vec{a}\cdot\vec{k}} \ . \tag{12.39}$$

Der *gesamte erweiterte Zustandsraum läßt sich also „ausreduzieren" in überabzählbar viele eindimensionale und orthogonale Darstellungsräume, aufgespannt jeweils von einem uneigentlichen Vektor* $|\vec{k}\rangle$ gemäß (7.56) und bestehend aus den Vielfachen $e^{i\alpha}|\vec{k}\rangle$ mit reeller Phase α dieses Vektors, und in jedem dieser eindimensionalen Räume werden die Translationen $U(\vec{a})$ durch Multiplikation von $|\vec{k}\rangle$ mit Phasenfaktoren $e^{-i\vec{a}\cdot\vec{k}}$ dargestellt. Ein solcher eindimensionaler Teilraum (der denselben physikalischen Zustand repräsentiert) wird als *Strahl* und die auf ihm stattfindende *eindimensionale unitäre Darstellung der Translationsgruppe*,

$$\mathcal{D}(\vec{k}) = \{e^{-i\vec{a}\cdot\vec{k}}\,|\,\vec{a}\in\mathbb{R}^3\} \ , \tag{12.40}$$

als Strahldarstellung bezeichnet. Das vollständige Zerfallen des Darstellungsraumes in eindimensionale Unterräume ist typisch für abelsche Symmetriegruppen.

Kapitel 13

Quantenmechanische Drehgruppe und Spin

13.1 Die klassische Drehgruppe

Wir übertragen nun die obigen Begriffsbildungen auf den Fall, daß das quantenmechanische System und die Meßgeräte eine *starre Drehung um den Ursprung* erfahren. Eine Drehung im Anschauungsraum läßt sich eindeutig charakterisieren z.B. durch Angabe der Drehachse, definiert durch einen Einheitsvektor $\hat{\varphi}$, und eines Drehwinkels $\varphi = 0 \dots \pi$ um diese Achse (der Winkelbereich $\varphi = \pi \dots 2\pi$ wird durch Wahl der Drehachse $-\hat{\varphi}$ überdeckt). Beide kann man zum „*Drehvektor*"

$$\vec{\varphi} = \varphi \cdot \hat{\varphi} \,, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi \tag{13.1}$$

zusammenfassen, der an die Stelle von $\vec{a}$ bei den Translationen tritt. Ist $\vec{x}$ der Ortsvektor eines Teilchens unseres Systems (oder eines Punktes der Meßapparatur), so wird die starre Drehung bekanntlich durch die Transformation

$$\vec{x} \;\to\; \vec{x}\,' = R(\vec{\varphi})\,\vec{x} \quad \text{oder} \quad x'_k = \sum_{l=1}^{3} R_{kl}(\vec{\varphi})\,x_l \tag{13.2}$$

mit der eigentlich-*orthogonalen Matrix* $R = R(\vec{\varphi})$, also mit

$$R^T R = R R^T = \mathbf{1} \,, \quad \det R = +1 \quad \forall\, \vec{\varphi} \tag{13.3}$$

beschrieben, wobei $R(0) = \mathbf{1}$ ist. Die explizite Abhängigkeit von $\vec{\varphi}$ läßt sich in der Form

$$R_{kl}(\vec{\varphi}) = \delta_{kl} \cos\varphi + \varphi_k \varphi_l \left(\frac{1-\cos\varphi}{\varphi^2} \right) + \left(\frac{\sin\varphi}{\varphi} \right) \varepsilon_{kml}\,\varphi_m \tag{13.4}$$

angeben, aus der sich der Drehwinkel φ gemäß

$$1 + 2\cos\varphi = \mathrm{Tr}\, R \tag{13.5}$$

rekonstruieren läßt; wir werden jedoch im folgenden nur die für „infinitesimales" $d\varphi$ sich ergebende Form

$$R_{kl}(d\varphi \cdot \hat{\varphi}) \;=\; \delta_{kl} + d\varphi\, \varepsilon_{kml}\, (\hat{\varphi})_m \,, \tag{13.6a}$$

$$R(d\varphi \cdot \hat{\varphi})\,\vec{x} \;=\; \vec{x} + d\varphi\, (\hat{\varphi} \times \vec{x}) \tag{13.6b}$$

benötigen. Da die Multiplikation zweier orthogonaler Matrizen (13.3) wieder eine solche ergibt, bilden diese Matrizen eine Gruppe, die *spezielle (wegen* $\det R = +1$*) orthogonale Gruppe in drei reellen Dimensionen* $SO(3)$ *oder klassische Drehgruppe*. Das „Kompositionsgesetz“, nach dem der Parametervektor $\vec{\varphi}$ eines Produkts

$$R(\vec{\varphi}_1)\, R(\vec{\varphi}_2) = R(\vec{\varphi}(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2)) \tag{13.7}$$

aus den Faktorparametern $\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2$ zu bestimmen ist, ist wesentlich komplizierter als die einfache Addition $\vec{a}_1 + \vec{a}_2$ bei den Translationen, wird aber im folgenden nicht benötigt. Immerhin läßt die zu $R(\vec{\varphi})$ inverse Matrix,

$$R^{-1}(\vec{\varphi}) = R^T(\vec{\varphi}) = R(-\vec{\varphi}) = R(\varphi, -\hat{\varphi})\,, \tag{13.8}$$

sich einfach angeben. Wir bemerken jedoch zwei tiefgreifende qualitative Unterschiede gegenüber der Translationsgruppe:

(a) *Die Drehgruppe ist nichtabelsch*, d.h. zwei Drehungen sind im allgemeinen nicht miteinander vertauschbar. Eine Ausnahme bilden *Drehungen um ein und dieselbe Achse* $\pm\hat{\varphi}_0$, *die jeweils eine abelsche Untergruppe* bilden, weil hier sich offensichtlich einfach die Drehwinkel addieren bzw. subtrahieren:

$$R(\varphi_2, \pm\hat{\varphi}_0)\, R(\varphi_1, \hat{\varphi}_0) = R((\varphi_1 \pm \varphi_2), \hat{\varphi}_0)\,. \tag{13.9}$$

Drehungen um verschiedene Achsen dagegen sind nicht kommutativ. Wir können dies dadurch ausdrücken, daß anders als bei Gl. (12.28) die Größe

$$R(\vec{\varphi}_2)\, R(\vec{\varphi}_1)\, R^{-1}(\vec{\varphi}_2) = R(\vec{\varphi}) \tag{13.10}$$

nicht gleich $R(\vec{\varphi}_1)$ ist, wenn auch nach (9.6) $\mathrm{Tr}\, R(\vec{\varphi}) = \mathrm{Tr}\, R(\vec{\varphi}_1)$ und deshalb nach (13.5)

$$\varphi = \varphi_1\,, \tag{13.11}$$

d.h. die Gleichheit der Dreh*winkel* gilt. Die Drehachse $\hat{\varphi}$ in (13.10) muß sich selbst durch Anwendung einer geeigneten Drehung auf $\hat{\varphi}_1$ darstellen lassen; tatsächlich ist

$$\vec{\varphi} = R(\vec{\varphi}_2)\, \vec{\varphi}_1\,. \tag{13.12}$$

Zum Beweis überlegt man sich, daß die Achse $\hat{\varphi}$ einer Drehung bis auf das Vorzeichen der einzige reelle Einheitsvektor ist, der bei dieser Drehung invariant bleibt, d.h. der einzige normierte reelle Eigenvektor von $R(\varphi \cdot \hat{\varphi})$ zum Eigenwert 1 für alle φ. Aus

$$R(\vec{\varphi})\,[R(\vec{\varphi}_2)\, \hat{\varphi}_1] = R(\vec{\varphi}_2)\, \underbrace{R(\vec{\varphi}_1)\, \hat{\varphi}_1}_{\hat{\varphi}_1} = R(\vec{\varphi}_2)\, \hat{\varphi}_1 \tag{13.13}$$

folgt also $\hat{\varphi} = \pm R(\vec{\varphi}_2)\,\hat{\varphi}_1$; das negative Vorzeichen ist auszuscheiden, weil für $\varphi_2 = 0$ ja $\hat{\varphi} = \hat{\varphi}_1$ werden muß. Wir haben also

$$R(\vec{\varphi}_2)\,R(\vec{\varphi}_1)\,R(-\vec{\varphi}_2) = R\left(\varphi_1 \cdot (R(\vec{\varphi}_2)\,\hat{\varphi}_1)\right) \tag{13.14}$$

als formalen Ausdruck der Nichtkommutativität. Für infinitesimales $d\vec{\varphi}_1 = d\varphi_1 \cdot \hat{\varphi}_1$ schreiben wir (13.6a) als

$$R(d\vec{\varphi}_1) = \mathbf{1} + \sum_{m=1}^{3} \Lambda^m (d\vec{\varphi}_1)_m \tag{13.15}$$

mit den (als Folge von $R^T = R^{-1}$ antisymmetrischen) drei Matrizen

$$(\Lambda^m)_{kl} = \varepsilon_{kml} = -\varepsilon_{lmk} = -(\Lambda^m)_{lk} \qquad (m = 1, 2, 3)\,, \tag{13.16}$$

die die Rolle von Generatoren für die $R(\vec{\varphi})$ übernehmen; für sie wird (13.14) mit $\vec{\varphi}$ statt $\vec{\varphi}_2$ zu

$$R(\vec{\varphi})\,\Lambda^m R(-\vec{\varphi}) = \sum_{n=1}^{3} \Lambda^n \underbrace{R_{nm}(\vec{\varphi})}_{R^T(\vec{\varphi})_{mn}}\,. \tag{13.17}$$

(b) *Die Drehgruppe ist kompakt*, d.h. ihr sog. *Parameterraum*, der Wertebereich der Drehvektoren (13.1), ist eine beschränkte und abgeschlossene (kompakte) Menge – nämlich die Kugel vom Radius π im $\mathbb{R}^3$ um den Ursprung. Im Gegensatz dazu war bei der Translationsgruppe der Raum der Parametervektoren $\vec{a}$ unbeschränkt; die *Translationsgruppe ist nichtkompakt*. Eine Folge davon ist, daß die Drehungsgeneratoren – wie wir sehen werden – im Gegensatz zum rein kontinuierlichen Spektrum der Impulse ein diskretes Spektrum besitzen werden.

13.2 Drehoperatoren und Drehimpuls

Ganz wie in (12.1-12.3) charakterisieren wir nun das gedrehte quantenmechanische System durch Zustände $|\psi'\rangle$ und die gedrehten Meßapparaturen durch Observable A'; die Abbildung

$$|\psi\rangle \;\to\; |\psi'\rangle = U(R(\vec{\varphi}))\,|\psi\rangle\,, \tag{13.18}$$
$$A \;\to\; A' = U(R)\,A\,U^\dagger(R) \tag{13.19}$$

definiert dann auf ganz $\mathcal{H}$ eine Schar von *Drehoperatoren*, die wir je nach Bedarf als $U(R(\vec{\varphi})), U(R)$ oder $U(\vec{\varphi})$ schreiben. Bei Nacheinanderausführung von Drehungen muß

$$U(R_2)\,U(R_1) = U(R_2 \cdot R_1) \tag{13.20}$$

sein mit dem (12.5) entsprechenden Spezialfall

$$U(R^{-1})\, U(R) = U(-\vec{\varphi})\, U(\vec{\varphi}) = \mathbf{1}\,, \tag{13.21}$$

woraus die *Gruppeneigenschaft der* $U(R)$ erhellt; jedoch ist die Gruppe nun *nicht-abelsch*, da $R_1R_2 \neq R_2R_1$. Die Grundtatsache der *Isotropie des Raumes* führt zu der Forderung, daß diese Operatoren wiederum (12.7) erfüllen müssen, und da sie sich als Funktionen von $\vec{\varphi}$ aus

$$U(\vec{\varphi} = 0) = U(R = \mathbf{1}) = \mathbf{1} \tag{13.22}$$

kontinuierlich entwickeln, müssen sie sämtlich *unitär* sein:

$$U^\dagger(R) = U^{-1}(R) = U(R^{-1})\,. \tag{13.23}$$

Wiederum versuchen wir, sie durch *Generatoren infinitesimaler Drehungen* auszudrücken, indem wir analog zu (12.21/12.23) durch die Gleichung

$$U(d\vec{\varphi}) = \mathbf{1} + \delta U\,, \qquad \delta U = \frac{1}{i\hbar}\sum_{k=1}^{3} d\varphi_k\, J_k = -\delta U^\dagger \tag{13.24}$$

die drei *selbstadjungierten Operatoren* J_1, J_2, J_3 definieren:

$$J_k^\dagger = J_k \qquad (k = 1, 2, 3)\,. \tag{13.25}$$

Endliche Drehungen können wir aufbauen, indem wir wie bei (12.25) – dort wurde die Kommutativität der Translationen nicht benutzt! – die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} U(\varphi\cdot\hat{\varphi}) = -\frac{i}{\hbar}(\hat{\varphi}\cdot\vec{J}\,)\, U(\varphi\cdot\hat{\varphi}) \tag{13.26}$$

mit der Anfangsbedingung (13.22) integrieren zu der nach dem Stone-Theorem (12.27) erwarteten manifest unitären Darstellung

$$U(R(\vec{\varphi})) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{J}}\,. \tag{13.27}$$

Um die Vertauschungsrelationen der J_k zu bestimmen, gehen wir von der Relation (13.14) aus, die sich gemäß (13.20) in die Operatorrelation

$$U(\vec{\varphi}_2)\, U(\vec{\varphi}_1)\, U(-\vec{\varphi}_2) = U(\varphi_1 \cdot (R(\vec{\varphi}_2)\, \hat{\varphi}_1)) \tag{13.28}$$

übersetzt. Für infinitesimales $d\vec{\varphi}_1 = d\varphi_1 \cdot \hat{\varphi}_1$ folgt mit (13.24)

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{\varphi}_2\cdot\vec{J}\,)} J_k\, e^{+\frac{i}{\hbar}(\vec{\varphi}_2\cdot\vec{J}\,)} = \sum_{l=1}^{3} R^T(\vec{\varphi}_2)_{kl}\, J_l\,. \tag{13.29}$$

Die drei Operatoren J_k werden also bei der durch eine Drehung $\vec{\varphi}_2$ induzierten Transformation (13.19) in $\mathcal{H}$ linear untereinander transformiert, und zwar gerade mit dem Transponierten (d.h. Inversen) der zu $\vec{\varphi}_2$ gehörigen orthogonalen Matrix $R(\vec{\varphi}_2)$. Da dies das Transformationsverhalten der drei Komponenten eines Vektors ist, ist damit zunächst die schon vorweggenommene Schreibweise als *Drehimpulsvektor* $\vec{J}$ gerechtfertigt. Lassen wir nun auch $\vec{\varphi}_2$ infinitesimal werden, so ist in

(13.29) die linke Seite nach Formel (11.41) in erster Ordnung, die rechte nach (13.6) auszuwerten, wobei man noch $\varepsilon_{lmk} = \varepsilon_{mkl}$ verwendet:

$$J_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=1}^{3} (d\varphi_2)_m \, [J_m, J_k] = J_k + \sum_{l,m=1}^{3} (d\varphi_2)_m \, \varepsilon_{lmk} \, J_l \, . \tag{13.30}$$

Da dies für alle $d\vec{\varphi}_2$ gelten muß, schließen wir

$$\boxed{[J_m, J_k] = i\hbar \, \varepsilon_{mkl} \, J_l.} \qquad \text{(Summenkonvention!)} \tag{13.31}$$

Diese charakteristischen *Drehimpulsvertauschungsrelationen* waren uns in (3.7b) bereits begegnet und erschienen dort als Folge des speziellen Aufbaus des Bahndrehimpulsoperators aus $\vec{X}$ und $\vec{P}$; die obige Herleitung zeigt, daß sie tatsächlich viel allgemeiner, nämlich in der Eigenschaft der J_k als Drehungsgeneratoren und damit letztlich in der Struktur der Drehgruppe begründet sind. In der Form

$$[\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{J}, \vec{\varphi}_2 \cdot \vec{J}] = i\hbar \, (\vec{\varphi}_1 \times \vec{\varphi}_2) \cdot \vec{J} \tag{13.32}$$

besagen sie vom mathematischen Standpunkt, daß die Operatoren J_1, J_2, J_3 und ihre sämtlichen Linearkombinationen eine sog. *Lie-Algebra* bilden, d.h. daß der Kommutator zweier solcher Operatoren sich stets wieder als Linearkombination der „Basisoperatoren" J_k ausdrücken läßt, wobei die Koeffizienten dieser Kombination, hier

$$c_{mkl} = i\hbar \, \varepsilon_{mkl} \, , \tag{13.33}$$

als *Strukturkonstanten* bezeichnet werden. Die durch (13.31) bzw. (13.32) charakterisierte Lie-Algebra der Drehgruppe legt, wie wir nicht im einzelnen zeigen, über die Exponentialdarstellung (13.27) auch umgekehrt das Multiplikationsgesetz und damit – bis auf globale topologische Eigenschaften des Parameterraums – die Struktur der zugehörigen Gruppe endlicher Drehungen (*„Liesche Gruppe"*) eindeutig fest.

Wir erinnern nun daran, daß wir in Abschnitt 3.2 das Eigenwertproblem für ein Tripel hermitescher Operatoren mit den Vertauschungsrelationen (13.31) und den mit allen diesen Operatoren kommutierenden, bilinear aus ihnen aufgebauten Operator

$$\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \tag{13.34}$$

(den sog. *Casimir-Operator der Lie-Algebra* (13.31)) bereits vollständig studiert haben – mit Methoden, die von der speziellen Realisierung von (13.31) durch die Bahndrehimpulse (3.13) unabhängig sind. Wir können deshalb die dort gewonnenen Resultate – bis auf die Ersetzung von $\mathcal{L}^2_{(\vartheta,\varphi)}$-Funktionen durch abstrakte Hilbertvektoren – sofort übernehmen:

(a) Die Eigenwerte des Operators $\vec{J}^2$ sind

$$\hbar^2 j(j+1) \quad \text{mit} \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots \tag{13.35}$$

Zu jedem dieser Eigenwerte gehört ein Eigenraum von der Dimension[1]

$$2j + 1 = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots \,, \tag{13.36}$$

in dem eine Orthonormalbasis von Zuständen $|j, m\rangle$ mit

$$\langle j', m' | j, m\rangle = \delta_{j'j}\delta_{m'm} \,, \qquad m', m = -j, \ldots, +j \tag{13.37}$$

dadurch erhalten wird, daß eines der J_k, konventionellerweise J_3, gleichzeitig mit $\vec{J}^2$ auf seine Eigenwerte

$$m\hbar \quad \text{mit} \quad m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{13.38}$$

gebracht wird. Es gilt dann

$$\vec{J}^2 \, |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) \, |j, m\rangle \,, \tag{13.39a}$$

$$J_3 \, |j, m\rangle = \hbar m \, |j, m\rangle \,. \tag{13.39b}$$

(b) Durch wiederholte Anwendung der *Stufenoperatoren*

$$J_\pm = J_1 \pm i J_2 \,, \tag{13.40}$$

die ein zueinander adjungiertes Paar bilden, läßt sich gemäß den Formeln

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \, |j, m+1\rangle \,, \tag{13.41a}$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \, |j, m-1\rangle \tag{13.41b}$$

(mit konventionsbedingter Phasenwahl) jeder der Basisvektoren $|j, m\rangle$ in jeden anderen überführen. Wegen

$$J_+ |j, +j\rangle = 0 \,, \quad J_- |j, -j\rangle = 0 \tag{13.42}$$

führt dieser Prozeß aus dem $(2j+1)$-dimensionalen Eigenraum zum vorgegebenen j niemals heraus.

(c) Im Verein mit der Exponentialdarstellung (13.27), die sich ja als Reihe von Potenzprodukten der J_+, J_- und J_3 auffassen läßt, besagt dieses Resultat zum einen, daß jene $(2j+1)$-dimensionalen Eigenräume *Darstellungsräume der Drehgruppe* sind, d.h. durch die sämtlichen Drehoperatoren $U(R(\vec{\varphi}))$ jeweils in sich transformiert werden, zum anderen, daß diese Räume keine echten invarianten Unterräume mehr enthalten, d.h. im Sinne der obigen Definition, daß die auf ihnen stattfindenden Matrixdarstellungen

$$D^j = \{\langle j, m' | U(R) | j, m\rangle\} \tag{13.43}$$

[1]Bei dieser Aussage sehen wir von weiteren für das jeweilige System notwendigen Quantenzahlen völlig ab, betrachten also lediglich einen Faktorraum des Systemhilbertraumes, für den $\vec{J}^2$ und J_3 einen Maximalsatz bilden.

irreduzibel sind. Praktisch bedeutet dies, daß es in keinem dieser Räume eine Basis gibt, in der die Matrizen (13.43) für *alle* Drehungen R eine „Blockdiagonalform“

$$M = \begin{pmatrix} M_I & 0 \\ 0 & M_{II} \end{pmatrix} \tag{13.44}$$

mit Blöcken der Dimension $< 2j + 1$ annehmen würden.

Es bleibt nachzuprüfen, daß unsere abstrakte Neudefinition der Drehimpulse durch (13.24) im Falle eines *Teilchens, das nur die drei klassischen Bahnfreiheitsgrade* besitzt – d.h. für das ein Maximalsatz vertauschbarer Observabler durch (8.2) gegeben ist – tatsächlich auf den früher studierten *Bahndrehimpuls* zurückführt. Dazu überlegt man sich, daß analog zu (12.34) bei einer Drehung $R(\vec{\varphi})$ des Systems die Ortsdarstellung von Gl. (13.18) lautet:

$$\langle R\vec{x}|\psi'\rangle = \langle \vec{x}|\psi\rangle \quad \text{oder} \quad \langle \vec{x}|\psi'\rangle = \langle R^{-1}\vec{x}|\psi\rangle\,, \tag{13.45a}$$

oder

$$\langle \vec{x}|e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{J}}|\psi\rangle = \langle R^{-1}(\vec{\varphi})\vec{x}|\psi\rangle\,. \tag{13.45b}$$

Entwickelt man mittels Gl. (13.6b) die rechte Seite für „infinitesimales“ $d\vec{\varphi}$,

$$\begin{aligned} \langle R^{-1}(d\vec{\varphi})\vec{x}|\psi\rangle &= \langle \vec{x} - d\vec{\varphi}\times\vec{x}|\psi\rangle \\ &= \langle \vec{x}|\psi\rangle - (d\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\langle\vec{x}|\psi\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}d\vec{\varphi}\cdot\left(\vec{x}\times\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\right]\langle\vec{x}|\psi\rangle \end{aligned} \tag{13.46}$$

und vergleicht mit (13.24), so findet man in der Tat

$$\langle \vec{x}|\vec{J}\,|\psi\rangle = \vec{L}\langle\vec{x}|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \vec{L} = \vec{x}\times\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,. \tag{13.47}$$

Für diese spezielle Realisierung des Drehimpulses, zu der als Realisierung der abstrakten $|j,m\rangle$ die Kugelfunktionen (8.41) gehören, konnten wir zeigen, daß nur die ganzzahligen $\vec{L}^2$-Eigenwerte (3.39a) zulässig waren. Im Gegensatz zur allgemeinen Spektraltheorie der Drehimpulsoperatoren blieb dieser Nachweis jedoch an spezielle Eigenschaften des Bahndrehimpulses, wie die Gln. (3.23b/c) und (3.42/3.49), gebunden und läßt sich daher nicht ohne weiteres auf die abstrakten Drehimpulsoperatoren übertragen. Die Frage erhebt sich, ob nicht die in (13.35) – zunächst rein mathematisch – *offenbleibende Möglichkeit halbzahliger j-Werte* ein Hinweis darauf ist, daß Teilchen existieren können, für die bei quantenmechanischer Behandlung (8.2) oder (8.3) oder (8.4) kein Maximalsatz mehr ist, die also „nichtklassische“ Freiheitsgrade zusätzlich zu denen der Bahnbewegung aufweisen derart, daß diese Freiheitsgrade sich nach Art von Drehimpulseigenräumen mit nichtganzzahligen j-Werten manifestieren.

13.3 Spin $\frac{1}{2}$: die Fundamentaldarstellung

Der empirische Nachweis des Elektronenspins insbesondere durch das berühmte Stern-Gerlach-Experiment beantwortete erstmals die soeben aufgeworfene Frage positiv. In der Sprache der Quantenmechanik besagt er, daß dem einzelnen Elektron (oder Positron) ein Hilbertraum der Struktur

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S \tag{13.48}$$

zukommt, wobei $\mathcal{H}_B$ den uns geläufigen Hilbertraum zu den drei Bahnfreiheitsgraden bezeichnet, der unendlich-dimensional ist und in dem (7.2-7.4) Maximalsätze bilden. Dagegen ist $\mathcal{H}_S$ ein *zweidimensionaler* Hilbertraum, dessen *zugehörige Freiheitsgrade kein klassisches Gegenstück* besitzen, der *Spinraum*, in dem ein Tripel von Observablen

$$\vec{S} = \{S_1, S_2, S_3\}\,, \quad S_k^\dagger = S_k \tag{13.49}$$

mit den drehimpulsartigen Vertauschungsrelationen

$$[S_k, S_l] = i\hbar\, \varepsilon_{klm}\, S_m \qquad \text{(Summenkonvention!)} \tag{13.50}$$

wirkt, die den sog. *Spinvektor* bilden. Der gesamte Raum $\mathcal{H}_S$ ist dabei Eigenraum zu $\vec{S}^2$ mit $j = \frac{1}{2}$,

$$\vec{S}^2\, |\psi_S\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2\, |\psi_S\rangle \quad \forall\, |\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S\,, \tag{13.51}$$

woraus sich die Dimension $2j + 1 = 2$ ergibt. Er kann z.B. durch die zwei orthonormierten Eigenvektoren von S_3,

$$S_3\, |\frac{1}{2}, m_S\rangle = \hbar m_S\, |\frac{1}{2}, m_S\rangle\,, \qquad m_S = \pm\frac{1}{2} \tag{13.52}$$

aufgespannt werden. Eine (uneigentliche) Basis des Hilbertraumes (13.48) ist dann z.B. durch die Menge der Produktzustände

$$\left\{ |\vec{x}\rangle \cdot |\frac{1}{2}, m_S\rangle \;\middle|\; \vec{x} \in \mathbb{R}^3\,,\ m_S \pm \frac{1}{2} \right\} \tag{13.53}$$

gegeben. Da der Spinbetragseigenwert $\frac{3}{4}\hbar^2$ ein unveränderliches Attribut des Elektrons ist und insbesondere auch dann bestehen bleibt, wenn für die Bahnbewegung ein $\vec{L}^2$-Eigenzustand mit $l = 0$ vorliegt, wird der *Spin als innerer oder Eigendrehimpuls* des Elektrons bezeichnet. (Diese Sprechweise darf keineswegs zu einer Deutung des Spins nach klassischem Muster, etwa als innerer Drehimpuls eines ausgedehnten starren Körpers verleiten; weder ist nach heutiger Kenntnis eine Ausdehnung oder innere Struktur des Elektrons nachweisbar, noch würden derlei Bilder die permanente Begrenzung der Betragsquantenzahl auf $\frac{1}{2}$ verständlich machen. Der Raum $\mathcal{H}_S$ ist wesentlich nichtklassischer Natur.)

Für eine konkrete Darstellung des zweidimensionalen Raumes $\mathcal{H}_S$ wird man diesen durch *zweikomponentige komplexe Spaltenvektoren* realisieren derart, daß z.B. die

„obere" Komponente dem ($m_S = +\frac{1}{2}$)-Anteil, die untere dem ($m_S = -\frac{1}{2}$)-Anteil entspricht. Den beiden S_3-Eigenvektoren (13.52) entsprechen dann die orthonormierten Spalten

$$\chi_{\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} = \left(\langle \tfrac{1}{2}\, m'_S | \tfrac{1}{2}\, +\tfrac{1}{2}\rangle\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{13.54a}$$

$$\chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \left(\langle \tfrac{1}{2}\, m'_S | \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{13.54b}$$

und der allgemeine Spinzustand etwa in der Produktbasis (13.53) wird durch eine *„zweikomponentige Wellenfunktion"*

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \langle \vec{x}, \frac{1}{2}\, +\frac{1}{2}|\psi\rangle \\ \langle \vec{x}, \frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}|\psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{+\frac{1}{2}}(\vec{x}) \\ \psi_{-\frac{1}{2}}(\vec{x}) \end{pmatrix} \\ &= \langle \vec{x}, \tfrac{1}{2}\, +\tfrac{1}{2}|\psi\rangle \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \langle \vec{x}, \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}|\psi\rangle \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{13.55}$$

charakterisiert. Die Spinoperatoren (13.49) werden nach (13.52) und (13.41) durch die Matrizen

$$\left\langle \tfrac{1}{2}\, m'_S | S_3 | \tfrac{1}{2}\, m_S \right\rangle = \hbar m_S\, \delta_{m'_S m_S}, \tag{13.56a}$$

$$\begin{aligned}\left\langle \tfrac{1}{2}\, m'_S | S_1 \pm iS_2 | \tfrac{1}{2}\, m_S \right\rangle &= \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp m_S\right)\left(\frac{1}{2} \pm m'_S\right)}\, \delta_{m'_S, m_S \pm 1} \\ &= \hbar \left(\frac{1}{2} \mp m_S\right) \delta_{m'_S, -m_S}\end{aligned} \tag{13.56b}$$

dargestellt. Es ist Konvention,

$$S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k, \quad k = 1, 2, 3 \tag{13.57}$$

zu schreiben und die Bezeichnung $\vec{\sigma}$ sowohl für die dadurch definierten abstrakten Operatoren als auch für ihre Matrixdarstellungen gemäß (13.56),

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{13.58}$$

die sog. *Paulischen Spinmatrizen*, zu verwenden. Die Operatoren bzw. Matrizen

$$\Pi_{+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{13.59a}$$

$$\Pi_{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \sigma_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{13.59b}$$

sind dann die Projektoren auf die beiden orthogonalen Teilräume von $\mathcal{H}_S$ zu $m_S = +\frac{1}{2}\hbar$ und $-\frac{1}{2}\hbar$ mit

$$\Pi_{m'_S}\Pi_{m_S} = \delta_{m'_S m_S}\, \Pi_{m_S} \qquad (m'_S, m_S = \pm\frac{1}{2}) \tag{13.60}$$

$$\Pi_{+\frac{1}{2}} + \Pi_{-\frac{1}{2}} = \mathbf{1}, \tag{13.61}$$

während die Matrizen (13.56b) in der Form

$$\frac{1}{2}\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad \frac{1}{2}\sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{13.62}$$

die beiden Teilräume gemäß den Formeln

$$\frac{1}{2}\sigma_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \frac{1}{2}\sigma_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{13.63}$$

aufeinander abbilden. Nach Konstruktion erfüllen die Spinmatrizen die (13.50) entsprechenden Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_k, \sigma_l] = 2i\,\varepsilon_{klm}\,\sigma_m \tag{13.64}$$

und bilden damit die *einfachste, d.h. dimensionsmäßig kleinste nichttriviale*[2] *Darstellung der Lie-Algebra* (13.31) *der Drehungen*. Zusätzlich besitzen sie die nicht für alle Drehimpulse, sondern nur für diese zweidimensionale Darstellung gültige Eigenschaft

$$\{\sigma_k, \sigma_l\} = 2\delta_{kl} \cdot \mathbf{1} \,, \quad \text{d.h.} \tag{13.65a}$$

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \mathbf{1} \,, \quad \sigma_l\sigma_k = -\sigma_k\sigma_l \quad (k \neq l) \,, \tag{13.65b}$$

wie man anhand von (13.58) direkt nachrechnet. Man faßt sie mit (13.64) in der Formel

$$\sigma_k\sigma_l = \delta_{kl}\,\mathbf{1} + i\,\varepsilon_{klm}\,\sigma_m \tag{13.66a}$$

oder auch

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = (\vec{A}\cdot\vec{B})\,\mathbf{1} + i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{\sigma} \tag{13.66b}$$

zusammen, wobei $\vec{A}$ und $\vec{B}$ beliebige, jedoch mit $\vec{\sigma}$ vertauschbare Vektorgrößen sind. Damit läßt sich jedes Produkt von σ-Matrizen als Linearkombination der σ_k und der 2×2-Einheitsmatrix darstellen. Daß dies möglich sein muß, wird sofort klar, wenn man bedenkt, daß die vier Matrizen

$$\sigma_0 = \mathbf{1} \,, \quad \sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3 \tag{13.67}$$

linear unabhängig sind und folglich (da die allgemeinste 2×2-Matrix vier Elemente hat) eine *Basis im Raume aller* 2×2*-Matrizen* bilden. Man sieht dies unmittelbar, indem man den äquivalenten Satz

$$\Pi_{+\frac{1}{2}},\ \Pi_{-\frac{1}{2}},\ \frac{1}{2}\sigma_+,\ \frac{1}{2}\sigma_- \tag{13.68}$$

in der expliziten Darstellung (13.59/13.62) betrachtet. Es läßt sich also die allgemeinste komplexe 2×2-Matrix in der Form

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = c_0 \cdot \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{3} c_k\,\sigma_k \tag{13.69}$$

[2]Die triviale Darstellung ist die eindimensionale durch einen unter allen Drehungen invarianten Vektor, wobei jedes $U(\vec{\varphi})$ auf die Multiplikation mit 1 abgebildet wird.

darstellen; da die Basismatrizen (13.67) alle *hermitesch* sind, ist dabei

$$M^\dagger \ (\equiv M^{T*}) \ = M \quad \text{genau dann, wenn} \quad c_k^* = c_k \quad (k = 0,1,2,3)\,. \tag{13.70}$$

Zur Bestimmung der Koeffizienten c_0, c_k in (13.69) kann man davon ausgehen, daß die σ-Matrizen (13.58) offensichtlich spurfrei sind:

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_k = 0 \quad (k = 1,2,3)\,, \qquad \mathrm{Tr}\,\mathbf{1} = 2\,. \tag{13.71}$$

Nach (13.66a) gilt deshalb

$$\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,(\sigma_k^\dagger \sigma_l) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,(\sigma_k \sigma_l) = \frac{1}{2}\delta_{kl}\,\mathrm{Tr}\,\mathbf{1} = \delta_{kl} \qquad (k,l = 0,1,2,3)\,. \tag{13.72}$$

Da die Größe

$$const. \cdot \mathrm{Tr}\,(A_1^\dagger A_2) \tag{13.73}$$

für Operatoren, bei denen sie existiert (bei Matrizen endlicher Dimension also immer) die Eigenschaften (6.4 - 6.8) eines *Skalarproduktes* hat, besagt (13.72), daß (13.67) eine *Orthonormalbasis im Raum der komplexen* 2×2*-Matrizen bezüglich der Metrik* $\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M_1^\dagger M_2)$ darstellt. Damit läßt sich (13.69) sofort umkehren:

$$c_k = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,(\sigma_k M) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,(M\sigma_k) \qquad (k = 0,1,2,3)\,. \tag{13.74}$$

Die obigen einfachen Eigenschaften der σ-Matrizen erlauben es nun, auch die *Darstellung endlicher Drehungen im zweidimensionalen Raum* $\mathcal{H}_S$, in der Bezeichnung von (13.43) also die lineare Darstellung $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ der Drehgruppe, geschlossen anzugeben. Nach (13.27) und (13.57) wird ja $U(\vec{\varphi})$ hier durch die unitäre 2×2-Matrix

$$U^{(\frac{1}{2})}(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{2}\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{i}{2}\varphi)^n}{n!}(\hat{\varphi}\cdot\vec{\sigma})^n \tag{13.75}$$

dargestellt. Wegen (13.66b) ist aber

$$(\hat{\varphi}\cdot\vec{\sigma})^2 = (\hat{\varphi}\cdot\hat{\varphi})\cdot\mathbf{1} = \mathbf{1}\,, \tag{13.76}$$

d.h. in der Exponentialreihe (13.75) werden alle „geraden" Terme zu $\mathbf{1}$, alle „ungeraden" zu $\hat{\varphi}\cdot\vec{\sigma}$ proportional, und man erhält

$$e^{-\frac{i}{2}\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}} \;=\; \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)\cdot\mathbf{1} - i\,\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)\cdot(\hat{\varphi}\cdot\vec{\sigma}) \tag{13.77a}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\cdot\hat{\varphi}_3 & -i\sin\frac{\varphi}{2}\cdot(\hat{\varphi}_1 - i\hat{\varphi}_2) \\ -i\sin\frac{\varphi}{2}\cdot(\hat{\varphi}_1 + i\hat{\varphi}_2) & \cos\frac{\varphi}{2} + i\sin\frac{\varphi}{2}\cdot\hat{\varphi}_3 \end{pmatrix}. \tag{13.77b}$$

Dies ist von der Form (13.69) mit

$$|c_0|^2 + |\vec{c}\,|^2 = \left|\cos\frac{\varphi}{2}\right|^2 + \left|-i\hat{\varphi}\sin\frac{\varphi}{2}\right|^2 = 1\,. \tag{13.78}$$

Mit dieser „Drehmatrix" können wir nun das Drehverhalten des allgemeinen reinen Zustandes $|\psi\rangle$ des Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens etwa in der Darstellung (13.55) angeben:

Die Drehoperation wirkt nun nicht nur gemäß (13.45a/b) auf $\vec{x}$, sondern auch als Matrixoperation auf den diskreten Index m_S,

$$\begin{aligned}\langle\vec{x},\tfrac{1}{2}\,m_S|\psi'\rangle &= \langle\vec{x},\tfrac{1}{2}\,m_S|e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{J}}|\psi\rangle \\ &= \sum_{m'_S=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \langle\tfrac{1}{2}\,m_S|e^{-\frac{i}{2}\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}}|\tfrac{1}{2}\,m'_S\rangle\langle R^{-1}(\vec{\varphi})\cdot\vec{x},\tfrac{1}{2}\,m'_S|\psi\rangle \end{aligned} \tag{13.79a}$$

oder ausgeschrieben ($\cos\frac{\varphi}{2}=c, \sin\frac{\varphi}{2}=s$):

$$\begin{pmatrix}\psi'_{+\frac{1}{2}}(\vec{x})\\ \psi'_{-\frac{1}{2}}(\vec{x})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c-is\,\hat{\varphi}_3 & -is\,(\hat{\varphi}_1-i\hat{\varphi}_2)\\ -\,is\,(\hat{\varphi}_1+i\hat{\varphi}_2) & c+is\,\hat{\varphi}_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{+\frac{1}{2}}(R^{-1}(\vec{\varphi})\vec{x})\\ \psi_{-\frac{1}{2}}(R^{-1}(\vec{\varphi})\vec{x})\end{pmatrix}. \tag{13.79b}$$

Eine zweikomponentige Größe, die sich bei Raumdrehungen mit der Matrix (13.77) transformiert, heißt *Spinor* (genauer: *Zweier-* oder *Pauli-Spinor*) und, wenn ihre Komponenten Funktionen von $\vec{x}$ sind, ein *Spinorfeld*: Ein Teilchen ist Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen genau dann, wenn es durch eine spinorielle Wahrscheinlichkeitsamplitude (13.55) mit dem Transformationsgesetz (13.79a/b) beschrieben wird. Die „infinitesimale“ Form von (13.79a),

$$\begin{aligned}&\langle\vec{x},\frac{1}{2}\,m_S|\,\mathbf{1}-\frac{i}{\hbar}d\vec{\varphi}\cdot\vec{J}\,|\psi\rangle \\ &=\sum_{m'_S}\left(\mathbf{1}-\frac{i}{2}\,d\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}\right)_{m_S\,m'_S}\left(1-(d\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\right)\,\langle\vec{x},\frac{1}{2}\,m'_S|\psi\rangle \\ &=\sum_{m'_S}\left\{\mathbf{1}-\frac{i}{\hbar}\,d\vec{\varphi}\cdot\left[\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}+\hbar\,(\vec{x}\times\frac{1}{i}\vec{\nabla})\right]\right\}_{m_S\,m'_S}\langle\vec{x},\frac{1}{2}\,m'_S|\psi\rangle\,,\end{aligned} \tag{13.80}$$

erlaubt durch Vergleich mit (13.24) die Identifikation

$$\vec{J}=\hbar\left(\vec{l}+\frac{1}{2}\vec{\sigma}\right)=\vec{L}+\vec{S} \tag{13.81}$$

des *Gesamtdrehimpulses des Spinorteilchens* als der Vektorsumme von Bahndrehimpuls und Spin. Da $\vec{L}$ und $\vec{S}$ auf verschiedene Faktorräume wirken und daher trivialerweise kommutieren,

$$[L_k,S_l]=0\quad\forall\,(k,l)\,, \tag{13.82}$$

faktorisiert der Drehoperator gemäß

$$U(\vec{\varphi})=e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{S}}\,, \tag{13.83}$$

was auf die Formel (13.79a) zurückführt.

Mit der nichtklassischen Erweiterung (13.48) des Einteilchen-Hilbertraumes kommen nun nicht mehr nur $\vec{X}$ und $\vec{P}$, sondern die neun Operatoren

$$\vec{X},\vec{P},\vec{S}\quad\text{mit}\quad[\vec{X},\vec{S}]=[\vec{P},\vec{S}]=0 \tag{13.84}$$

als *„Basisgrößen"* in Frage, aus denen wir die Observablen des Systems als Operatorfunktionen aufbauen, und Maximalsätze vertauschbarer Observabler sind etwa durch

$$\{X_1, X_2, X_3, (\vec{S}^2), S_3\} \quad \text{oder} \quad \{T, \vec{L}^2, L_3, (\vec{S}^2), S_3\} \tag{13.85}$$

gegeben, wobei man $\vec{S}^2$ meist wegläßt, da sein Eigenwert $\frac{3}{4}\hbar^2$ ein unveränderliches Attribut des Teilchens ist. Damit besteht auch die Möglichkeit, daß im Hamiltonoperator H des Teilchens $\vec{S}$-abhängige Terme auftreten, d.h. *am Spin angreifende Wechselwirkungen, insbesondere mit äußeren elektromagnetischen Feldern*. Diese Wechselwirkungen, die (wie übrigens das Spinphänomen selbst) letzlich relativistischen Ursprungs sind, können in der hier dargebotenen, rein nichtrelativistischen Theorie nicht deduktiv erschlossen, sondern nur aus der Erfahrung übernommen werden. Die wichtigste von ihnen rührt daher, daß beim Elektron der Spin $\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ mit einem *magnetischen Spinmoment*

$$\vec{\mu}_S^{\,\mathrm{Op}} = \frac{e}{m_e}\vec{S} = 2\mu_B\left(\frac{1}{2}\vec{\sigma}\right) \;, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \tag{13.86}$$

verknüpft ist, so daß die in Abschnitt 4.3 schon diskutierte *Einstellenergie des magnetischen Moments des Elektrons im konstanten Magnetfeld* $\vec{B}_0$ die gegenüber (4.53/4.54) erweiterte Form

$$H_{\vec{B}} = -\vec{\mu}^{\,\mathrm{Op}} \cdot \vec{B}_0 \tag{13.87}$$

mit

$$\vec{\mu}^{\,\mathrm{Op}} = \underbrace{\frac{e}{2m_e}\vec{L}}_{\vec{\mu}_L^{\mathrm{Op}}} + \underbrace{\frac{e}{m_e}\vec{S}}_{\vec{\mu}_S^{\mathrm{Op}}} = \mu_B\left(\vec{l} + 2\cdot\frac{\vec{\sigma}}{2}\right) \tag{13.88}$$

annimmt. Die bemerkenswerte, nichtrelativistisch nicht weiter begründbare Erfahrungstatsache, daß das *„gyromagnetische Verhältnis"*, d.h. der Proportionalitätsfaktor zwischen $\vec{\mu}$ in Einheiten von μ_B und Drehimpuls, für den Bahndrehimpuls den Wert $g_L = 1$, *für den Spin dagegen den doppelt so großen Wert* $g_S = 2$ hat, ist insbesondere der Schlüssel zum Verständnis der „anomalen" Zeeman-Effekte der Atomspektren.

Als weiteres wichtiges Beispiel einer Spinwechselwirkung sei die für ein Elektron im elektrostatischen Zentralfeld auftretende *„Spin-Bahn-Wechselwirkung"*

$$H_{LS} = V_{LS}(r)\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\right) \;, \quad r = |\vec{X}| \tag{13.89}$$

erwähnt, die die Feinstruktur der Atomspektren bewirkt. (Für ihre Behandlung vgl. Kap. 14!)

Die Paulische Spintheorie zeigt, daß – anders als beim reinen Bahndrehimpuls – der nach (13.35) mögliche Darstellungsraum $\mathcal{H}_2$ mit $2j+1=2$, d.h. $j=\frac{1}{2}$, als nichtklassischer Spinraum $\mathcal{H}_S$ in völlig akzeptabler Weise in die Quantentheorie eingebaut werden kann. Auch die *Räume* $\mathcal{H}_{2j+1}$ *mit den höheren „halbzahligen"* j*-Werten* $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ lassen sich konstruieren, etwa nach dem in Kap. 14 beschriebenen

Verfahren über die Produkträume $\mathcal{H}_{2l+1} \otimes \mathcal{H}_2$, wo $\mathcal{H}_{2l+1}$ mit $l = 0, 1, 2, \ldots$ die von den Kugelfunktionen Y_{lm} aufgespannten Darstellungsräume des Bahndrehimpulses (d.h. der klassischen Drehgruppe $SO(3)$) sind. Jedoch besitzt die Darstellung $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ auf $\mathcal{H}_2$ eine Merkwürdigkeit, die sich auf alle $\mathcal{D}^j$ mit halbzahligem j überträgt: Bei der klassischen Drehgruppe im Anschauungsraum stellen ja $\pi \cdot \hat{\varphi}$ und $\pi \cdot (-\hat{\varphi})$ für jedes $\hat{\varphi}$ dieselbe Drehung dar,

$$R(\pi \cdot \hat{\varphi}) = R(-\pi \cdot \hat{\varphi}) \quad \forall\, \hat{\varphi}\,, \tag{13.90}$$

(oder anders gesagt, $R(2\pi \cdot \hat{\varphi})$ ist für jedes $\hat{\varphi}$ die Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^3$), während in der Matrixgruppe $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ – wegen des Auftretens des halben Drehwinkels $\frac{\varphi}{2}$ in (13.77) – offenbar

$$U^{(\frac{1}{2})}(\pi \cdot \hat{\varphi}) = -i(\hat{\varphi} \cdot \vec{\sigma})\,, \quad U^{(\frac{1}{2})}(-\pi \cdot \hat{\varphi}) = +i(\hat{\varphi} \cdot \vec{\sigma}) \tag{13.91}$$

gilt; mit anderen Worten, eine Drehung um $\varphi = 2\pi$ ergibt hier nicht die 2×2-Einheitsmatrix, sondern das Negative davon, und erst bei einer Drehung um 4π wird auch in $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ wieder die Identität erreicht:

$$U^{(\frac{1}{2})}(2\pi \cdot \hat{\varphi}) = -\mathbf{1}\,, \quad U^{(\frac{1}{2})}(4\pi \cdot \hat{\varphi}) = \mathbf{1} \quad \forall\, \hat{\varphi}\,. \tag{13.92}$$

Daß der *reine Zustand $|\psi\rangle$ eines Spinorteilchens bei einer Drehung um 2π nicht genau in sich selbst, sondern in $-|\psi\rangle$ übergeht*, widerspricht zwar der Anschauung, aber nicht den Prinzipien der Quantenmechanik, da $+|\psi\rangle$ und $-|\psi\rangle$ zum gleichen physikalischen Zustand (Strahl in $\mathcal{H}$) gehören. Es bedeutet jedoch, daß das Einselement von $SO(3)$ auf zwei $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$-Elemente, $+\mathbf{1}$ und $-\mathbf{1}$, und damit auch jede „klassische“ Drehung $R(\vec{\varphi})$ auf zwei $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$-Elemente $\pm U^{(\frac{1}{2})}(\vec{\varphi})$ abgebildet wird, so daß $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ *kein eindeutiges Bild und daher nach der Definition in Abschnitt* 12.2 *im strengen Sinne keine Darstellung von $SO(3)$ ist, und dieser Sachverhalt überträgt sich auf alle $\mathcal{D}^j$ mit halbzahligem j*. Man spricht hier gelegentlich von „zweiwertigen Darstellungen der Drehgruppe“, jedoch ist es sinnvoller, gerade die umgekehrte begriffliche Konsequenz zu ziehen: Da die Lie-Algebra (13.31) der Drehimpulse die halbzahligen j-Werte erlaubt und die zugehörigen Matrixdarstellungen $\mathcal{D}^j$ – mit dem Prototyp (13.77) für $j = \frac{1}{2}$ – in der Natur tatsächlich vorkommen, wird *das Drehverhalten quantenmechanischer Systeme offenbar durch eine Transformationsgruppe bestimmt, die umfassender als die klassische Drehgruppe $SO(3)$*, nämlich isomorph zur Gruppe der unitären Matrizen (13.77) ist. Von dieser Gruppe sind nun $SO(3)$ (und die dazu isomorphen Matrixdarstellungen (13.43) mit ganzzahligem $j = l$) umgekehrt sehr wohl Darstellungen, nämlich homomorphe, d.h. keine umkehrbar eindeutigen Bilder, weil $+\mathbf{1}$ und $-\mathbf{1}$ von $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ beide auf das Einselement von $SO(3)$ bzw. $\mathcal{D}^l$ $(l = 0, 1, 2 \ldots)$ abgebildet werden[3].

Die Matrix (13.77) ist nun aber wegen ihrer manifesten Unitarität und der Eigenschaft (13.78) nichts anderes als die *allgemeinste unitäre 2×2-Matrix mit Determi-*

[3]Der gruppentheoretisch vorgebildete Hörer sieht, daß $SO(3)$ bzw. $\mathcal{D}^l$ dann isomorph zur Faktorgruppe $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}/\mathcal{Z}_2$ nach dem aus den zwei Elementen (13.92) bestehenden Normalteiler $\mathcal{Z}_2$ von $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ sind.

nante $+1$, denn diese hat die Form

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} = (M^{-1})^\dagger \quad \text{mit} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \, , \tag{13.93}$$

d.h. genau die Form (13.77/13.78), wobei die komplexen Zahlen a, b, die sog. *Cayley-Kleinschen Parameter*, hier in der Gestalt

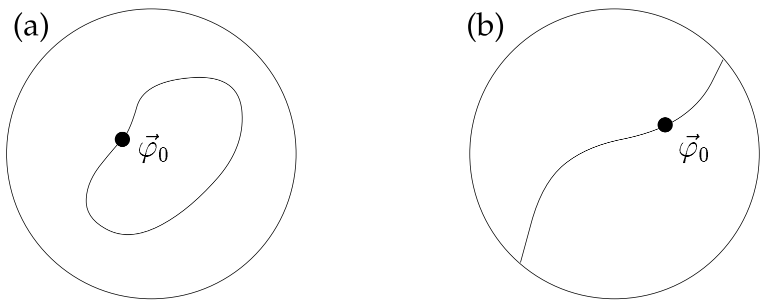
$$a = \cos\frac{\varphi}{2} - i\hat{\varphi}_3 \sin\frac{\varphi}{2} \, , \quad b = -i(\hat{\varphi}_1 - i\hat{\varphi}_2)\sin\frac{\varphi}{2} \tag{13.94}$$
$$\text{mit} \quad \hat{\varphi}_1^2 + \hat{\varphi}_2^2 + \hat{\varphi}_3^2 = 1$$

auftreten. Damit ist die *quantenmechanische Drehgruppe definiert als isomorph zur sog. speziellen unitären Gruppe in zwei komplexen Dimensionen, $SU(2)$, bestehend aus den Matrizen* (13.77) *oder* (13.93), *und diese Gruppe ist ihrerseits die sog. fundamentale, d.h. dimensionsmäßig kleinste nichttriviale Darstellung der quantenmechanischen Drehgruppe.*

Die nichteindeutige Beziehung zwischen klassischer $SO(3)$ und quantenmechanischer $SU(2)$ ist ein Beispiel dafür, daß die Lie-Algebra der Generatoren, die ja hier beiden Gruppen gemeinsam und durch die Drehimpuls-Vertauschungsrelationen (13.31) gegeben ist, die Gruppenstruktur i.a. nur bis auf gewisse globale Eigenschaften festlegt, in diesem Falle topologische Eigenschaften des Parameterraumes: Für $SU(2)$ ist wegen der Beziehung

$$(\mathrm{Re}\, a)^2 + (\mathrm{Im}\, a)^2 + (\mathrm{Re}\, b)^2 + (\mathrm{Im}\, b)^2 = 1$$

(oder (13.78)) der Parameterraum die Oberfläche der Einheitskugel im reellen $\mathbb{R}^4$, also nicht nur kompakt, sondern auch „einfach zusammenhängend“ in dem Sinne, daß jede geschlossene stetige Kurve auf dieser Oberfläche stetig auf einen Punkt zusammengezogen werden kann. Dagegen ist die vordergründig so einfache „Parameterkugel“ (13.1) von $SO(3)$ in Wahrheit ein topologisches komplizierteres Gebilde, weil nach (13.90) *Paare von Antipodalpunkten auf der Oberfläche dieser Kugel als ein und derselbe Punkt zu betrachten* sind, so daß eine Kurve wie in Skizze (b), die einen Ausgangspunkt $\vec{\varphi}_0$ stetig mit zwei Antipodalpunkten verbindet, tatsächlich eine geschlossene Kurve, aber im Gegensatz zu ebenfalls geschlossenen Kurven vom Typ der Skizze (a) nicht stetig auf einen Punkt zusammenziehbar ist.



(13.95)

Die *Parametermannigfaltigkeit der $SO(3)$* ist daher (mindestens, und, wie sich zeigt, auch genau) *zweifach zusammenhängend*. Da auf einem n-fach zusammenhängenden Gebiet definierte stetige Funktionen bis zu n-deutig sein können, wird damit das Auftreten der „zweideutigen Darstellungen“ von $SO(3)$ wie $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ plausibel. Dagegen hat die quantenmechanische $SU(2)$ bei gleicher „infinitesimaler“ oder „lokaler“ Struktur (d.h. gleicher Generatoralgebra) nur eindeutige Darstellungen, da sie einfach zusammenhängend ist; sie ist die sog. *Überdeckungsgruppe* der klassischen $SO(3)$. Diese Zusammenhänge können wir hier nur andeuten.

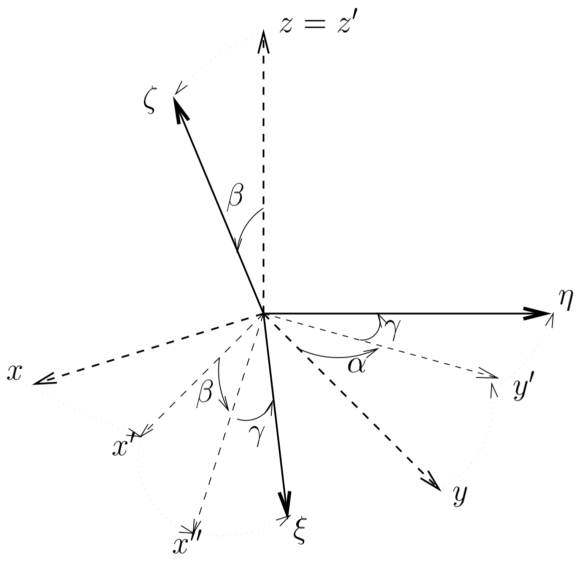
13.4 Höhere irreduzible Darstellungen

Für das Studium der Matrixdarstellungen (13.43) in den Räumen $\mathcal{H}_{2j+1}$ mit $j > \frac{1}{2}$ ist es zweckmäßig, die Drehungen nicht mehr durch $\vec{\varphi}$, sondern durch die aus der klassischen Mechanik des starren Körpers geläufigen *Eulerschen Winkel* zu parametrisieren, da dann eine sehr bequeme, bei (13.27) nicht mögliche Faktorisierung des Drehoperators $U(R)$ in drei Einzeldrehungen mit nur zwei verschiedenen Drehachsen möglich wird. Jede beliebige Drehung läßt sich zerlegen (vgl. Skizze) in

(a) eine Drehung um den Winkel α um die z-Achse des Ausgangs-Koordinatensystems,

(b) eine Drehung um β um die bei (a) resultierende gedrehte y-Achse y',

(c) eine Drehung um γ um die bei (b) resultierende gedrehte z-Achse ζ.



Die Wertebereiche der drei Euler-Winkel α, β, γ sind dabei

$$\begin{aligned} 0 &\leq \alpha \leq 2\pi \,, \\ 0 &\leq \beta \leq \pi \,, \\ 0 &\leq \gamma \leq 2\pi \,. \end{aligned} \tag{13.96}$$

Die entsprechende Darstellung von $U(R)$ als Produkt

$$U(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_\zeta}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} \tag{13.97}$$

ist noch unzweckmäßig, weil sie sich auf Drehachsen aus drei verschiedenen Achsenkreuzen bezieht. Nach (13.28) ist aber nun

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}\, e^{+\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} \,, \tag{13.98}$$

weil die y'-Achse ja durch die Drehung $R(\alpha\cdot\hat{e}_z)$ von (a) aus der y-Achse hervorgeht, und zweimalige Anwendung dieses Schemas gibt analog

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_\zeta} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}\, e^{+\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'}} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha-\gamma-\alpha)J_z}\, e^{\frac{i}{\hbar}\beta J_y}\, e^{\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}\ . \end{aligned} \tag{13.99}$$

Setzt man beides in (13.97) ein, so entsteht die angekündigte Faktorisierung

$$U(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_3}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_2}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_3} \tag{13.100}$$

mit *lauter auf das „ungedrehte" Ausgangsachsenkreuz bezogenen Drehachsen, von denen zwei sogar die 3-Achse* sind, was bei einer Darstellung durch J_3-Eigenvektoren offensichtlich erhebliche Vereinfachungen bringt: Die Matrizen (13.43) schreiben wir nun als

$$D^j_{m'm}(R(\alpha,\beta,\gamma)) = \langle j,m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle \tag{13.101a}$$
$$= e^{-i\alpha m'}\, d^j_{m'm}(\beta)\, e^{-i\gamma m} \tag{13.101b}$$

mit den sog. *reduzierten Drehmatrizen*

$$d^j_{m'm}(\beta) = \langle j,m'|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_2}|j,m\rangle\ . \tag{13.102}$$

Für die Fundamentaldarstellung mit $j=\frac{1}{2}$ ist nach den Gln. (13.77) einfach

$$e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_2} = \cos\frac{\beta}{2}\cdot\mathbf{1} - i\sin\frac{\beta}{2}\cdot\sigma_2\ , \tag{13.103}$$

und wir erhalten die ($j=\frac{1}{2}$)-*Drehmatrix*

$$d^{\frac{1}{2}}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \tag{13.104}$$

oder

$$D^{\frac{1}{2}}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{+\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2} & e^{+\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\ . \tag{13.105}$$

Sie ist eine zu (13.77b) äquivalente Parametrisierung der allgemeinen $SU(2)$-Transformation (13.93) mit den Cayley-Klein-Parametern

$$a = e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2}\ ,\quad b = -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2}\ . \tag{13.106}$$

Wie in (13.92) bemerken wir, daß

$$D^{\frac{1}{2}}(2\pi,0,0) = D^{\frac{1}{2}}(0,0,2\pi) = -\mathbf{1} \tag{13.107}$$

ist und erst die Drehung mit $\alpha=4\pi$ bzw. $\gamma=4\pi$ zur Identität von $SU(2)$ zurückführt. Um den vollen Parameterbereich der $SU(2)$ zu überstreichen, muß man deshalb den *„klassischen" Wertebereich* (13.96) *der Euler-Winkel erweitern zu*[4]

$$0\le\alpha,\gamma\le 4\pi\ ,\quad 0\le\beta\le\pi\ . \tag{13.108}$$

[4]Tatsächlich genügt es, den Bereich von α *oder* γ auf $0\ldots 4\pi$ zu erweitern, aber die symmetrische Wahl (13.108), bei der die ganze $SU(2)$ zweimal überstrichen wird, ist eingebürgert.

Für die höheren j-Werte, wo die Matrixdarstellungen der Drehimpulsoperatoren nicht mehr die einfache Eigenschaft (13.66a/b) der Paulischen Spinmatrizen haben, ist die explizite Berechnung der Drehmatrizen komplizierter (vgl. Übungsaufgaben oder das Verfahren von Gl. (14.47)). Wir notieren hier nur das Resultat,

$$\begin{aligned} d^j_{m'm}(\beta) &= \sum_\mu (-)^\mu \frac{\sqrt{(j+m')!\,(j-m')!\,(j+m)!\,(j-m)!}}{\mu!\,(\mu+m-m')!\,(j+m'-\mu)!\,(j-m-\mu)!} \\ &\quad \times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{(2j-2\mu+m'-m)} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{(2\mu-m'+m)} , \end{aligned} \tag{13.109}$$

wobei die Summation über die ganzzahligen μ-Werte läuft, für die keines der Argumente der vier Fakultäten im Nenner negativ wird, denn es ist ja

$$\frac{1}{(-n)!} = \frac{1}{\Gamma(-n+1)} = 0 \quad \text{für} \quad n = 1, 2, 3 \ldots \tag{13.110}$$

Das ergibt die Summationsgrenzen

$$\mu_{\min} = \mathrm{Max}(0, m'-m) \;, \quad \mu_{\max} = \mathrm{Min}(j+m', j-m) \;. \tag{13.111}$$

Wir entnehmen aus (13.109) vor allem einige *Symmetrieeigenschaften der d^j bzw. D^j*. (13.109) ist manifest reell; da d^j zugleich unitär ist, ist es eine *reelle orthogonale Matrix*, d.h.

$$d^j_{m'm}(\beta) = \left(d^{j^{-1}}(\beta)\right)_{mm'} = d^j_{mm'}(-\beta) \;. \tag{13.112}$$

Kombiniert man das mit der Invarianz von (13.109) unter der Substitution $(m', m) \to (-m, -m')$ und seinem Verhalten unter $\beta \to -\beta$, so findet man

$$d^j_{m'm}(\beta) = \begin{cases} (-)^{m'-m}\, d^j_{mm'}(\beta) \,, \\ (-)^{m'-m}\, d^j_{-m',-m}(\beta) \,. \end{cases} \tag{13.113}$$

Aus der letzten Relation folgt für die D-Matrix

$$D^{j\,*}_{m'm}(R) = (-)^{m'-m}\; D^j_{-m',-m}(R) \;. \tag{13.114}$$

Als Matrix eines unitären Operators in einer Orthonormalbasis ist D^j eine unitäre Matrix,

$$D^{j\,\dagger}(\alpha,\beta,\gamma) = D^{j^{-1}}(\alpha,\beta,\gamma) = D^j(-\gamma,-\beta,-\alpha) \,, \tag{13.115}$$

woraus die *Unitaritätsrelationen*

$$\sum_m D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\, D^{j\,*}_{m''m}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{m'm''} \qquad \forall\,(\alpha,\beta,\gamma) \tag{13.116a}$$

$$\sum_m D^{j\,*}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)\, D^j_{mm''}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{m'm''} \qquad \forall\,(\alpha,\beta,\gamma) \tag{13.116b}$$

folgen. Schließlich haben wir als Verallgemeinerung von (13.107)

$$D^j(2\pi,0,0) = D^j(0,0,2\pi) = (-)^{2j} \cdot \mathbf{1} \,, \tag{13.117}$$

was nochmals darauf hinweist, daß die Darstellung $\mathcal{D}^j$ *als Darstellung von* $SU(2)$ *für halbzahlige* j *sogar „treu", d.h. ein isomorphes Bild der* $SU(2)$, *für ganzzahlige* $j = l$ *dagegen nur ein homomorphes , aber nicht umkehrbar eindeutiges Bild ist, weil die* $SU(2)$*-Elemente* $+\mathbf{1}$ *und* $-\mathbf{1}$ *beide auf* $+\mathbf{1}_{2l+1}$ *abgebildet werden* (die Matrix $-\mathbf{1}_{2l+1}$ in $2l+1$ Dimensionen kann nicht Darstellung eines $SU(2)$-Elementes sein, weil sie die Determinante $(-)^{2l+1} = -1$ hat!) und deshalb die gesamte Abbildung $SU(2) \to \mathcal{D}^{j=l}$ eine „Zwei-auf-eins"-Abbildung ist, bei der Paare $(-\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}, +\mathcal{D}^{\frac{1}{2}})$ in $SU(2)$ dasselbe Bild $\mathcal{D}^l$ haben.

Mit den Matrizen (13.101) hat man nichts weniger als die *sämtlichen unitär-irreduziblen Matrixdarstellungen der quantenmechanischen Drehgruppe* in der Hand. Man kann nun nach der Formel

$$\boxed{U(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle = \sum_{m'=-j}^{+j} |j,m'\rangle\, D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)} \tag{13.118}$$

das *Drehverhalten beliebiger Drehimpulseigenzustände* und (nach Entwicklung in solche Zustände) gemäß (12.17) auch das Drehverhalten beliebiger Zustände berechnen unabhängig davon, wie die konkrete Realisierung des Drehimpulses beim jeweiligen System (Einzel-, Gesamt-, Relativbahndrehimpulse, Einzel- oder Gesamtspin, oder Vektorsummen dieser Größen) aussieht. Ein Beispiel wurde in (13.79a/b) bereits betrachtet, ein anderes wichtiges Beispiel ist die *Transformation der Kugelfunktionen*, d.h. Relation (13.118) für den Bahndrehimpuls eines Einzelteilchens:

$$\langle \hat{r}(\vartheta,\varphi)|\, U(\alpha,\beta,\gamma)\,|l,m\rangle = \sum_{m'=-l}^{+l} \langle \hat{r}(\vartheta,\varphi)|l,m'\rangle\, D^l_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\,.$$

Zusammen mit (13.45b) gibt dies

$$Y_{lm}(R^{-1}\hat{r}) = \sum_{m'=-l}^{+l} D^l_{m'm}(R)\, Y_{lm'}(\hat{r})\,. \tag{13.119}$$

Wählt man speziell $\hat{r} = \hat{e}_3$ und verwendet (3.61), so wird

$$D^l_{0m}(R) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_{lm}(R^{-1}\hat{e}_3) \tag{13.120a}$$

Ersetzt man hier R durch R^{-1} und benutzt

$$R(\alpha,\beta,\gamma)\,\hat{e}_3 = \hat{r}(\vartheta=\beta,\varphi=\alpha) \qquad \text{(unabhängig von } \gamma) \tag{13.121}$$

sowie (13.115), so ergibt sich

$$D^{l\,*}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_{lm}(\beta,\alpha) \qquad \text{(unabhängig von } \gamma)\,, \tag{13.120b}$$

d.h. die *Kugelfunktionen sind Spezialfälle der Drehmatrizen*. Weitere Spezialisierung auf $m = 0$ gibt mit (3.56)

$$d^l_{00}(\beta) = P_l(\cos\beta)\,. \tag{13.122}$$

Verwendet man schließlich (13.120b) in der auf $m = 0$ spezialisierten Formel (13.119), so ergibt sich mit (3.56) eine erneuter und sehr einfacher Beweis des Additionstheorems (3.71) der Kugelfunktionen.

Eine letzte wichtige Eigenschaft der D^j betrifft das *Verhalten bei Summation (Integration) über alle Drehungen bzw. $SU(2)$-Elemente*. Wenn man einen reinen Zustand $|\psi\rangle$ „über alle Orientierungen mittelt", d.h. die Zustände $U(R)\,|\psi\rangle$ für alle $R \in SU(2)$ mit gleichem Gewicht überlagert, so erwartet man anschaulich, daß nur der drehinvariante, d.h. der $j = 0$-Anteil von $|\psi\rangle$ überlebt, als Operatorgleichung also

$$\int_{SU(2)} dR\, U(R) = \Pi_0 \,, \tag{13.123}$$

wo Π_0 der Projektor auf den Unterraum von $\mathcal{H}$ zu $j = 0$ ist. Tatsächlich ist nach (13.101b)

$$\int_0^{4\pi} \frac{d\alpha}{4\pi} \int_0^{4\pi} \frac{d\gamma}{4\pi}\, D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{m'0}\, \delta_{m0}\, d^j_{00}(\beta) \,, \tag{13.124}$$

wobei die auf $0 \ldots 4\pi$ erweiterten Integrationsbereiche gemäß (13.108) nun wesentlich werden – bei halbzahligem m' und m gäbe die obere Integrationsgrenze 2π *nicht* die Kroneckersymbole in (13.124)! Beachtet man nun (13.122) und die Orthogonalität (3.58) der Legendre-Polynome, so ist weiter

$$\int_0^{\pi} d\beta\, \sin\beta\, d^j_{00}(\beta) = 2\, \delta_{j0} \,. \tag{13.125}$$

Präzisieren wir also die in (13.123) verwendete *Integration über den Parameterraum von $SU(2)$* durch

$$\int_{SU(2)} dR \ldots = \frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^{4\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta\, \sin\beta \int_0^{4\pi} d\gamma \ldots \,, \tag{13.126}$$

so erhalten wir die Beziehung

$$\int_{SU(2)} dR\, D^j_{m'm}(R) = \delta_{m'0}\, \delta_{m0}\, \delta_{j0} \,, \tag{13.127}$$

und das ist genau die $|jm\rangle$-Darstellung von (13.123). Damit ist auch plausibel gemacht, daß das durch (13.126) definierte Integrationsmaß tatsächlich alle $SU(2)$-Elemente gleich stark gewichtet und damit ein sog. *invariantes oder Haarsches Maß auf dem Gruppenraum ist*.

Kapitel 14

Quantenmechanische Drehimpulsaddition

14.1 Reduktion des Produktraumes $\mathcal{H}_{2j_1+1} \otimes \mathcal{H}_{2j_2+1}$

Eine für die Atom-, Kern- und Teilchenspektroskopie wichtige, nichttriviale Anwendung der Transformationstheorie von Kap. 8 bildet folgende Aufgabe. Das quantenmechanische System zerfalle in zwei Teilsysteme mit unabhängigen Drehimpulsoperatoren

$$\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)} \quad \text{mit} \quad [J_k^{(1)}, J_l^{(2)}] = 0 \quad \forall\,(k,l)\,. \tag{14.1}$$

(Dies können Drehimpulse verschiedener Teilchengruppen, aber z.B. auch Bahndrehimpuls und Spin desselben Teilchens sein.) Im Hilbertraum zu diesen Drehimpulsfreiheitsgraden bildet das Tensorprodukt

$$\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)} = \mathcal{H}_{2j_1+1} \otimes \mathcal{H}_{2j_2+1} \tag{14.2}$$

der Eigenräume von $\vec{J}^{(1)^2}$ und $\vec{J}^{(2)^2}$ zu den Eigenwerten $\hbar^2 j_1(j_1+1)$ bzw. $\hbar^2 j_2(j_2+1)$ einen $(2j_1+1)(2j_2+1)$-dimensionalen Teilraum; eine Orthonormalbasis dieses Teilraums ist durch die Produktzustände

$$|j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle = |j_1\, m_1\rangle \cdot |j_2\, m_2\rangle \tag{14.3}$$

gegeben. Diese Zustände sind Eigenzustände des Observablensatzes

$$\vec{J}^{(1)^2}, J_z^{(1)}, \vec{J}^{(2)^2}, J_z^{(2)} \tag{14.4}$$

mit den Eigenwerten

$$\hbar^2 j_1(j_1+1),\ \hbar m_1,\ \hbar^2 j_2(j_2+1),\ \hbar m_2\,. \tag{14.5}$$

Da sie sich bei Drehungen gemäß der *„Produktdarstellung"* $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ mit den Matrizen

$$\langle j_1\, m_1'\, j_2\, m_2' | U(R) | j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle = D^{j_1}_{m_1' m_1}(R) \cdot D^{j_2}_{m_2' m_2}(R) \tag{14.6}$$

linear untereinander transformieren, ist der Raum $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ ein Darstellungsraum der quantenmechanischen Drehgruppe. Nun erfüllen, wie man unmittelbar einsieht, mit $J_k^{(1)}$ und $J_k^{(2)}$ auch die Komponenten des *Gesamtdrehimpulses*

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)} \tag{14.7}$$

die Vertauschungsrelationen (13.31); es müssen sich deshalb in $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ auch Eigenvektoren zum Gesamtdrehimpuls, genauer zu $\vec{J}^2$ und $J_3 = J_z$, auffinden lassen. Sie können sicher zugleich als Eigenvektoren von $\vec{J}^{(1)^2}$ und $\vec{J}^{(2)^2}$ – die mit allen sechs beteiligten Drehimpulskomponenten vertauschen –, aber nicht mehr als Eigenvektoren von $J_z^{(1)}$ oder $J_z^{(2)}$ gewählt werden, denn es ist z.B.

$$[\vec{J}^2, J_z^{(1)}] = \underbrace{[\vec{J}^{(1)^2} + \vec{J}^{(2)^2}, J_z^{(1)}]}_{=0} + 2\,\underbrace{[\vec{J}^{(1)} \cdot \vec{J}^{(2)}, J_z^{(1)}]}_{\neq 0} \neq 0\,. \tag{14.8}$$

Wir fragen deshalb nach gemeinsamen Eigenzuständen des vertauschbaren Satzes

$$\vec{J}^{(1)^2}, \vec{J}^{(2)^2}, \vec{J}^2, J_z \tag{14.9}$$

mit den Eigenwerten

$$\hbar^2 j_1(j_1+1),\ \hbar^2 j_2(j_2+1),\ \hbar^2 j(j+1),\ \hbar m\,; \tag{14.10}$$

solche Zustände werden wir mit

$$|j_1\, j_2\, j\, m\rangle \qquad (m = -j, \ldots, +j) \tag{14.11}$$

bezeichnen. Dies ist ein Transformationsproblem der in Kap. 8 behandelten Art, mit der Besonderheit, daß die beiden Operatorensätze (14.4) und (14.9) zwei Operatoren gemeinsam haben, nämlich $\vec{J}^{(1)^2}$ und $\vec{J}^{(2)^2}$. Als Folge davon sind die Transformationskoeffizienten

$$\langle j_1'\, m_1'\, j_2'\, m_2' \,|\, j_1\, j_2\, j\, m\rangle \tag{14.12}$$

in j_1 und j_2 diagonal, d.h. proportional zu $\delta_{j_1' j_1}\delta_{j_2' j_2}$. Die Konstruktion der Zustände (14.11), die als *quantenmechanische Drehimpulskopplung oder Drehimpulsaddition* bezeichnet wird, führt also nicht aus dem Raum (14.2) heraus. Da in diesem Raum die Zustände (14.3) eine Orthonormalbasis bilden,

$$\sum_{m_1\, m_2} |j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2| \;=\; \mathbf{1}_{j_1 j_2}\,, \tag{14.13}$$

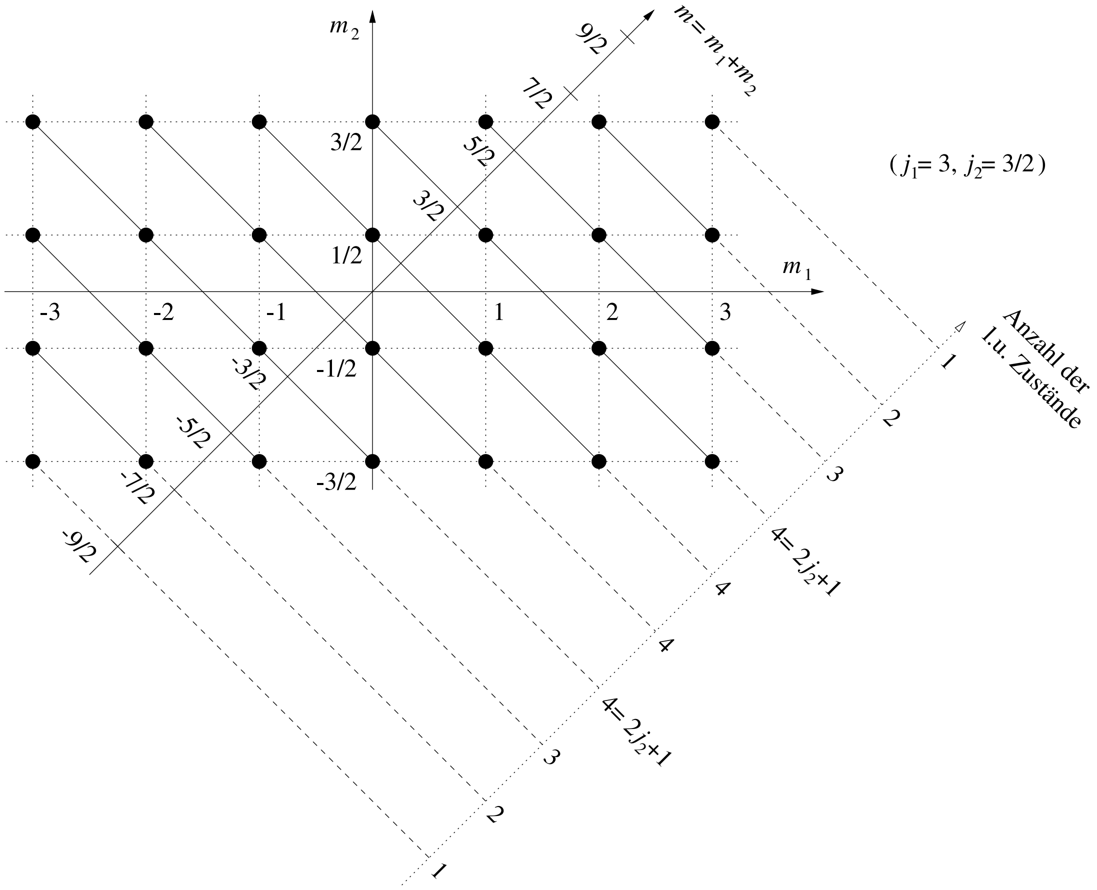
lassen sich die Zustände (14.11) jedenfalls nach dieser Basis entwickeln; die Transformationskoeffizienten (14.12) mit $j_1' = j_1$ und $j_2' = j_2$ werden kurz $\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, m\rangle$ geschrieben und als *Vektoradditions- oder Clebsch-Gordan-Koeffizienten* bezeichnet:

$$|j_1\, j_2\, j\, m\rangle \;=\; \sum_{m_1\, m_2} |j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, m\rangle\,. \tag{14.14}$$

Der erste Schritt zur Konstruktion besteht in der Beobachtung, daß wegen $J_z = J_z^{(1)} + J_z^{(2)}$ die Produktzustände (14.3) bereits J_3-Eigenzustände zu den Eigenwerten $m\hbar$ mit

$$m = m_1 + m_2 \tag{14.15}$$

sind. In $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ ist also der größte vorkommende m-Wert $m = j_1 + j_2$, der kleinste $-(j_1 + j_2)$. Zählt man nun, wie in der Skizze veranschaulicht, ab, wieviele verschiedene Paare (m_1, m_2) gemäß (14.15) ein gegebenes m in diesem Bereich erzeugen – d.h. wieviele linear unabhängige Zustände zu diesem m-Wert in $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ vorhanden sind –, so ergeben sich die in der Skizze (o.B.d.A. für $j_1 \geq j_2$) demonstrierten Multiplizitäten, die von 1 bei $m = \pm(j_1 + j_2)$ in Schritten von 1 anwachsen, wenn m in Schritten von 1 verkleinert wird, bis bei $m = \pm(j_1 - j_2) = \pm(j_1 + j_2 - 2j_2)$ – oder im Falle $j_2 \geq j_1$ entsprechend bei $m = \pm(j_1 + j_2 - 2j_1) = \pm(j_2 - j_1)$, allgemein also bei $m = \pm|j_1 - j_2|$ – die Multiplizität konstant gleich $2j_< + 1$ wird mit $j_< = \mathrm{Min}(j_1, j_2)$.



Zur Ausreduktion der Produktdarstellung $3 \otimes \frac{3}{2}$

Nun lassen sich aber aus einem Vektor $|jm\rangle$ mittels der Stufenoperatoren $J_\pm$ sofort in $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ die sämtlichen Basisvektoren eines $(2j+1)$-dimensionalen Raumes $\mathcal{H}_{2j+1}$ erzeugen. Der *größte in* $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ *vorkommende* j*-Wert ist also* $j_1 + j_2$, sonst müßten betragsmäßig größere m-Werte als $m = \pm(j_1 + j_2)$ vorhanden sein. Er kann nur einmal vorkommen, da nur je ein Zustand mit $m = \pm(j_1 + j_2)$ vorliegt. Wir denken uns den zugehörigen Teilraum $\mathcal{H}_{2(j_1+j_2)+1}$ abgespalten, wodurch die im dazu orthogonalen Teilraum verbleibenden m-Multiplizitäten sich gegenüber der obigen Skizze alle um 1 verringern. Es bleibt dann also nur je 1 linear unabhängiger Zustand mit $m = \pm(j_1 + j_2 - 1)$, so daß wir wieder genau einen

Teilraum $\mathcal{H}_{2(j_1+j_2)-1}$ abspalten können und im Restraum die m-Multiplizitäten um 2 verringert finden. So fortfahrend, finden wir schließlich nach Abspalten von $\mathcal{H}_{2|j_1-j_2|+1} = \mathcal{H}_{2(j_1+j_2-2j_<)+1}$ die ursprünglichen Multiplizitäten des Restraumes, die ja alle gleich $2j_< + 1$ waren, um $2j_< + 1$, d.h. auf Null verringert und damit den Raum $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ vollständig ausgeschöpft, wie auch die Dimensionskontrolle

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \tag{14.16}$$

bestätigt. Das Resultat ist also: *In $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ kommt jeder der j-Werte*

$$j = j_1 + j_2\,,\; j_1 + j_2 - 1\,,\; j_1 + j_2 - 2\,,\; \ldots\,,\; |j_1 - j_2| \tag{14.17}$$

genau einmal vor und $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ läßt sich dementsprechend als direkte Summe von orthogonalen Teilräumen

$$\mathcal{H}_{2j_1+1} \otimes \mathcal{H}_{2j_2+1} \;=\; \mathcal{H}_{2(j_1+j_2)+1} \oplus \ldots \oplus \mathcal{H}_{2|j_1-j_2|+1} \tag{14.18}$$

darstellen. Da letztere irreduzibel sind, ist damit die *vollständige Ausreduktion des reduzibel sich transformierenden Produktraumes $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$ in irreduzible Teilräume* geleistet. Da die Gesamtheit der Basen (14.11) dieser Teilräume nach (14.16) ebenso viele linear unabhängige Zustände umfaßt wie die Produktbasis (14.3), ist sie selbst eine Orthonormalbasis in $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$, d.h. als Gegenstück zu (14.13) gilt

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{+j} |j_1\, j_2\, j\, m\rangle\langle j_1\, j_2\, j\, m| = \mathbf{1}_{j_1 j_2}\,. \tag{14.19}$$

Damit können wir die Entwicklung (14.14) umkehren,

$$|j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle \;=\; \sum_{j\,m} |j_1\, j_2\, j\, m\rangle\langle j\, m\,|\, j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle\,, \tag{14.20}$$

und überdies schließen, daß *die von den Clebsch-Gordan-Koeffizienten gebildete $(2j_1+1)(2j_2+1)$-dimensionale Matrix – als Transformationsmatrix zwischen zwei Orthonormalbasen des Raumes* (14.18) *– unitär ist*, was sich in den Unitaritätsrelationen

$$\sum_{j\,m} \langle j_1\, m_1'\, j_2\, m_2'\,|\, j\, m\rangle\langle j\, m\,|\, j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle \;=\; \delta_{m_1' m_1}\, \delta_{m_2' m_2} \tag{14.21a}$$

$$\sum_{m_1\, m_2} \langle j'\, m'\,|\, j_1\, m_1\, j_2\, m_2\rangle\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2\,|\, j\, m\rangle \;=\; \delta_{j' j}\, \delta_{m' m} \tag{14.21b}$$

ausdrückt.

14.2 Berechnung und Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Wir wissen bereits, daß der Koeffizient $\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, m\rangle$ nur dann von Null verschieden sein kann, wenn er die *„Auswahlregeln der Drehimpulskopplung"*

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad \text{und} \quad m = m_1 + m_2 \tag{14.22}$$

erfüllt. Für die tatsächliche Berechnung der Koeffizienten unter diesen Bedingungen kann man von den *Rekursionsformeln* ausgehen, die durch Anwendung der Stufenoperatoren

$$J_\pm = J_\pm^{(1)} + J_\pm^{(2)} = J_1 \pm i J_2 \tag{14.23}$$

auf Gl. (14.14) und Skalarproduktbildung mit $\langle\, j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|$ entstehen; mit den Gln. (13.41) erhält man

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\, \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, m \pm 1\rangle \\ &\quad = \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)}\, \langle j_1\, m_1 \mp 1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, m\rangle \\ &\qquad + \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)}\, \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \mp 1 \,|\, j\, m\rangle\,. \end{aligned} \tag{14.24}$$

Betrachten wir die erste dieser Relationen für $m = +j$, so verschwindet die linke Seite, und man erhält mit der zweiten Auswahlregel von (14.22) die Beziehung

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j_1 + m_1)(j_1 - m_1 + 1)}\, \langle j_1\, m_1 - 1\, j_2\, j - m_1 + 1 \,|\, j\, +j\rangle \\ &\quad + \sqrt{(j_2 + j - m_1 + 1)(j_2 - j + m_1)}\, \langle j_1\, m_1\, j_2\, j - m_1 \,|\, j\, +j\rangle \;=\; 0\,. \end{aligned} \tag{14.25}$$

Damit lassen sich offenbar alle Koeffizienten mit $m = +j$ als Vielfache von

$$\langle\, j_1\, +j_1\, j_2\, j - j_1 \,|\, j\, +j\rangle \tag{14.26}$$

ausdrücken; nimmt man die Orthonormierungsrelation (14.21b) für $j' = j$ und $m' = m = +j$ in der Form

$$\sum_{m_1 m_2} \delta_{m_1+m_2,j}\, |\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j\, +j\rangle|^2 = 1 \tag{14.27}$$

hinzu und legt die noch offenbleibende Phase durch die *Konvention*

$$\text{Koeffizient (14.26)} \;=\; \text{reell und } > 0 \tag{14.28}$$

fest, so ist auch dieser Koeffizient bestimmt. Aus den so berechneten $(m = +j)$-Koeffizienten erzeugt dann die zweite der Relationen (14.24) alle Koeffizienten mit $m < +j$. Wegen (14.28) und der Realität aller Wurzelfaktoren in (14.25/14.24) sind die sich so ergebenden *Clebsch-Gordan-Koeffizienten alle reell*. Die Resultate solcher Berechnungen für alle wichtigen $(j_1\, j_2\, j)$-Kombinationen sind in umfangreichen Tafelwerken[1] niedergelegt, so daß sich die CG-Koeffizienten in der Praxis ebenso

[1]Z.B. M. Rotenberg *et al*, "The 3-j and 6-j Symbols", Cambridge, Mass. (USA) 1959, Massachusetts Inst. of Technology Press

wie die mathematischen Standardfunktionen durch Nachschlagen handhaben lassen. Wir geben hier als Beispiel lediglich den wichtigen Fall $j_2 = \frac{1}{2}$ in Tabellenform an:

$\underline{\langle j_1\, m - m_2\, \tfrac{1}{2}\, m_2 \,|\, j\, m\rangle :}$

	$m_2 = +\frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j = j_1 + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$
$j = j_1 - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$

(14.29)

Auch die zahlreichen *Symmetrieeigenschaften* der CG-Koeffizienten, insbesondere gegenüber Permutationen der drei beteiligten Drehimpulse, kann man den Tafelwerken entnehmen. Wir diskutieren zwei Anwendungsbeispiele:

(a) **Spin-Bahn-Kopplung**
Der Hamiltonoperator eines Elektrons im kugelsymmetrischen Potential $V(r)$, das überdies eine Spin-Bahn-Wechselwirkung (13.89) spürt,

$$H = \frac{1}{2m}\vec{P}^2 + V(r) + V_{LS}(r)(\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\,)\,, \tag{14.30}$$

ist z.B. ein gutes Modell für das Leuchtelektron der Alkali-Atome. Wegen des Auftretens von $\sigma_1 l_1 + \sigma_2 l_2$ im LS-Term ist er *weder mit* $\vec{l}$ *allein noch mit* $\vec{\sigma}$ *allein vertauschbar, wohl aber mit* $\vec{j} = \vec{l} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, wie man anhand von

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l} = \left(\vec{l} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}\right)^2 - \vec{l}^{\,2} - \left(\frac{1}{2}\vec{\sigma}\right)^2 = \vec{j}^{\,2} - \vec{l}^{\,2} - \frac{3}{4}\cdot\mathbf{1} \tag{14.31}$$

sofort sieht. Die Eigenzustände von H werden sich daher hinsichtlich der Winkel- und Spinfreiheitsgrade nicht mehr wie im Falle $V_{LS} = 0$ als Produktzustände

$$|\, l, m_l, m_s\rangle = |l, m_l\rangle \cdot |\frac{1}{2}, m_s\rangle \tag{14.32}$$

ansetzen lassen, wohl aber als zu scharfen Gesamtdrehimpuls-Quantenzahlen „gekoppelte“ Zustände

$$|l, \frac{1}{2}, j, m\rangle = \sum_{m_l=-l}^{+l}\ \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} |l, m_l, m_s\rangle\ \langle l\, m_l, \frac{1}{2}\, m_s | j\, m\rangle\ . \tag{14.33}$$

In der Darstellung als zweikomponentige Ortsraum-Wellenfunktionen (13.55), also als

$$\langle \hat{r}(\vartheta,\varphi)| l\, \frac{1}{2}\, j\, m\rangle = \sum_{m_l, m_s} \langle l\, m_l, \frac{1}{2}\, m_s | j\, m\rangle\ Y_{l,m_l}(\hat{r})\, \chi_{\frac{1}{2},m_s} \equiv \mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r})\ , \tag{14.34}$$

werden sie als *„Spinorkugelfunktionen“* bezeichnet. Setzt man die CG-Koeffizienten von (14.29) mit $j_1 = l$ (ganzzahlig) ein, so hat man die expliziten Darstellungen

$$\mathcal{Y}_{l,l+\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+\frac{1}{2}+m}\, Y_{l,m_l=m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+\frac{1}{2}-m}\, Y_{l,m_l=m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \tag{14.35a}$$

$$\mathcal{Y}_{l,l-\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l+\frac{1}{2}-m}\, Y_{l,m_l=m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+\frac{1}{2}+m}\, Y_{l,m_l=m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \tag{14.35b}$$

Für die Eigenzustände von (14.30) zu Eigenwerten E wird man in dieser Darstellung die Spinoren

$$\langle \vec{x}|\psi\rangle = \frac{1}{r} R_{E,l,j}(r)\, \mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r}) \tag{14.36}$$

ansetzen; wegen (14.31) reduziert sich das Eigenwertproblem dann auf die Radialgleichungen

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right. \\ &\qquad \left. - \frac{2m}{\hbar^2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] V_{LS}(r) \right\} R_{E,l,j}(r) = 0\,. \end{aligned} \tag{14.37}$$

Das vom Spin-Bahn-Term verursachte Zusatzpotential hat wegen

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} +l & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{14.38}$$

für die beiden Gesamtdrehimpulse $j = l \pm \frac{1}{2}$ zu gegebenem l verschiedene Vorzeichen und bewirkt dadurch eine *Aufspaltung der für* $V_{LS} = 0$ $2(2l+1)$*-fach entarteten Energieeigenwerte in je zwei Niveaus.*

(b) **Zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen**
Die Zustände etwa der beiden Elektronen im He-Atom oder der beiden Nukleonen im Deuteriumkern lassen sich hinsichtlich der Spinfreiheitsgrade durch die Produktbasis

$$|\frac{1}{2}, m_1\rangle_1 \cdot |\frac{1}{2}, m_2\rangle_2 \quad , \quad m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2} \tag{14.39}$$

darstellen, wobei die Indizes sich auf die beiden Teilchen beziehen. Will man nach Gesamtspin-Quantenzahlen klassifizieren, so wird man nach (14.14/14.17) die Zustände

$$|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}, S, M_s\rangle = \sum_{m_1,m_2} |m_1\rangle_1 \cdot |m_2\rangle_2 \,\langle \frac{1}{2}\, m_1\, \frac{1}{2}\, m_2 | S\, M_s\rangle \tag{14.40}$$

$$\text{mit } S = 0 \text{ oder } S = 1$$

konstruieren. Entnimmt man die CG-Koeffizienten aus (14.29) mit $j_1 = \frac{1}{2}$, so findet man für $S = 1$ die *„Triplett-Zustände“*

$$|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}, 1, M_s\rangle = \begin{cases} |+\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |+\frac{1}{2}\rangle_2 & (M_s = +1) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |-\frac{1}{2}\rangle_2 + |-\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |+\frac{1}{2}\rangle_2\right] & (M_s = 0) \\ |-\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |-\frac{1}{2}\rangle_2 & (M_s = -1) \end{cases} \tag{14.41}$$

und für $S = 0$ (also $M_s = 0$) den *„Singulett-Zustand“*

$$|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |-\frac{1}{2}\rangle_2 - |-\frac{1}{2}\rangle_1 \cdot |+\frac{1}{2}\rangle_2\right] . \tag{14.42}$$

Wegen der Operatorbeziehung

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)} &= \frac{2}{\hbar^2}\left[\vec{S}^2 - \vec{S}^{(1)^2} - \vec{S}^{(2)^2}\right] \\ &= 2\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right] \cdot \mathbf{1}_{\text{Spin}} = \left\{ \begin{array}{ll} +1 & \text{in} \quad \mathcal{H}_{S=1} \\ -3 & \text{in} \quad \mathcal{H}_{S=0} \end{array} \right\} \cdot \mathbf{1}_{\text{Spin}} \end{aligned} \tag{14.43}$$

sieht man unmittelbar, daß im Spinraum des Zweiteilchensystems die Operatoren

$$\Pi_1 = \frac{1}{4}\left(3 \cdot \mathbf{1}_{\text{Spin}} + \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)}\right) \quad , \quad \Pi_0 = \frac{1}{4}\left(\mathbf{1}_{\text{Spin}} - \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)}\right) \tag{14.44}$$

orthogonale Projektoren auf die Teilräume zu $S = 1$ bzw. $S = 0$ sind. Bemerkenswert an (14.41/14.42) ist, daß die Ausreduktion nach irreduziblen Spin-Teilräumen in diesem einfachen Fall auch zugleich eine *Klassifikation der Zustände nach ihrer Symmetrie gegenüber Vertauschung* der beiden Teilchen bewirkt: Offensichtlich sind

$$\begin{array}{l} \text{die } (S = 1)\text{-Zustände symmetrisch ,} \\ \text{der } (S = 0)\text{-Zustand antisymmetrisch} \end{array} \tag{14.45}$$

bei Vertauschung der Spinvariablen $m_1 \leftrightarrow m_2$.

14.3 Ausreduktion der Produktdarstellung $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$

Die Darstellung endlicher Drehungen in den irreduziblen Teilräumen $\mathcal{H}_{2j+1}$ von (14.18) ist unabhängig von j_1, j_2 durch

$$\langle j_1\, j_2\, j'\, m'|U(R)|j_1\, j_2\, j\, m\rangle = \delta_{j'j} D^j_{m'm}(R) \tag{14.46}$$

gegeben. Drückt man die „gekoppelten“ Zustände $|j_1\, j_2\, j\, m\rangle$ gemäß (14.14) durch „ungekoppelte“ Produktzustände aus, auf denen dieselbe Drehung R durch das „Kroneckerprodukt“ (14.6) dargestellt wird, so ergibt sich

$$\begin{aligned} D^j_{m'm}(R) &= \sum_{m'_1 m'_2} \sum_{m_1 m_2} D^{j_1}_{m'_1 m_1}(R) \cdot D^{j_2}_{m'_2 m_2}(R) \\ &\quad \times \langle j_1\, m'_1\, j_2\, m'_2 | j\, m' \rangle \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | j\, m \rangle \; . \end{aligned} \tag{14.47}$$

Diese Formel zeigt explizit die *Rolle der CG-Koeffizienten als Matrixelemente derjenigen unitären Basistransformation* $\mathcal{D} \to C\mathcal{D}C^\dagger$ *in* $\mathcal{H}_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$, *welche die Produktdarstellung* $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ *von* (14.6) *auf die Blockdiagonalform*

$$\begin{pmatrix} \boxed{D^{j_1+j_2}} & & & 0 \\ & \boxed{D^{j_1+j_2-1}} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \boxed{D^{|j_1-j_2|}} \end{pmatrix} \tag{14.48}$$

bringt. Da die linke Seite von (14.47) nicht von j_1, j_2 abhängt, sind auf der rechten Seite j_1 und j_2 mit den durch (14.17) gegebenen Einschränkungen frei wählbar. Insbesondere sieht man, daß sich durch wiederholte Anwendung von (14.47) die Drehmatrizen D^j im Prinzip alle aus der durch (13.77) bzw. (13.105) gegebenen Fundamentaldarstellung $D^{\frac{1}{2}}$ aufbauen lassen. Durch Umkehrung von (14.47) mittels der Unitaritätsrelation (14.21a) der CG-Koeffizienten entsteht die sog. *Clebsch-Gordan-Reihe*

$$D^{j_1}_{m'_1 m_1}(R) \cdot D^{j_2}_{m'_2 m_2}(R) = \sum_{j\, m'\, m} D^j_{m'm}(R)\, \langle j_1\, m'_1\, j_2\, m'_2 | j\, m' \rangle \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | j\, m \rangle \; , \tag{14.49}$$

die formelmäßige Ausreduktion des Kroneckerproduktes (14.6) in irreduzible Bestandteile. Die Gln. (14.18) und (14.49) werden oft durch die *symbolische Dimensionsbilanz*

$$(2j_1 + 1) \otimes (2j_2 + 1) = (2(j_1 + j_2) + 1) \oplus \ldots \oplus (2|j_1 - j_2| + 1) \tag{14.50}$$

zusammengefaßt.

Von Gl. (14.49) ist einmal der Spezialfall $j_1 = l_1, j_2 = l_2$ (ganzzahlig) und $m_1 = m_2 = 0$ interessant; er führt wegen (13.120b) und (14.15) auf eine *Entwicklung des Produkts zweier Kugelfunktionen desselben Arguments* $\hat{r} = \hat{r}(\vartheta, \varphi)$ *nach Kugelfunktionen* dieses Arguments:

$$Y_{l_1 m_1}(\hat{r})\, Y_{l_2 m_2}(\hat{r}) = \sum_{lm} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2l + 1)}}\, \langle l_1\, 0\, l_2\, 0 | l\, 0 \rangle \langle l_1\, m_1\, l_2\, m_2 | lm \rangle\, Y_{lm}(\hat{r}). \tag{14.51}$$

Zum anderen liefert die Gleichung bei der invarianten Integration (13.126) über den Parameterraum der $SU(2)$ wegen (13.127) und

$$\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | 0\, 0 \rangle = \delta_{j_2 j_1}\, \delta_{m_2,-m_1}\, \frac{(-)^{j_1-m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \tag{14.52}$$

eine *Orthonormalitätseigenschaft der Drehmatrizen bezüglich Integration über* $SU(2)$ von der Form

$$\int_{SU(2)} dR\, D^{j_1}_{m_1' m_1}(R) \cdot D^{j_2}_{m_2' m_2}(R) = \frac{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1' m_2'} \delta_{m_1 m_2}}{2j_1+1}\,. \tag{14.53}$$

Beide Arten von Formeln haben zahlreiche Anwendungen in der Atom-, Molekül- und Kernspektroskopie; z.B. lassen sich die in der Störungsrechnung häufig auftretenden Matrixelemente vom Typ

$$\langle l_2\, m_2\, | V(\vec{X}) |\, l_1\, m_1 \rangle\,,$$

wo das Potential $V(\vec{X})$ seinerseits durch „Multipolentwicklung“, d.h. als Entwicklung nach Kugelfunktionen gegeben ist, mittels Gl. (14.51) auf das Orthonormierungsintegral der Kugelfunktionen zurückführen.

Kapitel 15

Permutationssymmetrie bei identischen Teilchen

15.1 Quantenmechanische Formulierung der Ununterscheidbarkeit

Bei unserer bisherigen Diskussion von Mehrteilchensystemen in Abschnitt 4.5 hatten wir bereits betont, daß der dort vorgenommene Aufbau des Hilbertraumes als Tensorprodukt von Einteilchenräumen mit Produktbasis

$$|\xi\rangle = |\xi_{i_1}^{(1)}\rangle \cdot |\xi_{i_2}^{(2)}\rangle \cdot \ldots \cdot |\xi_{i_N}^{(N)}\rangle \tag{15.1}$$

(mit $\xi_{i_n}^{(n)}$ = vollständiger Quantenzahlensatz für Teilchen Nr. n) einer Modifikation bedarf, wenn es sich um ein System *identischer* Teilchen handelt, wie etwa die Z Elektronen in einem Atom oder die ca. 10^{23} Leitungselektronen in einem makroskopischen Metallstück. In der klassischen Mechanik hat die völlige Gleichheit aller physikalischen Attribute der Teilchen keine weitreichenden Konsequenzen, weil man einerseits die Teilchen stets (unter beliebig kleiner Störung ihrer sonstigen Eigenschaften) „markieren" kann und andererseits die markierten Teilchen scharf definierte Trajektorien durchlaufen und auf diesen beobachtend verfolgt werden können, so daß man im Prinzip doch *unterscheidbare Objekte* vor sich hat. In der Quantenmechanik läßt ein vollständiger Satz ξ verträglicher Quantenzahlen keine nichttrivialen Erweiterungen mehr zu, d.h. eine zusätzliche „Markierung" unter vernachlässigbarer Störung der übrigen Teilcheneigenschaften ist nicht möglich. Findet man daher bei einer späteren Messung desselben Satzes von Meßgrößen die Teilchen bei den Wertesätzen $\xi_{k_1}, \xi_{k_2}, \ldots, \xi_{k_N}$, so ist es schlechterdings unmöglich zu sagen, ob das beim Meßwertesatz ξ_{k_1} angetroffene Teilchen das bei der Präparation mit ξ_{i_1} oder ξ_{i_5} oder $\xi_{i_{19}}$ präparierte ist; eine „Numerierung" der Teilchen ist sinnlos. *In der Quantenmechanik sind identische Teilchen prinzipiell ununterscheidbar*. Das bedeutet, daß als Observable bei einem System identischer Teilchen *nur* Operatoren in Frage kommen, die *nicht nur selbstadjungiert, sondern auch in den Einteilchenvariablen völlig symmetrisch aufgebaut* sind – gäbe es auch nur eine Observable, die ein Teilchen oder eine Teilchengruppe auszeichnete, so wären eben deshalb diese Teilchen mit den übrigen nicht mehr identisch.

Für eine quantitative Formulierung gehen wir zunächst von einer Basis von Zuständen wie in (15.1) aus, wobei wir die oberen Indizes nun streichen können, da man bei identischen Teilchen zweckmäßig dieselbe Einteilchenbasis für alle Teilchen verwenden wird:

$$|\xi\rangle = |\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle = |\xi_{i_1}\rangle\cdot|\xi_{i_2}\rangle\cdot\ldots\cdot|\xi_{i_N}\rangle\,. \tag{15.2}$$

(Für Elektronen im Zentralfeld eines Atomkerns etwa bietet sich $\xi = (n,l,j,m)$ mit $n =$ Quantenzahl der Radialbewegung an.) Wir können dann zu jeder Permutation

$$P:\quad (1,2,3,\ldots,N)\to(P(1),P(2),P(3),\ldots,P(N)) \tag{15.3}$$

der Zahlen $1,\ldots,N$ einen *Permutationsoperator* $\mathbb{P}_P$ im Hilbertraum des N-Teilchen-Systems definieren durch

$$\mathbb{P}_P|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle = |\xi_{P(i_1)}\,\xi_{P(i_2)}\ldots\xi_{P(i_N)}\rangle\,. \tag{15.4}$$

Bekanntlich gibt es $N!$ derartige Permutationen von N Objekten, die bezüglich Nacheinanderausführung eine (nichtabelsche) Gruppe, die sog. *symmetrische Gruppe* S_N, bilden. Sie lassen sich alle als Produkte der $\frac{1}{2}N(N-1)$ Transpositionen T_{ij} darstellen, die je zwei der N Zahlen vertauschen; diese Darstellung ist zwar nicht eindeutig, hat aber bei gegebener Permutation P stets nur eine gerade oder eine ungerade Zahl von Faktoren, d.h. die sog. *Parität der Permutation*,

$$(-)^P = (-1)^{\text{Anzahl der Transpositionen in } P}\,, \tag{15.5}$$

nach der sich die Elemente von S_N in „gerade“ ($(-)^P = +1$) und „ungerade“ ($(-)^P = -1$) einteilen lassen, ist darstellungsunabhängig. Für die *Transpositionsoperatoren* $\mathbb{T}_{ij} = \mathbb{P}_{T_{ij}}$ gilt im allgemeinen

$$[\mathbb{T}_{ij},\mathbb{T}_{kl}]\neq 0\,, \tag{15.6}$$

außer wenn die Paare (i,j) und (k,l) kein gemeinsames Element haben.

Im von den Zuständen (15.4) für alle $P\in S_N$ aufgespannten $N!$-dimensionalen Raum sind die vollkommen symmetrische Kombination

$$|\xi\rangle_+ := |\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P\in S_N}\mathbb{P}_P|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle \tag{15.7}$$

und die antisymmetrische Kombination

$$|\xi\rangle_- := |\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\mathrm{P}\in S_N}(-)^P\,\mathbb{P}_P|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle \tag{15.8}$$

dadurch ausgezeichnet, daß sie die *einzigen gemeinsamen Eigenzustände aller Transpositionen und damit aller Permutationen von* S_N sind, und zwar ist offenbar

$$\mathbb{P}_P|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_+ = |\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_+\quad\forall\,P\in S_N\,, \tag{15.9a}$$

$$\mathbb{P}_P|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_- = (-)^P\cdot|\xi_{i_1}\,\xi_{i_2}\ldots\xi_{i_N}\rangle_-\quad\forall\,P\in S_N\,. \tag{15.9b}$$

Sie bilden damit in jenem $N!$-dimensionalen Raum die einzigen *eindimensionalen Darstellungsräume von* S_N. Die auf $|\xi\rangle_+$ stattfindende Darstellung ist die triviale, bei der alle $P \in S_N$ auf die Multiplikation mit 1 abgebildet werden; die auf $|\xi\rangle_-$ stattfindende bildet die geraden P auf $+1$, die ungeraden auf -1 ab und ist daher isomorph zur zyklischen Gruppe $\mathcal{Z}_2$. Die (für $N > 2$) übrigen $N! - 2$ Zustände lassen sich in *mehrdimensionale Darstellungsräume „gemischter Symmetrie"* einordnen, denn wegen (15.6) kann es kein vollständiges gemeinsames Eigenvektorensystem aller Permutationen geben. Die Situation ist analog zur Drehgruppe, wo der Zustand $|j = 0, m = 0\rangle$ der einzige gemeinsame Eigenzustand aller drei Drehimpulse mit Eigenwert 0 und daher aller Drehoperatoren mit Eigenwert 1 ist und die triviale Darstellung der Drehgruppe vermittelt.

Lassen wir die Ausgangsquantenzahlen $\xi_{i_1}, \ldots, \xi_{i_N}$ unabhängig voneinander alle möglichen Wertesätze durchlaufen, so spannen die Zustände (15.7) den „vollständig *symmetrischen Unterraum*" $\mathcal{H}_+$ und die Zustände (15.8) den „vollständig *antisymmetrischen Unterraum*" $\mathcal{H}_-$ von $\mathcal{H}$ auf; beide Räume zerfallen vollständig in eindimensionale orthogonale Darstellungsräume. Die Zustände gemischter Symmetrie ergeben (für $N > 2$) dagegen einen Unterraum $\mathcal{H}_M$, dessen genaue Struktur für uns nicht wesentlich ist, der jedoch nur höherdimensionale Darstellungsräume von S_N umfaßt.

Die Transpositionsoperatoren $\mathbb{T}_{ij}$ sind, wie unschwer nachzuprüfen, unitär und wegen

$$\mathbb{T}_{ij}^2 = \mathbf{1} \qquad \forall\,(i,j) \tag{15.10}$$

auch selbstadjungiert und haben nur die Eigenwerte ± 1. Da $\mathcal{H}_+$ und $\mathcal{H}_-$ Eigenräume aller $\mathbb{T}_{ij}$ zu den Eigenwerten $+1$ bzw. -1 sind, während $\mathcal{H}_M$ von Zuständen aufgespannt wird, für die mindestens zwei $\mathbb{T}$'s verschiedene Eigenwerte haben, sind die drei Räume zueinander orthogonal, und

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_- \oplus \mathcal{H}_M \tag{15.11}$$

ist eine vollständige Zerlegung in orthogonale Teilräume. Die Projektionsoperatoren

$$\mathbb{S} = \frac{1}{N!}\sum_{P\in S_N} \mathbb{P}_P \quad , \quad \mathbb{A} = \frac{1}{N!}\sum_{P\in S_N} (-)^P \mathbb{P}_P \,, \tag{15.12}$$

„Symmetrisierer" bzw. *„Antisymmetrisierer"* genannt, sind Projektoren auf $\mathcal{H}_+$ bzw. $\mathcal{H}_-$. Ihre Projektoreigenschaft ist leicht nachzurechnen: Mit P_2 durchläuft auch P_1P_2 bei festem $P_1 \in S_N$ die ganze Gruppe S_N, und somit gilt etwa für $\mathbb{A}$:

$$\begin{aligned} \mathbb{A}^2 &= \frac{1}{(N!)^2}\sum_{P_1}\sum_{P_2}(-)^{P_1}(-)^{P_2}\mathbb{P}_{P_1}\mathbb{P}_{P_2} = \frac{1}{(N!)^2}\sum_{P_1}\sum_{P_2}(-)^{P_1P_2}\mathbb{P}_{P_1P_2} \\ &= \frac{1}{(N!)^2}\sum_{P_1}\left\{\sum_{P}(-)^P\mathbb{P}_P\right\} = \frac{1}{N!}\sum_{P}(-)^P\mathbb{P}_P = \mathbb{A}\,. \end{aligned} \tag{15.13}$$

Die obige Überlegung bezüglich der möglichen Observablen läßt sich nun so formalisieren:

> Bei einem System identischer Teilchen können *nur solche selbstadjungierten Operatoren A Observable sein, welche zugleich mit allen Permutationen von S_N vertauschbar* sind:
> $$\mathbb{P}_P A = A \mathbb{P}_P \qquad \forall\, P \in S_N. \tag{15.14}$$

Dies ist die präzise Fassung des Prinzips der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen in der Quantenmechanik.

15.2 Bosonen- und Fermionensysteme; Pauli-Prinzip

Die Forderung (15.14) für *alle* Observablen hat deshalb weitreichende Konsequenzen, weil ja auch die Projektoren Π zu allen möglichen Systemeigenschaften und insbesondere die Projektoren

$$\Pi_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad \text{mit} \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

auf alle eindimensionalen Unterräume des Systemhilbertraumes im Prinzip Observable sind. Aus

$$\mathbb{P}_P \Pi_\psi = \Pi_\psi \mathbb{P}_P \qquad \forall\, P \in S_N\,,\ |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{15.15}$$

folgt aber durch Skalarproduktbildung mit $|\psi\rangle$

$$\mathbb{P}_P|\psi\rangle = \pi_{P,\psi}|\psi\rangle \quad , \quad \pi_{P,\psi} = \langle\psi|\mathbb{P}_P|\psi\rangle = \pm 1 \tag{15.16}$$

für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und alle $P \in S_N$, d.h. *jeder* mögliche Zustand muß gemeinsamer Eigenzustand *aller* Permutationsoperatoren und somit eindimensionaler Darstellungsraum von S_N sein. Solche eindimensionalen Darstellungsräume gibt es aber, wie wir sahen, nur in $\mathcal{H}_+$ und $\mathcal{H}_-$, nicht in $\mathcal{H}_M$. Überdies muß jeder Zustand $|\psi\rangle$ sogar ganz in $\mathcal{H}_+$ oder ganz in $\mathcal{H}_-$ liegen – hätte er Komponenten in beiden Räumen, so wäre er nicht mehr Eigenzustand der „ungeraden" $\mathbb{P}_P$. Will man am Superpositionsprinzip festhalten, so bleibt nur der Schluß, daß der *Hilbertraum eines Systems identischer Teilchen entweder der vollständig symmetrische Raum*

$$\mathcal{H}_+ = \mathbb{S}\mathcal{H}\mathbb{S} \tag{15.17}$$

oder der vollständig antisymmetrische Raum

$$\mathcal{H}_- = \mathbb{A}\mathcal{H}\mathbb{A} \tag{15.18}$$

sein muß. Wegen der Symmetrie (15.14) aller Observablen des Systems führt sowohl jede denkbare Zeitentwicklung – erzeugt durch den permutationssymmetrischen Hamiltonoperator – als auch jeder denkbare Präparations- oder Meßakt nie aus $\mathcal{H}_+$ oder $\mathcal{H}_-$ heraus.

Die Frage, welchen realen Systemen identischer Teilchen welcher Hilbertraum zukommt, ist im Rahmen der nichtrelativistischen Quantentheorie nur durch Rückgriff auf die Erfahrung zu beantworten. Empirisch gilt ohne Ausnahme der sogenannte *Spin-Statistik-Zusammenhang*:

> Der Hilbertraum eines Systems identischer Teilchen mit ganzzahligem Spin ($S = 0, 1, 2, \ldots$) ist der vollständig symmetrische Raum $\mathcal{H}_+$, derjenige eines Systems identischer Teilchen mit halbzahligem Spin ($S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$) der vollständig antisymmetrische Raum $\mathcal{H}_-$.

In der Statistischen Mechanik wird gezeigt, daß auf Grund dieser Symmetrieeigenschaften Systeme von Teilchen der ersteren Art (z.B. Lichtquanten, π- oder K-Mesonen oder auch das als Elementarteilchen aufgefaßte α-Teilchen) im thermodynamischen Gleichgewicht die sog. Bose-Einstein-Statistik, Systeme der letzteren Art (z.B. Elektronen, Nukleonen oder $^3\mathrm{He}$-Kerne) die sog. Fermi-Dirac-Statistik befolgen. Man nennt deshalb Teilchen mit ganzzahligem S *Bosonen*, Teilchen mit halbzahligem S *Fermionen*. Der Spin-Statistik-Zusammenhang hat in der nichtrelativistischen Theorie den Charakter eines nicht weiter begründbaren *Axioms*; er läßt sich jedoch im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie aus fundamentaleren Prinzipien beweisen.

Will man etwa den Hilbertraum eines *Bosonensystems* aus Einteilchen-Hilberträumen aufbauen, so kann man dafür offenbar nicht die einfachen Produktzustände (15.2) verwenden, da diese (außer für $i_1 = i_2 = i_3 = \ldots = i_N = i$) die Symmetrieforderung $\mathbb{S}|\xi\rangle = |\xi\rangle$ nicht erfüllen. Vielmehr muß offenbar eine *symmetrisierte Produktbasis* von Zuständen

$$|\xi_{(i_1 i_2 \ldots i_N)}\rangle = const. \sum_{P \in S_N} \mathbb{P}_P \left\{ |\xi_{i_1}\rangle_1 \cdot \ldots \cdot |\xi_{i_N}\rangle_N \right\} \tag{15.19}$$

verwendet werden, bei zwei Teilchen also (z.B. für $i_1 \neq i_2$)

$$|\xi_{(i_1 i_2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\, |\xi_{i_1}\rangle_1 \cdot |\xi_{i_2}\rangle_2 + |\xi_{i_2}\rangle_1 \cdot |\xi_{i_1}\rangle_2 \,\right] \; . \tag{15.20}$$

Wählt man die Einteilchenzustände $|\xi_i\rangle$ als Eigenzustände eines geeigneten Einteilchen-Hamiltonoperators h,

$$h|\xi_i\rangle = \varepsilon_i |\xi_i\rangle \; , \tag{15.21}$$

und ordnet die Eigenwerte gemäß

$$\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \leq \ldots \tag{15.22}$$

an, so ist in der „*Näherung unabhängiger Teilchen*", d.h. bei Verwendung des genäherten Hamiltonoperators

$$H \approx H_0 = \sum_{n=1}^{N} h^{(n)} \; , \tag{15.23}$$

der Systemgrundzustand offenbar anzunähern durch den Zustand

$$|\xi_{(0,0,\dots 0)}\rangle = |\xi_0\rangle_1 \cdot |\xi_0\rangle_2 \cdot \dots |\xi_0\rangle_N \ , \tag{15.24}$$

bei dem sich sämtliche Teilchen im Einteilchen-Grundzustand ansammeln; die Gesamtenergie ist $E_0 \approx N\varepsilon_0$.

Für ein *Fermionensystem* dagegen muß offenbar eine *antisymmetrisierte Produktbasis*

$$|\xi_{[i_1 i_2 \dots i_N]}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-)^P \mathbb{P}_P \left\{ |\xi_{i_1}\rangle_1 \cdot \dots \cdot |\xi_{i_N}\rangle_N \right\} \tag{15.25}$$

verwendet werden; diese Zustände können auch als sog. *Slaterdeterminanten*

$$|\xi_{[i_1 i_2 \dots i_N]}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \begin{vmatrix} |\xi_{i_1}\rangle_1 & |\xi_{i_1}\rangle_2 & \dots & |\xi_{i_1}\rangle_N \\ |\xi_{i_2}\rangle_1 & |\xi_{i_2}\rangle_2 & \dots & |\xi_{i_2}\rangle_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |\xi_{i_N}\rangle_1 & |\xi_{i_N}\rangle_2 & \dots & |\xi_{i_N}\rangle_N \end{vmatrix} \tag{15.26}$$

geschrieben werden. Die vollständige Antisymmetrie gegen alle Teilchenvertauschungen hat die wichtige Konsequenz, daß derartige Zustände identisch verschwinden, wenn zwei oder mehrere Teilchen sich im gleichen Einteilchenzustand $|\xi_i\rangle$ aufhalten: *Bei einem Fermionensystem kann jeder Einteilchenzustand mit höchstens einem Teilchen „besetzt" sein (Pauli-Prinzip)*. Insbesondere kann also in der Näherung (15.23) der Grundzustand des Systems nicht durch (15.24) approximiert werden, sondern nur durch eine Slaterdeterminante (15.26), in der *die N Teilchen sich auf die energetisch tiefsten Einteilchenzustände unter Berücksichtigung von deren Entartung verteilen*, bei nichtentarteten Energieniveaus (15.22) also z.B.

$$|\xi_{[0,1,2,\dots,N-1]}\rangle \tag{15.27}$$

mit der genäherten Grundzustandsenergie $E_0 = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_{N-1}$.

Für Atomelektronen, wo die Näherung (15.23) der sog. *Zentralfeldnäherung*, d.h. der Vernachlässigung der Coulomb-Abstoßungen der Elektronen untereinander bzw. ihrer Ersetzung durch ein gemitteltes, zum dominierenden Coulombfeld des Atomkerns hinzutretendes Einteilchenpotential entspricht, führt dieses Anordnungsprinzip zwanglos zur *qualitativen Erklärung der Systematik der Elektronenhüllen mit wachsender Ordnungszahl Z, d.h. des Periodischen Systems der Elemente*, wie von Pauli schon vor der Ausarbeitung der Quantenmechanik erkannt wurde.

IV

Quantenmechanische Streutheorie

Kapitel 16

Uneigentliche Streuzustände; Streuamplitude

16.1 Integralform der stationären Schrödingergleichung

Als prototypisches Problem der Quantentheorie der Stoßprozesse behandeln wir im folgenden die elastische Streuung eines spin- und strukturlosen Teilchens an einem raumfesten, um $\vec{r} = 0$ herum lokalisierten und für $\vec{r} \to \infty$ auf Null normierten Potential $V(\vec{r})$, das wir überdies für alle konkreten Anwendungen als kugelsymmetrisch voraussetzen werden. Da das Teilchen dabei aus makroskopischer – also verglichen mit der mikroskopischen Ausdehnung des Kraftzentrums praktisch unendlicher – Entfernung eingeschossen wird, befindet es sich hierbei von vornherein in einem Zustand (genauer: einer paketartigen Linearkombination von Zuständen), der völlig dem *kontinuierlichen* Spektrum des Hamiltonoperators $H = \vec{P}^2/2m + V(\vec{r})$ angehört. Seine Energie – bzw. der Energieschwerpunkt des Pakets – ist durch

$$E = E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m} > 0 \tag{16.1}$$

gegeben, wenn das Paket mit dem Impulsschwerpunkt $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \hbar k \cdot \hat{k}$ präpariert wurde. Wir studieren daher zunächst zur Vorbereitung die Kontinuumslösungen von H genauer. Unser Ziel ist es, in dem von diesen Lösungen aufgespannten Teilraum $\mathcal{H}_C$ des Hilbertraums eine (uneigentliche) Orthonormalbasis von Zuständen zu konstruieren, die aufgrund der speziellen Asymptotik ihrer Ortsdarstellung für die Behandlung des Streuproblems besonders geeignet sind.

Wir schreiben die stationäre Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung mit der positiven Energie (16.1) in der Form

$$(\nabla^2 + k^2)\,\langle\vec{x}|\psi\rangle = U(\vec{x}\,)\,\langle\vec{x}|\psi\rangle \tag{16.2}$$

mit $U(\vec{x}\,) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{x}\,)$ und fassen die rechte Seite formal als inhomogenen Term auf. Eine Partikularlösung einer solchen inhomogenen Dgl. kann man bekanntlich durch Quadratur konstruieren, wenn man eine *Greensche Funktion* des Differentialoperators linker Hand kennt, in diesem Falle also eine Funktion $\mathcal{G}(\vec{x}, \vec{x}\,'; k)$, die die inhomogene Dgl.

$$(\nabla^2 + k^2)\, \mathcal{G}(\vec{x}, \vec{x}\,'; k) = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}\,') \tag{16.3}$$

erfüllt. Dann ist nämlich

$$\langle \vec{x} | \psi_S \rangle = \int d^3x'\, \mathcal{G}(\vec{x}, \vec{x}\,'; k)\, U(\vec{x}\,')\, \langle \vec{x}\,' | \psi \rangle \tag{16.4}$$

eine spezielle Lösung der inhomogenen Dgl. Durch Hinzufügen einer beliebigen Lösung $\langle \vec{x} | \psi_0 \rangle$ der zugehörigen homogenen Dgl., in diesem Falle also der kräftefreien Schrödinger-Gleichung

$$(\nabla^2 + k^2)\, \langle \vec{x} | \psi_0 \rangle = 0\,, \tag{16.5}$$

erhalten wir dann die allgemeine Lösung

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \psi_0 \rangle + \int d^3x'\, \mathcal{G}(\vec{x}, \vec{x}\,'; k)\, U(\vec{x}\,')\, \langle \vec{x}\,' | \psi \rangle\,. \tag{16.6}$$

Da der Integralterm die unbekannte Wellenfunktion $\langle \vec{x}\,' | \psi \rangle$ erneut enthält, ist dies natürlich nur eine Formallösung des Problems; tatsächlich stellt (16.6) eine lineare Integralgleichung für $\langle \vec{x} | \psi \rangle$ dar, die sog. *Lippmann-Schwingersche Integralgleichung (in Ortsdarstellung)* für die Wellenfunktion des kontinuierlichen Spektrums.

Durch Wahl verschiedener Greenscher Funktionen $\mathcal{G}$ und kräftefreier Lösungen $\langle \vec{x} | \psi_0 \rangle$ kann die Lösung (16.6) verschiedenartigen *Randbedingungen* angepaßt werden. Da wir speziell eine Lösung suchen, die eine (stationäre) Beschreibung eines Streuvorgangs vermittelt, erwarten wir, daß für $U \to 0$, d.h. beim „Abschalten" des Kraftfeldes, eine Lösung übrigbleibt, die einfach das kräftefreie Vorbeilaufen an der Targetregion beschreibt. Wir setzen deshalb an

$$\langle \vec{x} | \psi_0 \rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{16.7}$$

mit $k = |\vec{k}|$ gemäß (16.1) und der Impulsrichtung

$$\hat{k} \;=\; \text{Einfallsrichtung (Richtung der Stoßachse)}\,. \tag{16.8}$$

Um $\mathcal{G}$ zu konstruieren, setzen wir es als Fouriertransformierte an,

$$\mathcal{G}(\vec{x}, \vec{x}\,'; k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q\; g_k(\vec{q}\,)\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x} - \vec{x}\,')}\,, \tag{16.9}$$

wobei wir eine Abhängigkeit von $\vec{x}$ und $\vec{x}\,'$ nur in Form der Differenz $\vec{x} - \vec{x}\,'$ voraussetzen dürfen, weil die Inhomogenität in (16.3) nur von dieser Differenz abhängt und der Differentialoperator verschiebungsinvariant ist. Einsetzen von Gl. (16.9) auf der linken und der Fourierdarstellung der δ-Distribution auf der rechten Seite von Gl. (16.3) ergibt

$$(k^2 - q^2)\, g_k(\vec{q}\,) = 1\,. \tag{16.10}$$

Um diese Gl. invertieren, d.h.

$$g_k(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}$$

schreiben zu können, benutzen wir den Kunstgriff, *k zunächst als komplexe Größe* ($\mathrm{Im}\, k \neq 0$) aufzufassen und anschließend die Fortsetzung zu den physikalischen Werten ($\mathrm{Re}\, k \geq 0, \mathrm{Im}\, k \to 0$) zu studieren. Dann ist nämlich in

$$\mathcal{G}(\vec{x} - \vec{x}\,'; k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \, \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{k^2 - q^2} \qquad (\vec{r} = \vec{x} - \vec{x}\,') \tag{16.11a}$$

oder nach Ausführen der $\hat{q}$-Winkelintegrationen mit $\vec{r}$ als Polarachse und $\cos\vartheta_q = \hat{q} \cdot \hat{r}$

$$\mathcal{G}(\vec{x} - \vec{x}\,'; k) = \frac{1}{4\pi r} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \frac{(-q)(e^{iqr} - e^{-iqr})}{(q-k)(q+k)} \qquad (r = |\vec{x} - \vec{x}\,'|) \tag{16.11b}$$

die Integration an den Punkten $q = \pm k$, wo bei reellem k der Integrand singulär wäre, zunächst wohldefiniert. Zur Auswertung von (16.11b) ergänzt man in bekannter Weise den Integrationsweg zu einem geschlossenen durch Hinzufügen eines Halbkreises mit sehr großem Radius R, und zwar in der oberen q-Halbebene für den Term mit e^{iqr} und in der unteren für den Term mit e^{-iqr}, da dort jeweils die Integranden exponentiell abfallen und der hinzugefügte Halbkreis für $R \to \infty$ keinen Beitrag liefert. Die Auswertung des so ergänzten Integrals nach dem Residuensatz liefert nun verschiedene Resultate je nachdem, ob $\mathrm{Im}\, k > 0$ oder $\mathrm{Im}\, k < 0$ ist:

$$\mathcal{G}(\vec{x} - \vec{x}\,'; k) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}\,'|} \cdot \begin{cases} e^{ik|\vec{x}-\vec{x}\,'|} & (\mathrm{Im}\, k > 0)\,, \\ e^{-ik|\vec{x}-\vec{x}\,'|} & (\mathrm{Im}\, k < 0)\,. \end{cases} \tag{16.12}$$

Die Fortsetzung zur reellen Achse, $\mathrm{Im}\, k \to 0$, liefert also verschiedene Funktionen je nachdem, ob man $\mathrm{Im}\, k$ – und damit auch $\mathrm{Im}\, E = \frac{\hbar^2}{2m} \mathrm{Im}\, k^2$ – von positiven oder negativen Werten her gegen 0 gehen läßt: *$\mathcal{G}$ ist als Funktion von k zweideutig* längs der reellen k-Achse, besitzt dort also einen „Verzweigungsschnitt“. Die Werte an den beiden Rändern des Schnittes,

$$\mathcal{G}^{(\pm)}(\vec{x} - \vec{x}\,'; k) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}\,'|}}{|\vec{x} - \vec{x}\,'|} \qquad (k \text{ reell})\,, \tag{16.13}$$

definieren *zwei verschiedene Greensche Funktionen* des Wellenoperators $\nabla^2 + k^2$. (Tatsächlich ist jede Linearkombination dieser beiden mit Koeffizientensumme 1 wegen Gl. (16.3) eine weitere Greensche Funktion, und eine solche Vieldeutigkeit ist auch zu erwarten; da der Operator $\nabla^2 + k^2$ einen Nullraum, bestehend aus den Lösungen von (16.5), besitzt, kann (16.3) nicht eindeutig auflösbar sein.)

Wählen wir zunächst $\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(+)}$, so nimmt die Integralgleichung (16.6) nun folgende Form an:

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}\,'|}}{|\vec{x} - \vec{x}\,'|} U(\vec{x}\,') \, \langle \vec{x}\,' | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \right\} . \tag{16.14}$$

16.2 Streurandbedingung und Streuamplitude

Wir betrachten nun das *asymptotische Verhalten* dieser Lösung für große $|\vec{x}|$. Ist R die ungefähre Ausdehnung der Potentialregion, d.h. fällt $U(\vec{x}\,')$ für $|\vec{x}\,'| \gtrapprox R$ genügend rasch auf Null ab, dann dürfen wir für

$$|\vec{x}| \gg R \tag{16.15a}$$

im Integralterm von (16.14) $1/|\vec{x}-\vec{x}\,'| \to 1/|\vec{x}|$ ersetzen. Im Zähler der Greenschen Funktion tritt

$$\begin{aligned} k|\vec{x}-\vec{x}\,'| &= k|\vec{x}|\left\{1 - 2\,\frac{|\vec{x}\,'|}{|\vec{x}|}\,(\hat{x}'\cdot\hat{x}) + \left(\frac{|\vec{x}\,'|}{|\vec{x}|}\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}} \\ &= k|\vec{x}| - (k\cdot\hat{x})\,\vec{x}\,' + O\left(\frac{kR^2}{|\vec{x}|}\right) \end{aligned}$$

auf; wählen wir also überdies

$$|\vec{x}| \gg kR^2\,, \tag{16.15b}$$

so kann dieser Ausdruck durch seine beiden ersten angeschriebenen Terme ersetzt werden. Damit wird asymptotisch

$$\langle\vec{x}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle \;\longrightarrow\; (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\left\{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)\,\frac{e^{ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}\right\}\,, \tag{16.16}$$

wobei der Ausdruck (mit $\vec{k}' = k\cdot\hat{x}$)

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}}\int d^3x'\; e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}\,'}\,U(\vec{x}\,')\,\langle\vec{x}\,'|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle \tag{16.17}$$

die Dimension Länge hat. Berücksichtigt man den bei stationären Lösungen stets hinzuzudenkenden harmonischen Zeitfaktor $e^{-i\omega t}$ $(\omega = E/\hbar)$, so stellt $e^{i(k|\vec{x}|-\omega t)}/|\vec{x}|$ eine auslaufende Kugelwelle dar. Bei Verwendung der Greenschen Funktion $\mathcal{G}^{(+)}$ ist also die Lösung von (16.2) dadurch ausgezeichnet, daß sie folgende *Randbedingungen für* $|\vec{x}| \to \infty$ (im Sinne von (16.15a/b) erfüllt: Zur in Einschußrichtung kräftefrei laufenden ebenen Welle tritt in dieser „Fernzone" – als Auswirkung des streuenden Potentials – eine *auslaufende* Kugelwelle hinzu, die nach Maßgabe des Faktors f, Gl. (16.17), „richtungsmoduliert" ist. f wird daher als *Streuamplitude* bezeichnet.

Es ist plausibel, daß Lösungen, die diese spezielle Asymptotik („Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung") besitzen, der Beschreibung eines Streuprozesses besonders angepaßt sind. Hätten wir statt $\mathcal{G}^{(+)}$ die Greensche Funktion $\mathcal{G}^{(-)}$ benutzt, so hätten wir eine Lösung $\langle\vec{x}|\psi^{(-)}_{\vec{k}}\rangle$ erhalten, deren Asymptotik sich von der ebenen Welle durch eine *einlaufende* Kugelwelle $\propto e^{-ik|\vec{x}|}/|\vec{x}|$ unterscheidet, was einer zeitlichen Umkehrung des realen Streuvorgangs angemessen wäre. Die Kombination $\frac{1}{2}\left[\mathcal{G}^{(+)} + \mathcal{G}^{(-)}\right] \propto (\cos kr)/r$ schließlich würde eine stehende Streuwelle beschreiben.

Die drei Komponenten des asymptotischen Einschußimpulses $\vec{k}$ in (16.14) bzw. (16.16) können an Stelle von Quantenzahlen zur Charakterisierung des uneigentlichen Zustandes $|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$ dienen. Sie sind keine Quantenzahlen im bisher benutzten Sinne von Eigenwerten mit H kommutierender Operatoren; lediglich die Kombination $|\vec{k}|^2$ gibt gemäß (16.1) den Eigenwert E von H (im kontinuierlichen Spektrum) an. Trotzdem werden wir im nächsten Kapitel zeigen, daß die $|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$ zu verschiedenen $\vec{k}$ orthogonal und bei Zugrundelegung der Normierung (16.7) für den kräftefreien Term der Integralgleichung (16.14) auf Deltafunktionen in der Impulsskala normiert sind:

$$\langle\psi^{(+)}_{\vec{k}'}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) \, . \tag{16.18}$$

Überdies spannen diese uneigentlichen Vektoren für $|\vec{k}| = 0 \ldots \infty$ und alle $\hat{k}$ auf der Einheitskugel den gesamten Unterraum $\mathcal{H}_C$ zum kontinuierlichen Spektrum von H auf, d.h. es gilt

$$\int d^3k \, |\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle\langle\psi^{(+)}_{\vec{k}}| \; = \; \Pi_C \; = \; \mathbf{1} - \Pi_B \, , \tag{16.19}$$

wobei Π_C und Π_B die zueinander komplementären Projektoren auf den Kontinuums- und den diskreten Eigenraum von H bezeichnen. (Die Lösungen $|\psi^{(-)}_{\vec{k}}\rangle$ würden ebenfalls eine – gegenüber der $|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$-Basis „verdrehte“ – uneigentliche Orthonormalbasis in $\mathcal{H}_C$ bilden, die für unsere Zwecke nicht so unmittelbar geeignet ist.)

Kapitel 17

Streuung eines Wellenpakets; Wirkungsquerschnitt

17.1 Streuung eines Wellenpakets

Da die nichtnormierbaren Kontinuumszustände keine direkte physikalische Interpretation besitzen, muß man, um die bisher rein mathematisch durch (16.16/16.17) eingeführte Streuamplitude mit Meßgrößen in Verbindung zu bringen, den Streuvorgang realistisch, d.h. als nichtstationäre Bewegung eines normierbaren Wellenpakets durch die streuende Potentialregion hindurch behandeln.

Zu einem Zeitpunkt t_i, der auf mikroskopischer Skala lange vor dem Stoßzeitpunkt $t = 0$ liegt – idealisiert durch $t_i \to -\infty$ – werde das Stoßteilchen in makroskopischer Entfernung r_0 vom Kraftzentrum als normierbares Wellenpaket $|\varphi(t)\rangle$ präpariert und bewege sich anfangs kräftefrei, d.h. nach den Gln. (2.6):

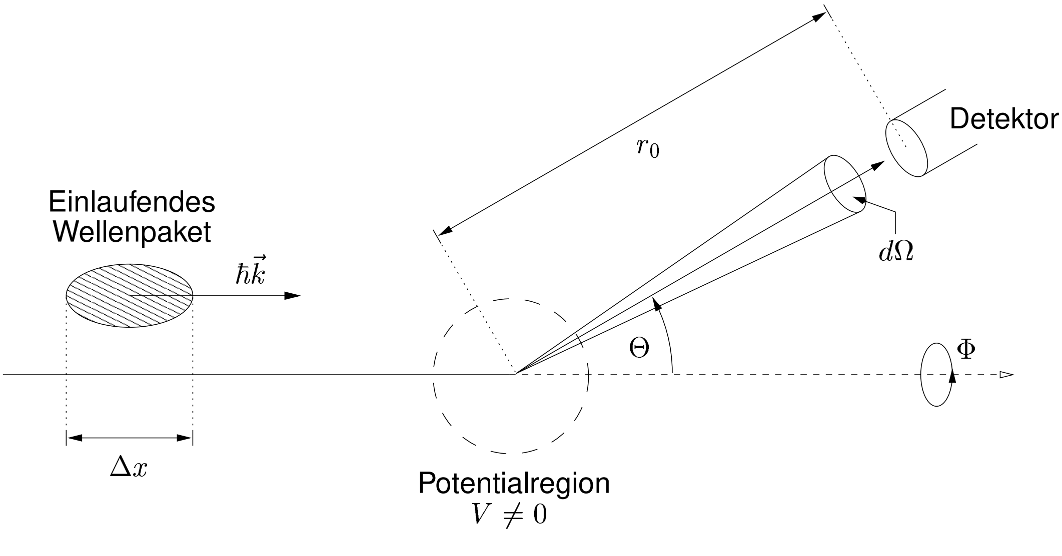
$$|\varphi(t)\rangle = \int d^3q \, |\vec{q}\rangle \, \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q}) \, e^{-\frac{i}{\hbar}E(q)(t-t_i)} \, . \tag{17.1}$$

Wesentlich für die im folgenden entwickelte Streutheorie ist dabei die in praktischen Streuexperimenten sehr gut erfüllte Voraussetzung, daß die Impulsverteilung $\tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})$, wie durch den Index $\vec{k}$ angedeutet, sehr scharf um einen Wert $\vec{k}$ herum konzentriert ist derart, daß die kraft der Unschärferelation damit zwangsläufig verbundene Ausdehnung $\Delta x \gtrsim 1/\Delta q$ – obwohl natürlich winzig gegenüber der makroskopischen Entfernung r_0 – groß ist gegen die Ausdehnung R der Potentialregion:

$$R \ll \Delta x \ll r_0 \, . \tag{17.2}$$

Dazu ist natürlich insbesondere Voraussetzung, daß das Potential tatsächlich für große r so schnell abfällt, daß eine wohldefinierte Potentialregion $r \lesssim R$ existiert. (Dies trifft für das Coulombpotential $\propto 1/r$, wie sich zeigt, nicht zu; auf dieses „langreichweitige“ Potential ist in der Tat die gesamte „normale“ Streutheorie nicht anwendbar. Es muß mit speziellen Methoden behandelt werden.)

Wäre das Potential V abgeschaltet, so würde die kräftefreie Zeitentwicklung (17.1)



für alle Zeiten anhalten, und das Paket würde nach der makroskopischen Laufzeit

$$2T \approx \frac{2r_0}{v_0} \qquad \text{mit} \qquad v_0 = \frac{\hbar k}{m} \tag{17.3}$$

bei $t_f = t_i + 2T$ (idealisiert zu $t_f \to +\infty$) in den geradeaus hinter dem Target wiederum in makroskopischer Entfernung r_0 angenommenen Strahlmonitor hineinlaufen. Tatsächlich ist jedoch $V \neq 0$, und (17.1) kann daher nicht die wahre Streulösung sein, sondern nur ihr *asymptotisch kräftefreier Grenzwert für* $t = t_i$. Die wirkliche Lösung muß, da sie sich unter dem Einfluß des vollen Hamiltonoperators H entwickelt, als Linearkombination der stationären Lösungen zu H angesetzt werden, wobei die Entwicklungskoeffizienten nach Gl. (4.25) durch Analyse der Anfangskonfiguration bei $t = t_i$ zu bestimmen sind:

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3q\, \chi(\vec{q}\,)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E(q)(t-t_i)}\, |\psi_{\vec{q}}^{(+)}\rangle\,, \tag{17.4}$$

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}\,) &= \langle\psi_{\vec{q}}^{(+)}|\psi(t_i)\rangle = \langle\psi_{\vec{q}}^{(+)}|\varphi(t_i)\rangle \\ &= \int d^3x\, \langle\psi_{\vec{q}}^{(+)}|\vec{x}\,\rangle\langle\vec{x}|\varphi(t_i)\rangle\,. \end{aligned} \tag{17.5}$$

Die gebundenen Zustände haben wir in der Entwicklung von vornherein weggelassen, denn ihre zu (17.5) analogen Entwicklungskoeffizienten sind offensichtlich Null – ihre Ortsdarstellung ist bei $r \lessapprox R$ lokalisiert, während $\langle\vec{x}|\varphi(t_i)\rangle$ wegen (17.2) nur bei $r \approx r_0 \gg R$ wesentlich von Null verschieden ist. Der nichtstationäre Zustand (17.4) liegt also von Anfang an vollständig im Raum $\mathcal{H}_C$. Aus demselben Grunde können wir im Koeffizienten (17.5) $\langle\psi_{\vec{q}}^{(+)}|\vec{x}\,\rangle$ durch den führenden Term seiner Asymptotik (16.16), d.h. die ebene Welle $\langle\vec{q}\,|\vec{x}\,\rangle$, ersetzen und haben damit

$$\chi(\vec{q}\,) = \langle\vec{q}\,|\varphi(t_i)\rangle = \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q}\,)\,, \tag{17.6}$$

also

$$\langle\vec{x}|\psi(t)\rangle = \int d^3q\, \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q}\,)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E(q)(t-t_i)}\, \langle\vec{x}|\psi_{\vec{q}}^{(+)}\rangle \tag{17.7}$$

mit

$$|\psi(t)\rangle \;\to\; |\varphi(t)\rangle \qquad \text{für} \qquad t \to t_i\,. \tag{17.8}$$

Die Eigenschaft „streutheoretisch vernünftiger“ Potentiale, daß zu jedem kräftefreien Paket (17.1) sich gemäß (17.7) eine exakte Lösung mit der Eigenschaft (17.8) konstruieren läßt, wird als „Asymptotenbedingung“ bezeichnet.

Für das Streuexperiment interessiert nun die Zeitentwicklung von (17.7) für spätere Zeiten t und insbesondere für die große positive Zeit $t \approx +T$ von (17.3), zu der die vom Potentialfeld abgelenkten Teile des Wellenpakets am Detektor in der makroskopischen Entfernung r_0 erwartet werden. Aufgrund unserer Bedingung (17.2) und der Resultate von Abschnitt 2.3 erwarten wir dabei, daß der schon beim kräftefreien Fall (17.1) vorhandene Aspekt der Zeitentwicklung, der die Verbreiterung des Pakets betrifft, unwesentlich ist. Nach Gl. (2.36) ist $(\hbar\Delta q/m)\cdot T \ll \Delta x$ oder, da $\Delta x \gtrapprox 1/\Delta q$,

$$\frac{\hbar}{2m}\,(\Delta q)^2\cdot 2T \ll 1 \qquad \text{oder} \qquad (\Delta q)^2\,\frac{r_0}{k} \ll 1 \tag{17.9}$$

die genaue Bedingung dafür, daß das Wellenpaket sich in der Zeitspanne T nicht wesentlich verbreitert. Unter dieser Bedingung, die wir fortan (zusätzlich zu dem in (17.2) impliziten $\Delta q \gg 1/r_0$) voraussetzen, dürfen wir annehmen, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung von (17.7), auch wenn aus der ursprünglichen Laufrichtung abgelenkt oder verformt, noch immer gut, nämlich etwa mit dem ursprünglichen Δx, lokalisiert ist, für $t \approx T$ also bei $|\vec{x}| \approx r_0$. In dieser Entfernung kann $\langle\vec{x}|\psi_{\vec{q}}^{(+)}\rangle$ in (17.7) wieder durch seine Asymptotik (16.16) dargestellt werden, in der wir aber nun beide Terme beibehalten müssen, weil $\langle\vec{x}|\psi(t)\rangle$ selbst, nicht mehr nur sein Produktintegral mit einer weiteren stark lokalisierten Funktion, interessiert. Wohl aber können wir die starke Lokalisierung von $\tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})$ um $\vec{q} \approx \vec{k}$ herum und die Bedingung (17.9) ausnutzen, um die Berechnung der Zeitentwicklung zu vereinfachen: In

$$E(q) = \frac{\hbar^2}{2m}\,[\vec{k} + (\vec{q}-\vec{k})]^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\,[2\vec{k}\cdot\vec{q} - \vec{k}^2 + (\vec{q}-\vec{k})^2]$$

können wir wegen (17.9) den quadratischen Term vernachlässigen und erhalten

$$\langle\vec{x}|\psi(t)\rangle \approx e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_i)} \int d^3q\; \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{v}_0(t-t_i)}\, \langle\vec{x}|\psi_{\vec{q}}^{(+)}\rangle_{\text{as}} \qquad (t \approx t_f) \tag{17.10}$$

mit $\vec{v}_0 = \hbar\vec{k}/m$, wobei „as“ die Asymptotik (16.16) bezeichnet. Nun ist in dieser Näherung aber der erste der von dieser Asymptotik gelieferten Terme,

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_i)} \int d^3q\; \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{v}_0(t-t_i)}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \approx \langle\vec{x}|\varphi(t)\rangle\,, \tag{17.11}$$

das ungestört weiterbewegte ursprüngliche Wellenpaket, das also zu diesem Zeitpunkt geradeaus *hinter* dem Detektor beim Ablenkungswinkel 0 (vgl. Skizze) sich befindet. In dem zweiten von Gl. (16.16) gelieferten Term,

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_i)} \int d^3q\; \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})\, f(q\cdot\hat{x}, \vec{q})\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{v}_0(t-t_i)}\, \frac{e^{iq|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}\,, \tag{17.12}$$

wollen wir nun die einschränkende Annahme machen, daß die *Streuamplitude f als Funktion des Einschußimpulses q im kleinen Bereich Δq um $\vec{k}$ herum sich nicht wesentlich ändert.* Dies schließt Fälle aus, in denen die Streuung am Potential $V(\vec{r}\,)$ bei $q \approx k$ eine sehr scharfe sog. Resonanz aufweist, die sich in einer raschen Veränderlichkeit von f mit q äußert. Ist diese Einschränkung erfüllt, dann können wir wegen der scharfen Lokalisierung von $\tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q}\,)$ f bei $\vec{q} \approx \vec{k}$ aus dem Fourierintegral herausziehen und überdies

$$q\,|\vec{x}| \approx (\vec{q}\cdot\hat{k})\,|\vec{x}| \tag{17.13}$$

setzen; dann wird (17.12) zu

$$\begin{aligned}&(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_i)}\,\frac{f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)}{|\vec{x}|}\int d^3q\;\tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q}\,)\,e^{i\vec{q}\cdot\left(|\vec{x}|\hat{k}-\vec{v}_0(t-t_i)\right)}\\ &\quad\approx\;\langle(|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle\,\frac{f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)}{|\vec{x}|}\,,\end{aligned}$$

und insgesamt haben wir für $t \approx t_f$ (groß und positiv)

$$\boxed{\langle\vec{x}|\psi(t)\rangle\;\approx\;\langle\vec{x}|\varphi(t)\rangle+\frac{f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)}{|\vec{x}|}\,\langle(|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle\;.} \tag{17.14}$$

Diese Formel, die nun im Gegensatz zu (16.16) die wahre *normierte* Wellenfunktion, und zwar an *allen* Orten $\vec{x}$, dafür aber nur für große Zeiten t beschreibt, hat eine höchst anschauliche Interpretation: Für Zeiten lange nach dem Stoßzeitpunkt besteht $|\psi(t)\rangle$ aus dem ungestört durchgelaufenen Paket $|\varphi(t)\rangle$ und einem durch die Streuwirkung des Potentials hervorgerufenen *gestreuten Kugelwellenpaket*. Ersteres ist nur längs der ungestörten Paketbahn, d.h. in Vorwärtsrichtung $(\hat{x} \approx \hat{k}, \Theta \approx 0)$ von Null verschieden; letzteres ist auf der ganzen Kugelschale $|\vec{x}| \approx r_0$ vorhanden und dem nach vorn gestreuten Paket $\langle(|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi\rangle$ in der Amplitude proportional, aber mit dem Faktor $f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)$ richtungsmoduliert.

Da in Vorwärtsrichtung ungestreuter und gestreuter Anteil nicht zu trennen sind, ist die Frage nach der Nachweiswahrscheinlichkeit für gestreute Teilchen am Detektorort, also bei

$$\vec{x} = r_0\cdot\hat{x}\quad,\quad \hat{x} = (\Theta,\Phi)\;\text{ im Raumwinkelelement } d^2\hat{x}\,, \tag{17.15}$$

nur außerhalb der Vorwärtsrichtung sinnvoll. Dort ist aber das ungestreute Paket (der erste Term in (17.14)) völlig vernachlässigbar. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Zeit t im Volumenelement

$$d^3x = |\vec{x}|^2\,d|\vec{x}|\,d^2\hat{x} = r^2\,dr\,d\Omega$$

um den Detektorort $\vec{x}$ herum ist also

$$dP(t) = \left|\frac{f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)}{|\vec{x}|}\,\langle(|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle\right|^2\,|\vec{x}|^2\,d|\vec{x}|\,d\Omega\,.$$

Da das kugelschalenförmige gestreute Paket sich mit der mittleren Geschwindigkeit $\vec{v}_0$ nach außen bewegt, ist diese Wahrscheinlichkeit nur im Zeitintervall $t = t_f \ldots t_f + dt$ wesentlich von Null verschieden, wobei $d|\vec{x}| = v_0\, dt$ ist. Die *Nachweiswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit am Detektorort*, die sich bei häufiger Wiederholung des Streuversuchs mit identischer Anfangspräparation $|\varphi(t_i)\rangle$ in die experimentell gemessene „Zählrate" umsetzt, ist also

$$\frac{dP(t)}{dt} = |f(k \cdot \hat{x}, \vec{k}\,)|^2\, d\Omega \left\{ v_0\, |\langle(|\vec{x}| \cdot \hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 \right\} . \tag{17.16}$$

Nun ist aber die Größe

$$j_0 = v_0\, |\langle(|\vec{x}| \cdot \hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 \tag{17.17}$$

die Wahrscheinlichkeit pro Zeit- und Flächeneinheit dafür, daß das ungestörte Wellenpaket durch eine Fläche senkrecht zu seiner Laufrichtung $\hat{k}$ (im gleichen Abstand $|\vec{x}|$ vom Streuzentrum wie der Detektor) hindurchtritt, d.h. der einfallende Wahrscheinlichkeitsstrom. Die auf diesen einfallenden Strom normierte Zählrate,

$$d\sigma = \frac{1}{j_0} \cdot \frac{dP}{dt} = |f(k \cdot \hat{x}, \vec{k}\,)|^2\, d\Omega\,, \tag{17.18}$$

ist die bei praktischen Streuexperimenten tatsächlich gemessene Größe. Man bezeichnet *$d\sigma/d\Omega$ als differentiellen Wirkungs- oder Streuquerschnitt*, und unser für die quantenmechanische Streutheorie zentrales Resultat lautet damit

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k \cdot \hat{k}', \vec{k}\,)|^2,} \tag{17.19}$$

wobei wir wieder $\hat{k}'$ statt $\hat{x}$ geschrieben haben. Die Bedeutung dieser Größe liegt darin, daß sie unter den gemachten Voraussetzungen, insbesondere also bei Abwesenheit scharfer Resonanzen in f, *unabhängig von der speziellen Form des einfallenden Wellenpakets* $|\varphi(t)\rangle$ wird, die in (17.16) nur über den Stromfaktor j_0 eingeht und durch die Normierung (17.18) herausfällt. Sie stellt also eine allein für das Streuzentrum, d.h. das Potential $V(\vec{r}\,)$, charakteristische Eigenschaft dar. Wenn das Integral über alle Streurichtungen $\hat{k}'$,

$$\sigma(\vec{k}\,) = \int d^2\hat{k}'\, |f(k \cdot \hat{k}', \vec{k}\,)|^2\,, \tag{17.20}$$

existiert, wird es als integrierter oder *totaler Wirkungsquerschnitt* (für die hier ausschließlich betrachtete elastische Streuung) bezeichnet. (Für kugelsymmetrisches V hängt es, wie wir sehen werden, nur von k bzw. E und nicht mehr von $\hat{k}$ ab.)

17.2 Das optische Theorem

Mit (17.19) haben wir die aus dem ungestörten Wellenpaket „herausgestreute" Intensität berechnet. Da die Gesamtwahrscheinlichkeit auf 1 normiert bleiben muß,

muß der in die Vorwärtsrichtung durchlaufende Wahrscheinlichkeitsstrom entsprechend geschwächt sein. Wir rechnen dies nach, indem wir die Normierungsbedingung

$$\int d^3x \; |\langle \vec{x}|\psi(t)\rangle|^2 = 1 \qquad \text{für } \textit{alle } t \tag{17.21}$$

speziell für $t \approx t_f$ anwenden, wo (17.14) gilt. Nun ist aber das ursprüngliche Paket selbst bereits normiert,

$$\int d^3x \; |\langle \vec{x}|\varphi(t)\rangle|^2 = 1 \qquad \text{für } \textit{alle } t\,, \tag{17.22}$$

so daß wir aus (17.21) die Bedingung

$$\begin{aligned} \int d^3x \Bigg\{ & \frac{|f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)|^2}{|\vec{x}|^2} \, |\langle (|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 \\ & + 2\,\mathrm{Re}\left[\langle \varphi(t)|\vec{x}\,\rangle \, \frac{f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)}{|\vec{x}|} \, \langle (|\vec{x}|\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle \right] \Bigg\} = 0 \end{aligned} \tag{17.23}$$

erhalten. Sie besagt physikalisch, daß die gestreute Intensität (1. Term) dem ursprünglichen Wellenpaket $|\varphi(t)\rangle$ durch *destruktive Interferenz mit der gestreuten Kugelwelle in der Vorwärtsrichtung* (2. Term) entzogen werden muß. In Kugelkoordinaten mit $|\vec{x}| = r$ haben wir

$$\begin{aligned} & \left[\int d^2\hat{x} \; |f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,)|^2 \right] \cdot \int_0^\infty dr \; |\langle (r\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 \\ & \quad + \mathrm{Re}\left[\int_0^\infty dr \; \langle (r\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle \cdot 2r \int d^2\hat{x} \; f(k\cdot\hat{x},\vec{k}\,) \, \langle \varphi(t)|\vec{x}\,\rangle \right] = 0\,. \end{aligned}$$

Im ersten Faktor des ersten Terms erkennt man den integrierten Querschnitt (17.20). Im zweiten Term ist $\langle \varphi(t)|\vec{x}\,\rangle$ für $t > 0$ nur für $\hat{x} = \hat{k}$ wesentlich von Null verschieden, so daß wir $f(k\cdot\hat{k},\vec{k}\,) = f(\vec{k},\vec{k}\,)$, d.h. die Vorwärtsstreuamplitude, aus dem Integral herausziehen können:

$$\begin{aligned} & \sigma(\vec{k}) \cdot \int_0^\infty dr \; |\langle (r\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 \\ & \quad + \mathrm{Re}\left\{ f(\vec{k},\vec{k}\,) \int_0^\infty dr \; \langle (r\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle \cdot \left[2r \int d^2\hat{x} \; \langle \varphi(t)|\vec{x}\,\rangle \right] \right\} = 0\,. \end{aligned}$$

Um die eckige Klammer auszuwerten, benutzen wir die explizite Darstellung des Wellenpakets, etwa durch (17.11), und (mit $\vec{q}$ als Polarachse und $\hat{q}\cdot\hat{x} = y$)

$$\begin{aligned} 2r \int d^2\hat{x} \; e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} &= 2r \cdot 2\pi \left[\frac{1}{-iqr} \, e^{-iqry} \right]_{y=-1}^{y=+1} \\ & \longrightarrow \quad \frac{4\pi}{-ik} \left[e^{-i\vec{q}(+r\cdot\hat{k})} - e^{-i\vec{q}(-r\cdot\hat{k})} \right], \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt, da die Amplitude $\tilde{\varphi}_{\vec{k}}(\vec{q})$ dabeisteht, Gl. (17.13) angewendet haben. Damit wird

$$2r \int d^2\hat{x}\, \langle\varphi(t)|\vec{x}\,\rangle = \frac{4\pi}{-ik}\left[\langle\varphi(t)|(r\cdot\hat{k})\rangle - \langle\varphi(t)|(-r\cdot\hat{k})\rangle\right]\,. \tag{17.24}$$

Nun ist aber für die von uns betrachtete Zeit $t \approx t_f$ der Anteil $\langle\varphi(t)|(-r\cdot\hat{k})\rangle$ Null, weil $-r\cdot\hat{k}$ ein weit *vor* dem Streuzentrum gelegener Punkt ist, den das Paket bei $t > 0$ längst verlassen hat. Wegen $\mathrm{Re}\,(i\cdot f) = -\mathrm{Im}\, f$ erhalten wir also

$$\left[\sigma(\vec{k}) - \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f(\vec{k},\vec{k}\,)\right]\cdot\int_0^\infty dr\, |\langle(r\cdot\hat{k})|\varphi(t)\rangle|^2 = 0\,.$$

Da der zweite Faktor $\neq 0$ ist, finden wir also, daß die Forderung der Wahrscheinlichkeitserhaltung beim Streuprozeß zu einer nichtlinearen Bedingung für die Streuamplitude führt:

$$\boxed{\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f(\vec{k},\vec{k}\,) = \sigma(\vec{k}).} \tag{17.25}$$

Diese Relation wird als *optisches Theorem* oder *Bohr-Peierls-Placzek-Relation* bezeichnet und stellt wegen ihrer Nichtlinearität – Gl. (17.20)! – eine sehr stark einschränkende Bedingung für die funktionale Form *jeglicher* Streuamplitude dar.

17.3 Die Bornsche Näherung

Um die Streuamplitude wirklich zu berechnen, muß man die Integralgl. (16.14) lösen und f dann durch Betrachtung der Asymptotik (16.16) der Lösung ablesen oder durch eine weitere Quadratur gemäß (16.17) bestimmen. Exakt ist dies für viele Potentiale nur auf numerischem Wege durchführbar. Ein systematisches Näherungsverfahren könnte darin bestehen, die Gl. (16.14) iterativ zu lösen;

$$\langle\vec{x}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\left\{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\,\frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}\,'|}}{|\vec{x}-\vec{x}\,'|}\,V(\vec{x}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} + \ldots\right\}. \tag{17.26}$$

Durch Einsetzen in (16.17) entsteht eine Entwicklung von f nach Termen mit steigender Zahl von V-Faktoren, die sog. Bornsche Reihe. Am wichtigsten ist die erste Näherung, bei der man nur den ersten Term von (17.26) verwendet, die sog. *Bornsche Näherung*:

$$f \approx f_B(\vec{k}' - \vec{k}\,) = -\frac{m}{2\pi h^2}\int d^3x\; e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\,V(\vec{x}\,)\,. \tag{17.27}$$

In dieser Näherung hängt f von $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ nur über die Impulsübertragung

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} = k\cdot(\hat{k}' - \hat{k}) \qquad (\,|\vec{k}'| = k\,!) \tag{17.28}$$

ab und ist einfach durch die *Fouriertransformierte des Potentials bezüglich* $\vec{q}$ gegeben.

Ist $V = V(r)$ sogar kugelsymmetrisch, so kann die Winkelintegration bei Wahl von $\hat{q}$ als Polarachse gemäß

$$\int d^2\hat{x}\; e^{-iqr(\hat{q}\cdot\hat{x})} = 2\pi \int_{-1}^{+1} ds\; e^{-iqrs} = 4\pi\, \frac{\sin qr}{qr} \tag{17.29}$$

ausgeführt werden, und man erhält die noch einfachere Bornsche Näherung für kugelsymmetrische lokale Potentiale,

$$f \approx f_B(q(k,\Theta)) = -\frac{2m}{\hbar^2}\,\frac{1}{q}\int_0^\infty dr\; r\sin(qr)\,V(r)\,, \tag{17.30}$$

die vom Impuls k und Streuwinkel Θ (mit $\cos\Theta = \hat{k}'\cdot\hat{k}$) nur noch über die eine Kombination

$$q = |\vec{k}' - \vec{k}| = [2k^2(1-\cos\Theta)]^{\frac{1}{2}} = 2k\sin\frac{\Theta}{2} \tag{17.31}$$

abhängt.

Der *Gültigkeitsbereich* der Bornschen Näherung, d.h. der kinematische Bereich, wo die aus (17.26) entstehende Bornsche Reihe für f schnell konvergiert, ist nicht leicht allgemein anzugeben. Es ist jedoch plausibel, daß dies für „schwache" Potentiale der Fall sein wird, da dann die höheren Terme der Bornschen Reihe immer höhere Potenzen eines die Stärke von $V(\vec{x}\,)$ charakterisierenden kleinen Faktors V_0 („klein" im Vergleich zur Streuenergie E) enthalten, sowie für hohe Energien, da dann die oszillierenden Faktoren in den Integralen der höheren Terme von (17.26) sehr rasch oszillieren. Insgesamt wird man also grob qualitativ

$$\frac{V_0}{E} \ll 1 \tag{17.32}$$

als Voraussetzung für die Anwendbarkeit von (17.27) erwarten.

Als Beispiel wenden wir (17.30) auf das sog. *Yukawa-Potential*

$$V(r) = -V_0\,\frac{e^{-r/a}}{r/a} \tag{17.33}$$

an, wobei die Länge a die früher mit R bezeichnete ungefähre Reichweite des Potentials darstellt:

$$\begin{aligned} f_B(q(k,\Theta)) &= \frac{2m}{\hbar^2}\,V_0\int_0^\infty dr\; r^2\,\frac{\sin qr}{qr}\left(\frac{e^{-r/a}}{r/a}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\,V_0 a\left(\frac{1}{q^2+a^{-2}}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\,V_0\,\frac{a}{4k^2\sin^2\frac{\Theta}{2}+a^{-2}} \\ &= \frac{V_0 a}{4E}\,\frac{1}{\sin^2\frac{\Theta}{2}+(2ka)^{-2}}\,. \end{aligned} \tag{17.34}$$

Der entsprechende differentielle Wirkungsquerschnitt in 1. Bornscher Näherung,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_B = \left(\frac{V_0 a}{4E}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2\frac{\Theta}{2} + (2ka)^{-2}}\right)^2 , \tag{17.35}$$

hat für $ka \gg 1$ (hohe Energien nicht nur im Vergleich zu V_0, sondern auch zu $\hbar^2/2ma^2$) ein scharfes Maximum in Vorwärtsrichtung $\Theta = 0$ und fällt nach $\Theta = \pi$ hin monoton ab.

Daß das Coulomb-Potential $V(r) \propto 1/r$ mit der „normalen“ Streutheorie nicht zu behandeln ist, läßt sich daran illustrieren, daß zwar (17.33) für

$$V_0 a \;\rightarrow\; \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \qquad \text{und} \qquad a \rightarrow \infty \tag{17.36}$$

in das attraktive Coulomb-Potential zwischen zwei Ladungen $Z_1 e$ und $-Z_2 e$ übergeht, daß aber bei rein formaler Ausführung dieses Grenzübergangs an (17.35) nicht der genäherte Bornsche, sondern merkwürdigerweise der *exakte* (mit den schon erwähnten speziellen Methoden für das $1/r$-Potential berechnete) differentielle Streuquerschnitt für das Coulomb-Potential, der sog. *Rutherford-Querschnitt*

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \cdot \frac{1}{16E^2 \sin^4\frac{\Theta}{2}} , \tag{17.37}$$

sich ergibt. Die Streuamplitude (17.34) in diesem Limes ist jedoch *nicht* die exakte (die beim Coulomb-Potential anders definiert werden muß, da die Asymptotenformel (16.16) modifiziert wird), sondern unterscheidet sich von ihr durch das Fehlen eines Θ-abhängigen komplexen Phasenfaktors, der erst in $|f|^2$ herausfällt. Daß das Entstehen des exakten Resultats (17.37) aus (17.35) eine Kuriosität ist, sieht man daran, daß die zweite Bornsche Näherung im Grenzfall (17.36) auf divergente Integrale führt.

Mit den Ergebnissen dieses Abschnitts können wir nun auch den für (16.18) noch fehlenden *Orthonormalitätsbeweis* nachholen. Es seien $|\psi_1(t)\rangle$, $|\psi_2(t)\rangle$ zwei verschiedene Paketlösungen der Schrödinger-Gl. vom Typ (17.4). Ihr Skalarprodukt ist

$$\langle\psi_2(t)|\psi_1(t)\rangle = \int d^3q_1 \int d^3q_2\; \chi_1(\vec{q}_1)\, \chi_2^*(\vec{q}_2)\, e^{-\frac{i}{\hbar}[E(q_1)-E(q_2)](t-t_i)}\, \langle\psi_{\vec{q}_2}^{(+)}|\psi_{\vec{q}_1}^{(+)}\rangle . \tag{17.38}$$

Andererseits ist ja das Skalarprodukt zweier exakter Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gl. unabhängig von t, denn es gilt (10.1) mit (10.3) und somit

$$\langle\psi_2(t)|\psi_1(t)\rangle = \langle\psi_2(t_0)|U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0)|\psi_1(t_0)\rangle = \langle\psi_2(t_0)|\psi_1(t_0)\rangle . \tag{17.39}$$

Wir können also (17.38) speziell für $t = t_i$ auswerten. Dort gilt aber nach unserer Konstruktion (17.8), und somit wird die rechte Seite von (17.38) identisch mit

$$\begin{aligned}\langle\varphi_2(t)|\varphi_1(t)\rangle &= \int d^3q_1 \int d^3q_2\; \chi_1(\vec{q}_1)\, \chi_2^*(\vec{q}_2)\\ &\times\; e^{-\frac{i}{\hbar}[E(q_1)-E(q_2)](t-t_i)}\, \underbrace{\langle\vec{q}_2|\vec{q}_1\rangle}_{\delta^3(\vec{q}_2-\vec{q}_1)} = \int d^3q_1\; \chi_1(\vec{q}_1)\, \chi_2^*(\vec{q}_1) .\end{aligned}$$

Dies kann aber für *alle* normierbaren χ_1, χ_2 nur richtig sein, wenn wie behauptet gilt:

$$\langle\psi_{\vec{q}_2}^{(+)}|\psi_{\vec{q}_1}^{(+)}\rangle = \delta^3(\vec{q}_2 - \vec{q}_1)\ .$$

Kapitel 18

Zentralpotentiale und Partialwellenmethode

18.1 Partialwellenentwicklung der Streuamplitude

Ein exaktes Verfahren zur Berechnung der Streuamplitude läßt sich am leichtesten für Zentralkraftfelder angeben, wo

$$[V, \vec{L}] = 0 \tag{18.1}$$

ist. Hier läßt sich die Streulösung (16.14) aus den in Abschnitt 5.1 diskutierten Drehimpulseigenfunktionen

$$\langle \vec{x}|E, l, m\rangle = \frac{1}{r}\, f_{k,l}(r)\, Y_{lm}(\hat{x}) \tag{18.2}$$

durch Superposition aufbauen und das Streuproblem damit auf gewöhnliche Differential- bzw. Integralgleichungen in der Radialvariablen r reduzieren. Aus (18.1) folgt, daß in der $|r, l, m\rangle$-Darstellung

$$\langle r', l', m'|V|r, l, m\rangle = \delta_{l'l}\, \delta_{m'm}\, \langle r'|V_l|r\rangle \tag{18.3}$$

gilt, wobei V_l nicht mehr von m abhängt, da V ja insbesondere mit den Stufenoperatoren $l_\pm$ kommutiert. Der Kern (8.22) in der Ortsdarstellung kann daher als

$$\langle \vec{x}\,'|V|\vec{x}\,\rangle = \frac{1}{r'r} \sum_l \frac{2l+1}{4\pi}\, \langle r'|V_l|r\rangle\, P_l(\hat{r}'\cdot\hat{r}) \tag{18.4}$$

geschrieben werden. Für lokales Potential, also Gl. (8.23) mit $v(\vec{x}\,) \to V(r)$, wird speziell

$$\langle r'|V_l|r\rangle = \delta(r'-r)\, V(r) \quad \textit{unabhängig}\ \text{von}\ l\,. \tag{18.5}$$

Verwendet man (18.4) in der Schrödinger-Gl. für die Lösungen (18.2), so ergibt sich mit dem k^2 von Gl. (16.1)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] f_{k,l}(r) - \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr'\, \langle r|V_l|r'\rangle\, f_{k,l}(r') = 0\,, \tag{18.6}$$

oder für das lokale Potential (18.5) die uns schon geläufige Dgl. (5.4),

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\,V(r)\right] f_{k,l}(r) = 0\,, \tag{18.7}$$

wozu die erste der Randbedingungen (5.7) hinzutritt.

Im *asymptotischen Bereich*, $r \gg R$, wo wir das Potential als hinreichend rasch abfallend voraussetzen, kann der Potentialterm in (18.6/18.7) vernachlässigt werden, so daß $f_{k,l}(r)$ dort die Dgl. (3.84) der Riccati-Bessel-Funktionen erfüllt. Da für diese die Funktionen (3.90) ein Fundamentalsystem bilden, muß sich f somit asymptotisch als

$$f_{k,l}(r) \;\to\; A_l(k)\,\hat{\jmath}_l(kr) + B_l(k)\,\hat{n}_l(kr) \qquad (r \gg R) \tag{18.8}$$

darstellen lassen. Betrachten wir überdies nur den Bereich, wo auch $kr \gg 1$ ist, so können hier $\hat{\jmath}_l$ und $\hat{n}_l$ ihrerseits durch die asymptotischen Darstellungen (3.92) ersetzt werden:

$$\begin{gathered} f_{k,l}(r) \;\to\; A_l(k)\,\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) + B_l(k)\,\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \\ (r \gg \max{(1/k, R)}\,)\,. \end{gathered} \tag{18.9}$$

Da bei Kontinuumslösungen ein Amplitudenfaktor unbestimmt bleibt und durch Konvention festzusetzen ist, können wir hier etwa die Größe

$$C_l(k) = \sqrt{[A_l(k)]^2 + [B_l(k)]^2}$$

ausklammern und per Konvention auf 1 normieren und zugleich eine Phasenverschiebung $\delta_l(k)$ durch

$$\frac{A_l}{\sqrt{{A_l}^2 + {B_l}^2}} = \cos\delta_l(k) \quad , \quad \frac{B_l}{\sqrt{{A_l}^2 + {B_l}^2}} = \sin\delta_l(k) \tag{18.10}$$

einführen; dann erhalten wir

$$\boxed{f_{k,l}(r) \;\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}\; \sin\left[kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right].} \tag{18.11}$$

Vergleich mit (3.92b) zeigt, daß $f_{k,l}(r)$ bis auf die Phasenverschiebung δ_l, die sog. *Streuphase der l-ten Partialwelle*, das asymptotische Verhalten der kräftefreien Radialfunktion $\hat{\jmath}_l(kr)$ hat. Die Streuwirkung des Potentials äußert sich im asymptotischen Bereich gerade in diesen von Partialwelle zu Partialwelle verschiedenen und mit der Einschußenergie variierenden Phasenverschiebungen gegenüber der freien Lösung.

In der Praxis muß $f_{k,l}(r)$ mit der Randbedingung $f_{k,l}(0) = 0$ in der Regel durch numerische Integration der Schrödinger-Gl. berechnet und die Streuphase δ_l durch Vergleich dieser Lösung mit (18.11) im asymptotischen Bereich bestimmt werden. Wegen $\sin(\alpha + n\pi) = (-)^n \sin\alpha$ ist jede Streuphase nur bis auf additive Vielfache von π definiert; man beseitigt diese Vieldeutigkeit in der Regel durch die *Konvention*, daß

$$\delta_l(k) \to 0 \quad \text{für} \quad k \to \infty, \text{ alle } l, \tag{18.12a}$$

$$\delta_l(k) \quad \text{stetig in} \quad 0 \leq k < \infty \tag{18.12b}$$

sein soll.

Da die so bestimmten Funktionen (18.2) gemeinsame Eigenfunktionen des Maximalsatzes H, $\vec{L}^2$ und L_z mit Energieeigenwerten des kontinuierlichen Spektrums sind, bilden sie in ihrer Gesamtheit nach dem Spektraltheorem ein vollständiges System im Teilraum $\mathcal{H}_C$. Alle Zustände in $\mathcal{H}_C$, insbesondere auch die Streulösung (16.14), müssen sich also nach dieser (uneigentlichen) Basis entwickeln lassen, und diese Entwicklung führt zur Berechnung der Streuamplitude (16.17).

Zunächst überlegen wir uns, daß bei kugelsymmetrischem Potential die Wellenfunktion (16.14) zylindrische Symmetrie um die Einfallsrichtung $\hat{k}$ besitzen, also nicht vom Azimutalwinkel um diese Achse herum abhängen wird. Wir wählen

$$\vec{e}_z = \hat{k} \quad , \quad \vec{k} = k \cdot \vec{e}_z \; ; \tag{18.13}$$

dann wird jener Azimutalwinkel gleich φ. Der kräftefreie Term in (16.14) wird

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{ikz} = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\, e^{ikr\cos\vartheta} \,,$$

fällt also bei Anwendung von $\partial/\partial\varphi$ heraus. Die Greensche Funktion hängt von den Winkeln in $\hat{x}$ und $\hat{x}'$ nur durch die Kombination $\hat{x}\cdot\hat{x}'$ ab, die durch Gl. (3.68) gegeben ist und die Eigenschaft (3.69) besitzt. Daher gibt Gl. (16.14) bei Anwendung von $l_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$:

$$\underbrace{\frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,\langle\vec{x}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle}_{=\langle\vec{x}|l_z|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle} = \int d^3x' \left[-\frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial\varphi'}\,\mathcal{G}^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}\,';k)\right] U(r')\,\langle\vec{x}\,'|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$$

und durch partielle Integration bezüglich φ' und Ausnutzen der Winkelunabhängigkeit des Potentialfaktors U:

$$\langle\vec{x}|l_z|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = \int d^3x'\,\mathcal{G}^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}\,';k)\,U(r')\,\langle\vec{x}\,'|l_z|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle \,. \tag{18.14}$$

Die Funktion $\langle\vec{x}|l_z|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$ ist also Lösung der zu (16.14) gehörenden *homogenen* Integralgleichung. Deren Lösung ist jedoch, nachdem wir uns auf eine eindeutig bestimmte Greensche Funktion festgelegt haben, ebenfalls eindeutig, nämlich die triviale:

$$\frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,\langle\vec{x}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle \equiv 0 \,. \tag{18.15}$$

Damit steht fest, daß bei Entwicklung von (16.14) nach Basisfunktionen (18.2) mit $\hat{k}$ als Quantisierungsachse nur Kugelfunktionen mit $m = 0$, wegen Gl. (3.56) also

Legendresche Polynome von $\hat{x} \cdot \hat{k}$ auftreten können:

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} c_l(k) \, f_{k,l}(r) \, P_l(\hat{x} \cdot \hat{k}) \, . \tag{18.16}$$

Zur Bestimmung der Koeffizienten $c_l(k)$ sowohl als auch zu einer Formel für die Streuamplitude gelangen wir, indem wir (18.16) im asymptotischen Bereich, Gln. (16.15a/b), betrachten. Die linke Seite von (18.16) ist dort durch (16.16) gegeben, wobei die Streuamplitude jetzt nur mehr von $|\vec{k}| = k$ und $\hat{x} \cdot \hat{k} = \cos \Theta$ abhängen kann:

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \;\to\; (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left\{ e^{ikr(\hat{k}\cdot\hat{x})} + f(k, \hat{x} \cdot \hat{k}) \, \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \, . \tag{18.17}$$

Wir setzen für die ebene Welle die Entwicklung (3.102) ein, wobei die Riccati-Bessel-Funktionen $\hat{\jmath}_l(kr)$ nun ihrerseits durch ihre Asymptotik (3.92b) zu ersetzen sind:

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \;\to\; (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \, i^l \, \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \, P_l(\hat{x} \cdot \hat{k}) + f(k, \hat{x} \cdot \hat{k}) \, \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \, . \tag{18.18a}$$

Die Streuamplitude f können wir ebenfalls als Entwicklung nach dem vollständigen System der P_l ansetzen,

$$f(k, \hat{x} \cdot \hat{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \, c_l(k) \, P_l(\hat{x} \cdot \hat{k}) \, , \tag{18.19}$$

und haben insgesamt

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \;\to\; \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \, (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left\{ i^l \, \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + a_l(k) \, \frac{e^{ikr}}{r} \right\} P_l(\hat{x} \cdot \hat{k}) \, . \tag{18.18b}$$

Für die rechte Seite von (18.16) andererseits erhalten wir mit (18.11) und der Umformung

$$\begin{aligned} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \;&=\; \frac{1}{2i}\left[e^{i(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))} \right] \\ &=\; e^{-i\delta_l(k)} \, \frac{1}{2i} \left[- e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} + e^{2i\delta_l(k)} \, e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right] \\ &=\; e^{-i\delta_l(k)} \left[\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) + i^{-l} \, \frac{1}{2i} \left(e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right) e^{ikr} \right] \end{aligned} \tag{18.20}$$

die Asymptotik

$$\sum_{l=0}^{\infty} c_l(k) \, e^{-i\delta_l(k)} \left\{ \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{r} + i^{-l} \, \frac{1}{2i} \left(e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} P_l(\hat{x} \cdot \hat{k}) \, . \tag{18.21}$$

In jeder „Partialwelle“ l können wir die Koeffizienten der beiden linear unabhängigen Funktionen $\sin(kr - l\frac{\pi}{2})$ und e^{ikr} getrennt mit denen von (18.18b) vergleichen und erhalten einerseits

$$c_l(k) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\,(2l+1)\,\frac{i^l}{k}\,e^{i\delta_l(k)}$$

und damit die Partialwellenentwicklung der Streuwellenfunktion,

$$\boxed{\langle\vec{x}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,i^l\,e^{i\delta_l(k)}\,\frac{f_{k,l}(r)}{kr}\,P_l(\hat{x}\cdot\hat{k}),} \tag{18.22}$$

und andererseits

$$\begin{aligned}(2l+1)(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\,a_l(k) &= c_l(k)\,e^{-i\delta_l(k)}\,i^{-l}\,\frac{1}{2i}\left(e^{2i\delta_l(k)}-1\right)\\ \Rightarrow\quad a_l(k) &= \frac{1}{2ik}\left[e^{2i\delta_l(k)}-1\right]\end{aligned} \tag{18.23}$$

und damit die *Partialwellenentwicklung der Streuamplitude*,

$$\boxed{f(k,\Theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l(k)}-1\right)\right]P_l(\cos\Theta).} \tag{18.24}$$

Aus ihr läßt sich bei Kenntnis der Phasenverschiebungen $\delta_l(k)$ in den einzelnen Partialwellen die Streuamplitude und damit der meßbare Wirkungsquerschnitt (17.19) berechnen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\big(E(k),\Theta\big) = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k)\,P_l(\cos\Theta)\right|^2 . \tag{18.25}$$

Schreibt man dies in der Form

$$\frac{1}{k^2}\sum_{ll'}(2l'+1)(2l+1)\,e^{i(\delta_l-\delta'_l)}\sin\delta_{l'}\sin\delta_l\,P_{l'}(\cos\Theta)\,P_l(\cos\Theta)\,,$$

so kann man den *totalen* Wirkungsquerschnitt (17.20) durch Ausführung der Winkelintegration im Koordinatensystem (18.13) gemäß

$$\int d^2\hat{k}' \;\to\; 2\pi\int_{-1}^{+1} d(\cos\Theta) \tag{18.26}$$

und Anwendung der Orthogonalität (3.58) der Legendre-Polynome berechnen; er hängt, wie zu erwarten, nur noch vom Betrag von $\vec{k}$ ab:

$$\sigma\big(E(k)\big) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k) \equiv \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l(k)\,. \tag{18.27}$$

Für die „Partialquerschnitte“ $\sigma_l(k)$ gilt wegen $|\sin\delta_l|\le 1$ eine obere Schranke,

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2}\,(2l+1)\sin^2\delta_l(k) \le \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\,, \tag{18.28}$$

die sogenannte *Unitaritätsschranke*[1]. Vergleicht man (18.27) mit dem Imaginärteil von (18.24) in der Vorwärtsrichtung $\Theta = 0$,

$$\mathrm{Im}\, f(k, \Theta = 0) = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k)\,, \tag{18.29}$$

so sieht man, daß die Partialwellendarstellung (18.24) mit reellen Phasen $\delta_l(k)$ das *optische Theorem* (17.25) *exakt erfüllt* – selbst dann, wenn die einzelnen δ_l z.B. nur näherungsweise berechnet sind. Auf dieser Eigenschaft beruht ihre Bedeutung.

Von praktischem Nutzen ist (18.24) natürlich nur, wenn *die im Prinzip unendliche l-Summe genügend rasch konvergiert*, so daß sie bei einer i.a. noch energieabhängigen Obergrenze $l_{\max}(k)$ in guter Näherung abgebrochen werden kann. Bei den kurzreichweitigen Potentialen, die wir hier voraussetzen, ist dies aber tatsächlich der Fall. Zur Abschätzung reicht in der Praxis bereits folgende halbklassische Plausibilitätsbetrachtung: Ein Wellenpaket, dessen mittlerer Abstand b von der Stoßachse („Stoßparameter", vgl. Skizze S.184!) größer als die ungefähre Ausdehnung R der Potentialregion ist, wird im wesentlichen ungestört in die Vorwärtsrichtung weiterlaufen und zur Streuung nicht beitragen. Die Drehimpulsverteilung in einem solchen Wellenpaket ist um den klassischen Wert

$$|\vec{L}|_{\mathrm{cl}} = b \cdot p = b \cdot \hbar \cdot k$$

konzentriert. Grob geschätzt (und insbesondere $l(l+1) \approx l^2$ setzend) erwartet man daher *wesentliche Beiträge zur Partialwellenentwicklung* – d.h. wesentlich von Null verschiedene Streuphasen – nur für Bahndrehimpulse mit

$$l \lessapprox l_{\max}(k) = kR\,. \tag{18.30}$$

Nach dieser Überlegung (die sich anhand der Integraldarstellung (18.32) weiter unten und der Asymptotik der $\hat{\jmath}_l$-Funktionen für $l \gg \rho$ auch strenger fassen läßt) erwartet man insbesondere, daß im *Grenzfall sehr niedriger Energie*, $kR \ll 1$, nur noch die s-Welle ($l = 0$) wesentlich zur Streuung beiträgt:

$$\begin{aligned} f(k,\Theta) &\approx \frac{1}{k}\, e^{i\delta_0(k)} \sin\delta_0(k) \qquad \text{unabhängig von } \Theta, \\ \frac{d\sigma}{d\Omega}\big(E(k),\Theta\big) &\approx \left[\frac{\sin\delta_0(k)}{k}\right]^2 \quad \text{wenn} \quad k \ll \frac{1}{R}\,. \end{aligned} \tag{18.31}$$

Die Winkelverteilung der Streuintensität wird also bei sehr niedrigen Energien isotrop.

Eine exakte Integraldarstellung der Streuphase läßt sich gewinnen, wenn man (18.22) in der Form

$$\langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{lm} i^l\, e^{i\delta_l(k)}\, \frac{f_{k,l}(r)}{kr}\, Y_{lm}(\hat{x})\, Y_{lm}^*(\hat{k})$$

[1] Die Bezeichnung rührt daher, daß der in $|k,l,m\rangle$-Darstellung diagonale Operator S mit der Matrix $\langle k', l', m' | S | k, l, m \rangle = \delta_{l'l}\, \delta_{m'm}\, \frac{\delta(k'-k)}{k'k}\, e^{2i\delta_l(k)}$ (der sog. *S-Matrix* des Systems) lauter reelle Eigenwerte vom Betrag 1 hat und somit ein unitärer Operator ist, wenn die δ_l reelle Phasen sind.

und die entsprechende Entwicklung für $e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} = \left[e^{ikr(\hat{x}\cdot\hat{x}')}\right]^*$ in die Integraldarstellung (16.17) der Streuamplitude einführt, die Winkelintegration mittels der Orthogonalität der Kugelfunktionen ausführt und die Koeffizienten der entstehenden Reihe mit den $a_l(k) = \frac{1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l$ von (18.23/18.24) identifiziert:

$$\sin\delta_l(k) = -\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\, \hat{\jmath}_l(kr)\left[\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]f_{k,l}(r)\,. \tag{18.32}$$

Sie erfüllt die Schranke $|\sin\delta_l| \leq 1$ i.a. nur, wenn $f_{k,l}(r)$ die *exakten* Radiallösungen sind; dividiert man aber durch $\cos\delta_l$ und ersetzt nicht $f_{k,l}(r)$, sondern $f_{k,l}(r)/\cos\delta_l$ durch seinen kräftefreien Wert $\hat{\jmath}_l(kr)$, so entsteht wegen der Unbeschränktheit von $|\tan\delta_l|$ eine sinnvolle *„Bornsche Näherung für die Streuphasen"*,

$$\tan\delta_l(k) \approx -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty dr\, [\hat{\jmath}_l(kr)]^2\, V(r)\,. \tag{18.33}$$

V

Näherungsverfahren der Quantenmechanik

Kapitel 19

Stationäre Störungsrechnung

19.1 Diskretes Spektrum: Nichtentarteter Fall

Die Methode der Störungsrechnung ist auf den Fall zugeschnitten, wo der Hamiltonoperator H des Systems sich von einem *„ungestörten" Hamiltonoperator* $H^{(0)}$, dessen Eigenwerte und Eigenvektoren bekannt sind,

$$H^{(0)}|n, k^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n, k^{(0)}\rangle \;, \tag{19.1}$$

nur um einen *„Störterm"* V unterscheidet, der als kleine Störung von $H^{(0)}$ behandelt werden kann. Man schreibt mit einem reellen Parameter λ

$$H = H^{(0)} + \lambda V = H(\lambda) \;, \tag{19.2}$$

wobei $\lambda = 0$ den ungestörten Fall, $\lambda = 1$ den realen Fall mit „eingeschalteter" Störung charakterisiert.

Der Grundgedanke der Störungsrechnung besteht darin, die interessierenden Zustandsvektoren und Meßgrößen als *Reihenentwicklungen nach Potenzen von* λ zu berechnen, die bei „kleinem" V bereits nach wenigen Gliedern brauchbare Näherungswerte liefern. Für den Bereich des kontinuierlichen Spektrums haben wir im Rahmen der Streutheorie derartige Entwicklungen bereits benutzt: Die durch Einsetzen von (17.26) in (16.17) entstehende Bornsche Reihe für die Streuamplitude f hat genau diesen Charakter, wenn wir $H^{(0)} = \vec{P}^2/2m$ setzen; die *Bornsche Näherung* (17.27/17.30) *insbesondere stellt die Streuamplitude „in niedrigster Näherung der Störungsrechnung"* dar.

In diesem Kapitel betrachten wir dagegen die Störung von Eigenwerten und Eigenvektoren (19.1) des *diskreten Spektrums* und beginnen mit dem einfachsten Fall, wo ein *Eigenwert* $E_n^{(0)}$ *von* $H^{(0)}$ *nicht entartet* ist, so daß der Entartungsindex k in (19.1) für dieses n nicht benötigt wird. Gesucht sind in diesem Falle der exakte Eigenvektor $|n\rangle$ und Eigenwert E_n,

$$\left(H^{(0)} + \lambda V\right)|n\rangle = E_n|n\rangle \;, \tag{19.3}$$

die sich aus $|n^{(0)}\rangle$ bzw. $E_n^{(0)}$ bei Einschalten der Störung „entwickeln":

$$E_n \;\rightarrow\; E_n^{(0)} \quad \text{für} \quad \lambda \rightarrow 0 \;, \tag{19.4}$$

$$|n\rangle \;\rightarrow\; |n^{(0)}\rangle \quad \text{für} \quad \lambda \rightarrow 0 \;. \tag{19.5}$$

Während wir $|n^{(0)}\rangle$ als normiert annehmen, erweist es sich für die Zwecke der Störungsrechnung als bequem, für $|n\rangle$ zunächst eine *„intermediäre Normierung“*

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = 1 \quad \big(= \langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \big) \tag{19.6}$$

zu fordern. Sie setzt natürlich voraus, daß $|n\rangle$ *zu* $|n^{(0)}\rangle$ *nicht orthogonal* ist; da aber $|n\rangle$ nach unseren Annahmen im Hilbertraum „nahe“ bei $|n^{(0)}\rangle$ liegt, ist dies keine wesentliche Einschränkung. Die Normierung $\langle n|n\rangle = 1$ kann, wenn nötig, nach Abschluß der Berechnung durch weitere Division mit einem entsprechenden Faktor erreicht werden.

Man setzt nun sowohl E_n als auch $|n\rangle$ als Potenzreihen in λ an,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots\,, \tag{19.7}$$
$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots\,, \tag{19.8}$$

geht hiermit in (19.3) ein, ordnet beiderseits nach Potenzen von λ und vergleicht die Koeffizienten der verschiedenen λ-Potenzen. Man erhält die Gleichungen

$$\big[H^{(0)} - E_n^{(0)}\big]\,|n^{(0)}\rangle = 0\,, \tag{19.9a}$$
$$\big[H^{(0)} - E_n^{(0)}\big]\,|n^{(1)}\rangle = \big(E_n^{(1)} - V\big)\,|n^{(0)}\rangle\,, \tag{19.9b}$$
$$\big[H^{(0)} - E_n^{(0)}\big]\,|n^{(2)}\rangle = \big(E_n^{(1)} - V\big)\,|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle\,, \tag{19.9c}$$

und allgemein in p-ter Ordnung ($p \geq 1$):

$$\big[H^{(0)} - E_n^{(0)}\big]\,|n^{(p)}\rangle = \big(E_n^{(1)} - V\big)\,|n^{(p-1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(p-2)}\rangle + \ldots + E_n^{(p)}|n^{(0)}\rangle\,. \tag{19.10}$$

Gl. (19.9a) ist die ungestörte Eigenwertgleichung (19.1) für das betrachtete nichtentartete Niveau. Die weiteren Gleichungen gestatten die *sukzessive Berechnung der Energiestörungen* $E_n^{(p)}$ *und „Zustandsbeimischungen“* $|n^{(p)}\rangle$ *für* $p = 1, 2, 3, \ldots$, wenn man die aus (19.6) nach Einsetzen von (19.8) folgenden Orthogonalitätsbedingungen

$$\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(3)}\rangle = \ldots = 0 \tag{19.11}$$

hinzunimmt. (Eine Zusatzbedingung ist offenbar unerläßlich, weil die zugehörigen homogenen Gleichungen ja eine Lösung, nämlich $|n^{(0)}\rangle$ besitzen, d.h. der Operator $H^{(0)} - E_n^{(0)} \cdot \mathbf{1}$ kein eindeutiges Inverses besitzt.) Um dies zu sehen, benutzen wir die beiden komplementären Projektoren

$$P_n^{(0)} = |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|\,, \tag{19.12a}$$
$$Q_n^{(0)} = \mathbf{1} - P_n^{(0)} = \sum_{m,k}(1 - \delta_{nm})\,|m, k^{(0)}\rangle\langle m, k^{(0)}| \tag{19.12b}$$

mit den Eigenschaften

$$P_n^{(0)} Q_n^{(0)} = Q_n^{(0)} P_n^{(0)} = 0 \quad , \quad P_n^{(0)} + Q_n^{(0)} = \mathbf{1}\,, \tag{19.13a}$$

$$\big[P_n^{(0)}, H^{(0)}\big] = \big[Q_n^{(0)}, H^{(0)}\big] = 0\,. \tag{19.13b}$$

Projektion von (19.10) auf den von $|n^{(0)}\rangle$ aufgespannten eindimensionalen Unterraum ergibt wegen

$$P_n^{(0)}|n^{(p)}\rangle = \delta_{p0}\,|n^{(0)}\rangle \tag{19.14}$$

direkt die Eigenwertstörung p-ter Ordnung,

$$0 = -P_n^{(0)}V|n^{(p-1)}\rangle + \sum_{q=1}^{p} E_n^{(q)}P_n^{(0)}|n^{(p-q)}\rangle$$

oder

$$E_n^{(p)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(p-1)}\rangle\,. \tag{19.15}$$

Projektion auf den komplementären Unterraum andererseits führt wegen

$$Q_n^{(0)}|n^{(p)}\rangle = (1-\delta_{p0})\,|n^{(p)}\rangle \tag{19.16}$$

auf die Bestimmungsgleichung

$$|n^{(p)}\rangle = \left(Q_n^{(0)}\,\frac{1}{E_n^{(0)}-H^{(0)}}\,Q_n^{(0)}\right)\left\{V|n^{(p-1)}\rangle - \sum_{q=1}^{p} E_n^{(q)}|n^{(p-q)}\rangle\right\} \tag{19.17}$$

für die Zustandskorrektur p-ter Ordnung, denn in diesem Komplementärraum besitzt ja $E_n^{(0)}\cdot\mathbf{1}-H^{(0)}$ das durch die runde Klammer gegebene eindeutige Inverse. Explizit bedeutet das

$$|n^{(p)}\rangle = \sum_{m,k}|m,k^{(0)}\rangle\,\frac{1-\delta_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\,\langle m,k^{(0)}|\sum_{q=1}^{p}[V\delta_{q1}-E_n^{(q)}]|n^{(p-q)}\rangle\,. \tag{19.18}$$

Die (m,k)-Summen in (19.12b) und (19.18) sind natürlich ganz oder teilweise durch Integrale zu ersetzen, wenn das von $E_n^{(0)}$ verschiedene Spektrum von $H^{(0)}$ ganz oder teilweise kontinuierlich ist.

In *erster Ordnung in V*, d.h. für $p=1$, erhält man aus (19.15) als Eigenwertverschiebung

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle,} \tag{19.19}$$

d.h. den *Erwartungswert der Störenergie im ungestörten Zustand*, und aus (19.18) als Zustandskorrektur

$$|n^{(1)}\rangle = \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)}-H^{(0)}}\left(V-E_n^{(1)}\right)|n^{(0)}\rangle$$

oder wegen $Q_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 0$ nach (19.16)

$$\boxed{\begin{aligned} |n^{(1)}\rangle &= \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}}\, V|n^{(0)}\rangle && (19.20a)\\ &= \sum_{m,k} |m,k^{(0)}\rangle\, \frac{1-\delta_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\, \langle m,k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle . && (19.20b)\end{aligned}}$$

In erster Ordnung in der Störung V werden also dem Zustand

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + O(\lambda^2)\\ &= \left[\mathbf{1} + \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}}\, V\right]|n^{(0)}\rangle + O(\lambda^2) \end{aligned} \tag{19.21}$$

die *von* $|n^{(0)}\rangle$ *verschiedenen Eigenvektoren mit Koeffizienten beigemischt, die durch* $\langle m,k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$ *gegeben sind, d.h. um so schwächer, je weiter im ungestörten Spektrum jene Zustände von* $|n^{(0)}\rangle$ *energetisch entfernt* sind, und um so stärker, je größer das Matrixelement der Störenergie zwischen $|n^{(0)}\rangle$ und dem beizumischenden Zustand ausfällt. Diese Formeln gehören zu den wichtigsten Näherungsgleichungen der Quantenmechanik.

In der Norm von (19.21),

$$\begin{aligned} \langle n|n\rangle &= \langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + 2\lambda\,\mathrm{Re}\,\overbrace{\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle}^{=0} + \lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + O(\lambda^2)\\ &= 1 + \lambda^2\langle n^{(0)}|V\frac{Q_n^{(0)}}{[E_n^{(0)} - H^{(0)}]^2}\, V|n^{(0)}\rangle + O(\lambda^2)\\ &= 1 + O(\lambda^2)\,, \end{aligned} \tag{19.22}$$

fallen die Terme erster Ordnung heraus, so daß *in dieser Ordnung der Zustand näherungsweise normiert* ist. Wird aus irgendwelchen Gründen ein exakt auf 1 normierter Zustand benötigt, so ist nach (19.22) mit

$$\left\{1 + \langle n^{(0)}|V\frac{Q_n^{(0)}}{[E_n^{(0)} - H^{(0)}]^2}\, V|n^{(0)}\rangle\right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{19.23}$$

zu multiplizieren.

In *zweiter Ordnung in* V folgt aus (19.15) und (19.20) die Energieverschiebung

$$E_n^2 = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|V\frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}}\, V|n^{(0)}\rangle \tag{19.24}$$

oder

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m,k}(1-\delta_{mn})\,\frac{|\langle n^{(0)}|V|m,k^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.} \tag{19.25}$$

Ihr Betrag läßt sich abschätzen, wenn man

$$\delta E_n = \min_{m \neq n} |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}| \,, \tag{19.26}$$

also den Abstand des energetisch nächstbenachbarten Niveaus von $E_n^{(0)}$, einführt:

$$\begin{aligned} |E_n^{(2)}| &\leq \frac{1}{\delta E_n} \sum_{m,k} \left| \langle n^{(0)}|V|m,k^{(0)}\rangle \right|^2 (1-\delta_{mn}) \\ &= \frac{1}{\delta E_n} \langle n^{(0)}|V(\mathbf{1} - P_n^{(0)})V|n^{(0)}\rangle \\ &= \frac{1}{\delta E_n} \left[\langle n^{(0)}|V^2|n^{(0)}\rangle - \left(\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle\right)^2 \right] . \end{aligned}$$

In der Klammer steht hier das Schwankungsquadrat $(\Delta V)_n^2$ von V im ungestörten Zustand:

$$|E_n^{(2)}| \leq \frac{(\Delta V)_n^2}{\delta E_n} \,. \tag{19.27}$$

Die so abgeschätzte Größe von $E_n^{(2)}$ kann als rohes Kriterium dafür dienen, ob eine über die erste Ordnung hinausgehende Rechnung angezeigt und lohnend ist.– Für die Zustandskorrektur gibt (19.17/19.18)

$$|n^{(2)}\rangle = \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} \left(V - E_n^{(1)}\right) |n^{(1)}\rangle \tag{19.28}$$

und mit (19.19/19.20) wird dies zu

$$\begin{aligned} |n^{(2)}\rangle &= \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} V \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} V|n^{(0)}\rangle \\ &\quad - \frac{Q_n^{(0)}}{[E_n^{(0)} - H^{(0)}]^2} V|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \\ &= \left\{ \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} V \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} - \frac{Q_n^{(0)}}{[E_n^{(0)} - H^{(0)}]^2} V P_n^{(0)} \right\} V|n^{(0)}\rangle \,. \end{aligned} \tag{19.29}$$

Diese Formeln haben Bedeutung vor allem in den Fällen, wo die Störung erster Ordnung – etwa infolge von Auswahlregeln, die durch Symmetrieeigenschaften von $H^{(0)}$ und V bedingt sind – verschwindet. Die Störungsformeln höherer Ordnung, deren Kompliziertheit schnell zunimmt, werden nur in Ausnahmefällen angewandt; das gesamte Störungsverfahren ist nur dann vorteilhaft, wenn die Reihenentwicklung nach λ (zumindest im Sinne einer Semikonvergenz und für begrenzte Bereiche des ungestörten Spektrums) schnell konvergiert.

19.2 Diskretes Spektrum: Entarteter Fall

Hat der Unterraum $\mathcal{H}_n^{(0)}$ zum ungestörten Eigenwert $E_n^{(0)}$ eine Dimension $d_n > 1$, so sind die vorstehenden Formeln nicht anwendbar: In (19.19) ist unklar, welche Linearkombinationen der d_n entarteten Zustände $|n, k^{(0)}\rangle$ zu verwenden und wie die entstehenden Matrixelemente zu interpretieren sind. Auch im Falle der sog. *Quasientartung*, wo $E_n^{(0)}$ zwar nichtentartet ist, aber die nächstbenachbarten Niveaus $E_m^{(0)}$ so nahe liegen, daß die Koeffizienten $\langle m, k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$ in (19.20b) nicht mehr klein sind, ist das Verfahren in niedrigen Ordnungen offensichtlich unbrauchbar. Man muß offenbar im entarteten oder quasientarteten Unterraum zunächst eine exaktere Behandlung von V vornehmen; erst dann kann die von V herrührende Kopplung an die energetisch „entfernteren“ Unterräume mit der Störungsmethode behandelt werden.

Der Grund für die Entartung des ungestörten Spektrums ist, wie wir in Kap. 12 betonten, im allgemeinen in der Invarianz von $H^{(0)}$ unter einer gewissen Symmetriegruppe $\mathcal{G}^{(0)}$ zu suchen. *Die Störung V verringert im allgemeinen diese Invarianz, so daß $H^{(0)} + V$ nur noch unter einer Untergruppe $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}^{(0)}$ invariant ist, oder bricht sie sogar völlig.* Im allgemeinsten Fall werden daher nach Einschalten der Störung d_n verschiedene Energieeigenwerte

$$E_{n,k} \quad ; \quad k = 1, 2, 3, \ldots, d_n \tag{19.30}$$

vorliegen („*Aufhebung der Entartung*“), so daß wir an Stelle von (19.7)

$$E_{n,k} = E_n^{(0)} + \lambda E_{n,k}^{(1)} + \lambda^2 E_{n,k}^{(2)} + \ldots \tag{19.31}$$

anzusetzen haben. Von den zugehörigen Zuständen $|n, k\rangle$ wissen wir nur, daß sie für $\lambda \to 0$ im Raum $\mathcal{H}_n^{(0)}$ liegen müssen, aber nicht, in welche Linearkombination der d_n Basisvektoren $|n, k'^{(0)}\rangle$ sie dort übergehen. Wir verfügen je Zustand nur über eine Bedingung an diese Linearkombination, die Normierungsbedingung, die wir analog zu (19.6) als

$$\langle n, k|P_n^{(0)}|n, k\rangle = 1 \qquad (k = 1, 2, 3, \ldots, d_n) \tag{19.32}$$

wählen, wobei der Projektor auf $\mathcal{H}_n^{(0)}$ nun durch

$$P_n^{(0)} = \sum_{k=1}^{d_n} |n, k^{(0)}\rangle\langle n, k^{(0)}| \tag{19.33}$$

gegeben ist. Wir setzen also an

$$|n, k\rangle = P_n^{(0)}|n, k\rangle + Q_n^{(0)}|n, k\rangle \tag{19.34}$$

mit

$$P_n^{(0)}|n, k\rangle = \sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle \left[c_n^{(0)}(k', k) + \lambda\, c_n^{(1)}(k', k) + \ldots\right], \tag{19.35a}$$

$$Q_n^{(0)}|n, k\rangle = \lambda\, Q_n^{(0)}|n, k^{(1)}\rangle + \lambda^2\, Q_n^{(0)}|n, k^{(2)}\rangle + \ldots\,, \tag{19.35b}$$

wobei die Bedingung (19.32) nun

$$\sum_{k'=1}^{d_n} \left| c_n^{(0)}(k', k) + \lambda\, c_n^{(1)}(k', k) + \ldots \right|^2 = 1 \quad \forall\, k \tag{19.36}$$

lautet. Nach Potenzen von λ geordnet ist also

$$\begin{aligned} |n, k\rangle \quad = \quad & \lambda^0 \sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(0)}(k', k) \\ & + \lambda^1 \underbrace{\sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(1)}(k', k) + Q_n^{(0)} |n, k^{(1)}\rangle}_{=|n,k^{(1)}\rangle} \\ & + \lambda^2 \underbrace{\sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(2)}(k', k) + Q_n^{(0)} |n, k^{(2)}\rangle}_{=|n,k^{(2)}\rangle} \\ & + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{19.37}$$

In jeder Störungsordnung wird nun nicht nur eine neue Komponente im Komplementärraum von $\mathcal{H}_n^{(0)}$ hinzugefügt, sondern auch die Linearkombination innerhalb $\mathcal{H}_n^{(0)}$ weiter korrigiert.

Nach Einsetzen in die Schrödinger-Gl. erhalten wir – analog zu (19.9/19.10) – zunächst in erster Ordnung in λ

$$[H^{(0)} - E_n^{(0)}] |n, k^{(1)}\rangle = \sum_{k'=1}^{d_n} [E_{n,k}^{(1)} - V] |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(0)}(k', k)\ , \tag{19.38}$$

sodann in zweiter Ordnung

$$[H^{(0)} - E_n^{(0)}] |n, k^{(2)}\rangle = [E_{n,k}^{(1)} - V] |n, k^{(1)}\rangle + E_{n,k}^{(2)} \sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(0)}(k', k) \tag{19.39}$$

usw. Hier fallen aber wegen (19.1) auf den linken Seiten die Komponenten in $\mathcal{H}_n^{(0)}$ heraus, und man hat

$$[H^{(0)} - E_n^{(0)}]\, Q_n^{(0)} |n, k^{(1)}\rangle \quad = \quad \sum_{k'=1}^{d_n} [E_{n,k}^{(1)} - V] |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(0)}(k', k)\ , \tag{19.40}$$

$$\begin{aligned} [H^{(0)} - E_n^{(0)}]\, Q_n^{(0)} |n, k^{(2)}\rangle \quad = \quad & [E_{n,k}^{(1)} - V]\, Q_n^{(0)} |n, k^{(1)}\rangle \\ + \sum_{k'=1}^{d_n} \Big\{ [E_{n,k}^{(1)} - V] |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(1)}(k', k) & + E_{n,k}^{(2)}\, |n, k'^{(0)}\rangle\, c_n^{(0)}(k', k) \Big\} \end{aligned} \tag{19.41}$$

usw.

Projizieren wir nun als ersten Schritt (19.40) auf $\mathcal{H}_n^{(0)}$, so erhalten wir für alle k'' und $k = 1, \ldots, d_n$:

$$\sum_{k'=1}^{d_n} \left\{ E_{n,k}^{(1)} \, \delta_{k''k'} - \langle n, k''^{(0)} | V | n, k'^{(0)} \rangle \right\} c_n^{(0)}(k', k) = 0 \, . \tag{19.42}$$

Die Energiestörungen erster Ordnung sind also zu berechnen als Eigenwerte eines d_n-dimensionalen Matrix-Eigenwertproblems für die „Störmatrix" $\langle n, k''^{(0)} | V | n, k'^{(0)} \rangle$, d.h. die Matrix des Störungs-Hamiltonoperators im entarteten ungestörten Unterraum $\mathcal{H}_n^{(0)}$. Nach den Regeln der Matrixalgebra ergeben sie sich als Wurzeln der „Säkulargleichung"

$$D_n(E) \equiv \det \left\{ E \, \delta_{k''k'} - \langle n, k''^{(0)} | V | n, k'^{(0)} \rangle \right\} = 0 \, . \tag{19.43}$$

Für jeden der durch k numerierten Eigenwerte $E = E_{n,k}^{(1)}$ können die Koeffizienten der zugehörigen Linearkombination nullter Ordnung, $c_n^{(0)}(k', k)$, aus dem homogenen Gleichungssystem (19.42) bis auf die Normierung berechnet werden. (Dabei nehmen wir zunächst an, daß die Eigenwerte alle verschieden sind, d.h. der Rangabfall der Matrix in (19.42) gleich eins ist; die Entartung wird dann in erster Störungsordnung bereits vollständig aufgehoben.) Die Normierung ist nach (19.36) durch

$$\sum_{k'=1}^{d_n} |c_n^{(0)}(k', k)|^2 = 1 \tag{19.44}$$

gegeben. Es ist für das Verfahren typisch, daß die *Linearkombinationen n-ter Ordnung in $\mathcal{H}_n^{(0)}$ zu den exakten Eigenvektoren, die sog. „richtigen" oder „angepaßten" Linearkombinationen, erst nach Berechnung der Energiestörung $(n+1)$-ter Ordnung angegeben* werden können. Wir bezeichnen diese Linearkombinationen, die in der ersten Zeile von (19.37) auftreten, mit

$$|\varphi_{n,k}^{(0)}\rangle = \sum_{k'=1}^{d_n} |n, k'^{(0)}\rangle \, c_n^{(0)}(k', k) \, . \tag{19.45a}$$

Sie sind o.B.d.A. orthonormiert,

$$\langle \varphi_{n,q}^{(0)} | \varphi_{n,p}^{(0)} \rangle = \delta_{qp} \, , \tag{19.45b}$$

so daß die $c_n^{(0)}(k', k) = \langle n, k'^{(0)} | \varphi_{n,k}^{(0)} \rangle$ eine unitäre Matrix bilden. (19.42) lautet in dieser Bezeichnung

$$P_n^{(0)} [E_{n,p}^{(1)} - V] |\varphi_{n,p}^{(0)}\rangle = 0 \quad , \quad p = 1, \ldots, d_n \, . \tag{19.46}$$

Die Projektion von (19.40) auf den Komplementärraum zu $\mathcal{H}_n^{(0)}$, wo $E_n^{(0)} \cdot \mathbf{1} - H^{(0)}$ invertierbar ist, ergibt dann gemäß

$$Q_n^{(0)} |n, k^{(1)}\rangle = \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} \, V |\varphi_{n,k}^{(0)}\rangle \tag{19.47}$$

den $Q^{(0)}$-Raum-Anteil der *Zustandskorrektur* $|n, k^{(1)}\rangle$ *erster Ordnung in* λ. Für den $\mathcal{H}_n^{(0)}$-Anteil dieser Zustandskorrektur werden noch die Koeffizienten $c_n^{(1)}(k', k)$ benötigt, die, wie betont, erst bei der Berechnung der Energiestörungen zweiter Ordnung anfallen. Projektion von (19.41) auf ein $\langle\varphi_{n,q}^{(0)}|$ gibt in der Tat

$$0 = \; - \langle\varphi_{n,q}^{(0)}|VQ_n^{(0)}|n, p^{(1)}\rangle + E_{n,p}^{(2)}\,\delta_{qp} + [E_{n,p}^{(1)} - E_{n,q}^{(1)}] \cdot \sum_{k'=1}^{d_n} c_n^{(0)*}(k', q)\, c_n^{(1)}(k', p)\,,$$

also wegen (19.47)

$$\begin{aligned} E_{n,p}^{(2)}\,\delta_{qp} + [E_{n,p}^{(1)} - E_{n,q}^{(1)}] \cdot \sum_{k'=1}^{d_n} c_n^{(0)*}(k', q)\, c_n^{(1)}(k', p) \\ = \langle\varphi_{n,q}^{(0)}|V \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} V|\varphi_{n,p}^{(0)}\rangle\,. \end{aligned} \tag{19.48}$$

Insbesondere folgt für $p = q$

$$E_{n,p}^{(2)} = \langle\varphi_{n,p}^{(0)}|V \frac{Q_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - H^{(0)}} V|\varphi_{n,p}^{(0)}\rangle\,, \tag{19.49}$$

während für $p \neq q$ – zusammen mit der nächsten Ordnung der Normierungsbedingungen (19.36) – ein inhomogenes lineares Gleichungssystem für die $c_n^{(1)}$ resultiert.

Trifft unsere Annahme, daß die $E_{n,k}^{(1)}$ bereits sämtlich nicht mehr entartet seien, nicht zu, ist also etwa ein Eigenwert $E_n^{(0)} + E_{n,k}^{(1)}$ noch g-fach entartet ($g < d_n$), so ergibt der „diagonale“ Teil von (19.48) keine Bestimmungs-, sondern eine Eigenwertgleichung für die $E_{n,k}^{(2)}$, die eine erneute Matrixdiagonalisierung in dem g-dimensionalen Unterraum notwendig macht, usw.

Natürlich kommt es vor, daß *gewisse Entartungen in allen Ordnungen bestehenbleiben.* Die Ursache ist dann, wie schon betont, daß V die Symmetrien von $H^{(0)}$ nicht völlig bricht, sondern selbst noch eine Invarianzgruppe $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}^{(0)}$ besitzt. Im Spin-Bahn-Kopplungsproblem (14.30) etwa kommutiert $H^{(0)} = \vec{P}^2/2m + V(r)$ mit $\vec{L}$ und $\vec{S}$ getrennt; die Eigenwerte besitzen daher (mindestens) eine $2(2l+1)$-fache Entartung. Dagegen kommutiert $H = H^{(0)} + V_{LS}(\vec{\sigma} \cdot \vec{l}\,)$ nur noch mit $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$; die exakten Eigenwerte (und auch bereits die Störungen erster Ordnung) zerfallen nach (14.38) in zwei Gruppen mit $j_1 = l + \frac{1}{2}$ bzw. $j_2 = l - \frac{1}{2}$, die jeweils noch den Entartungsgrad $2j_1 + 1 = 2l + 2$ bzw. $2j_2 + 1 = 2l$ haben. Die „richtigen“ Linearkombinationen nullter Ordnung sind hier ohne Lösung des Diagonalisierungsproblems (19.42) direkt angebbar: Es sind die drehimpulsgekoppelten Funktionen (14.34) bzw. (14.36) (mit den Radialfunktionen des ungestörten Falles); in ihnen ist wegen (14.31) die Störmatrix von (19.42) bereits diagonal und gibt die Energiestörungen erster Ordnung,

$$E_{j,l}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cl} +l & \text{für } \; l = j - \frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{für } \; l = j + \frac{1}{2} \end{array} \right\} \cdot \int_0^\infty dr\; [R_l^{(0)}(r)]^2 V_{LS}(r)\,. \tag{19.50}$$

Dieses Beispiel zeigt den allgemeinen Sachverhalt, daß sich *durch Vorweg-Berücksichtigung der Symmetrien von V die Störmatrix oft weitgehend oder sogar vollständig ausreduzieren* und damit die Bestimmung der angepaßten Linearkombinationen erheblich vereinfachen läßt.

Kapitel 20

Zeitabhängige Störungsrechnung

20.1 Übergangswahrscheinlichkeit in Störungstheorie

Die zeitabhängige Störungsrechnung behandelt das Problem der nichtstationären Zeitentwicklung eines ursprünglich durch $H^{(0)}$ beschriebenen „ungestörten" Systems beim Hinzutreten einer kleinen, im allgemeinen zeitabhängigen Störung $V = V(t) = V_S(t)$. (Der Index S weist wieder darauf hin, daß wir zunächst im Schrödinger-Bild der Zeitentwicklung denken.) Insbesondere interessiert die Frage, mit welchen Wahrscheinlichkeiten $w(t)$ das System in einem der Eigenzustände des ungestörten Problems (19.1) für Zeiten $t > t_0$ angetroffen wird, wenn es zu einem Anfangszeitpunkt t_0 in einem derartigen Zustand, etwa

$$|i^{(0)}\rangle = |n_i, k_i^{(0)}\rangle \ , \tag{20.1}$$

präpariert wurde.

Da nach Voraussetzung die sämtlichen Eigenvektoren und Eigenwerte des zeitunabhängigen Hamiltonoperators H_0 und damit der ungestörte Zeitentwicklungsoperator

$$U_0(t - t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H^{(0)}} \tag{20.2}$$

bekannt sind, wird man zweckmäßig das *Wechselwirkungsbild* von Abschnitt 10.4 verwenden. Dort ist nach (10.60/10.62) der Zustand des gestörten Systems durch

$$|\psi_W(t)\rangle = U_W(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{20.3}$$

gegeben, wobei $|\psi(t_0)\rangle$ mit dem Zustand im Schrödingerbild zu diesem Zeitpunkt zusammenfällt; der Zustand des ungestörten Systems dagegen ist zeitlich konstant, im vorliegenden Falle also stets gleich (20.1). Die Wahrscheinlichkeit, das gestörte System zur Zeit $t > t_0$ in einem gewissen „Endzustand"

$$|f^{(0)}\rangle = |n_f, k_f^{(0)}\rangle \tag{20.4}$$

des ungestörten Spektrums vorzufinden, ist

$$w_{fi}(t) = \left|\langle f^{(0)}|\psi_W(t)\rangle\right|^2 = \left|\langle f^{(0)}|U_W(t, t_0)|i^{(0)}\rangle\right|^2 \ . \tag{20.5}$$

Dabei ist nach dem zu (10.66) Gesagten der Evolutionsoperator $U_W(t,t_0)$ aus der Integralgleichung

$$U_W(t,t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_W(t')\, U_W(t',t_0) \tag{20.6}$$

mit

$$V_W(t') = e^{\frac{i}{\hbar}(t'-t_0)H^{(0)}}\, V_S(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t'-t_0)H^{(0)}} \tag{20.7}$$

zu berechnen. Die zeitabhängige Störungsrechnung besteht in der Verwendung der *iterativen Lösung (Dyson-Reihe)* (10.67) *dieser Integralgleichung in niedriger Ordnung bezüglich* $V_S(t)$. Wir beschränken uns hier auf die Näherungslösung erster Ordnung,

$$U_W(t,t_0) \approx \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_W(t')\,. \tag{20.8}$$

Für die „*Übergangswahrscheinlichkeit*" (20.5) ergibt sie

$$w_{fi}(t) \approx \left|\langle f^{(0)}|\,\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{-\frac{i}{\hbar}(t'-t_0)[E_i^{(0)}-E_f^{(0)}]}\, V_S(t')\,|i^{(0)}\rangle\right|^2,$$

also für $f \neq i$ wegen der Orthogonalität der ungestörten Zustände

$$w_{fi}(t) \approx \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{-i\,\omega_{if}(t'-t_0)}\,\langle f^{(0)}|V_S(t')|i^{(0)}\rangle\right|^2, \tag{20.9}$$

mit den „Übergangsfrequenzen"

$$\omega_{if} = \frac{E_i^{(0)} - E_f^{(0)}}{\hbar}\,. \tag{20.10}$$

Bei Vertauschung von i und f geht wegen der Hermitezität von $V_S(t)$ das Integral in sein Konjugiert-Komplexes über, so daß *in dieser Näherung*

$$w_{if}(t) = w_{fi}(t) \tag{20.11}$$

gilt. (Diese Relation hat *nichts* mit Zeitumkehrinvarianzeigenschaften zu tun, wie schon daraus hervorgeht, daß sie für beliebige Zeitabhängigkeit von $V_S(t)$ gilt.) – Wie beim Aufbau der Streutheorie haben wir hier idealisierende Voraussetzungen gemacht, nämlich Präparation eines reinen Anfangs- und Endzustandes, von denen man sich bei realistischen Anwendungen zu lösen hat, indem man an der Form

$$w_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, e^{-i\,\omega_{if}(t_1-t_2)}\,\langle f^{(0)}|V_S(t_1)|i^{(0)}\rangle\langle i^{(0)}|V_S(t_2)|f^{(0)}\rangle \tag{20.12}$$

von (20.9) die Ersetzungen

$$\begin{array}{lcl} |i^{(0)}\rangle\langle i^{(0)}| & \to & \text{gemischter Zustand:} \\ & & W_i = \sum_{n,k} p_{n,k}\,|n,k^{(0)}\rangle\langle n,k^{(0)}| \\ \langle f^{(0)}|\ldots|f^{(0)}\rangle & \to & \mathrm{Tr}\,\Pi_d\ldots\ \text{ mit } \Pi_d = \text{die Endzustands-} \\ & & \text{detektion repräsentierender Projektor} \end{array} \tag{20.13}$$

(*und entsprechend für den Phasenfaktor* $e^{-i\,\omega_{if}(t_1-t_2)}$) ausführt, d.h. eine Mittelung über die Anfangs- und Summation über die Endzustände vornimmt, die durch Präparation bzw. Detektion nicht aufgelöst werden.

20.2 Zeitlich konstante und periodische Störung

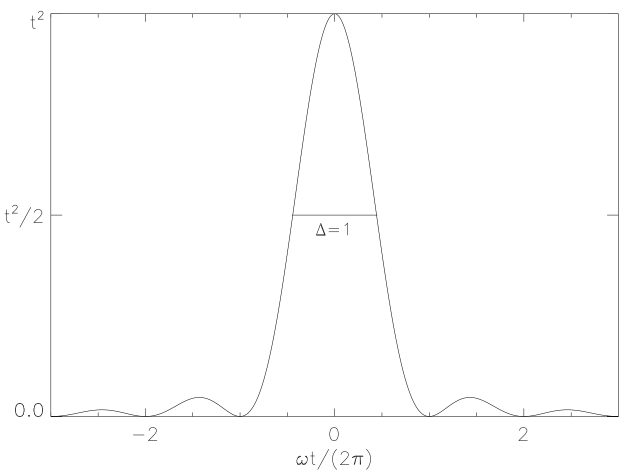
Ein bei Reaktionen und Zerfällen häufig vorliegender Fall ist der der zeitlich konstanten Störung, $V_S(t) = V_S = const.$ Hier gibt (20.9)

$$w_{fi}(t) \approx \frac{1}{\hbar^2} \left|\langle f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2 \left| \int_0^{t-t_0} dt'\, e^{-i\,\omega_{if} t'} \right|^2 \tag{20.14a}$$

oder

$$\begin{aligned} w_{fi}(t) &\approx \frac{1}{\hbar^2} \left|\langle f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2 \frac{2\,(1-\cos\omega_{if} t)}{{\omega_{if}}^2} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left|\langle f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2 \left[\frac{2\sin(\frac{1}{2}\omega_{if} t)}{\omega_{if}}\right]^2 . \end{aligned} \tag{20.14b}$$

Das qualitative Verhalten der zuletzt geschriebenen Funktion zeigt die Skizze:



Die Funktion $\left(\frac{2\sin\frac{\omega t}{2}}{\omega}\right)^2$

Sie hat ein ausgeprägtes Maximum der Höhe t^2 und der Halbwertsbreite $\Delta(\omega t/2\pi) = 1$, d.h. $\Delta\omega = 2\pi/t$, im Bereich $-1 \le \omega t/2\pi \le +1$ um den Nullpunkt der Variablen ωt herum und ist außerhalb dieses Bereichs klein; die Struktur wird für $t \to \infty$ immer ausgeprägter, wobei die Fläche unter dem zentralen Maximum gemäß

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(\frac{2\sin\frac{\omega t}{2}}{\omega}\right)^2 = 2\pi t \tag{20.15}$$

anwächst. Für große Zeiten erfolgen also Übergänge im wesentlichen nur in ein enges „Energieband" $\Delta E_f = \hbar\omega_f \approx 2\pi\hbar/t$ um $E_i^{(0)}$ herum; die Übergange *„erhalten die ungestörte Energie bis auf* $2\pi\hbar/t$", und die Gesamtübergangswahrscheinlichkeit in dieses Band wächst gemäß (20.15) zeitlich linear an. Es ist deshalb sinnvoll, eine *„Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit"* oder *„Übergangsrate"*

$$P_{fi} = \lim_{t\to\infty} \frac{dw_{fi}}{dt}(t) \tag{20.16}$$

zu definieren, die *für große t zeitlich konstant* wird. In diesem Grenzfall wird

$$\lim_{t\to\infty}\left\{\frac{1}{2\pi t}\left(\frac{2\sin\frac{\omega t}{2}}{\omega}\right)^2\right\} = \delta(\omega) \tag{20.17}$$

eine Grenzwertdarstellung der δ-Distribution, wie aus obiger Diskussion der Funktion unmittelbar ersichtlich ist, und man erhält

$$w_{fi}(t) \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} \frac{2\pi t}{\hbar^2}\left|\langle f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2 \delta(\omega_{if}) \,. \tag{20.18}$$

Die δ-Distribution, die die in diesem Grenzfall eintretende exakte *Energieerhaltung* ausdrückt, zeigt zugleich, daß das Resultat nur bei Integration über ein Kontinuum von Endzuständen um $E_f^{(0)}$ herum Sinn ergibt, d.h. bei *Betrachtung von Übergängen in ein Kontinuum von Endzuständen, in das die Ausgangszustände (wegen der Energieerhaltung) eingebettet liegen müssen.* Wir spezifizieren daher jetzt die Endzustände (20.4) genauer als

$$|f^{(0)}\rangle = |\nu_f, \kappa_f^{(0)}\rangle \quad , \quad E_f^{(0)} = E(\nu_f)^{(0)} \,, \tag{20.19}$$

wobei ν_f die energiebestimmenden, κ_f die Entartungsquantenzahlen (von denen $E_f^{(0)}$ nicht abhängt) zusammenfaßt, und schreiben den die Messung darstellenden Projektor genauer als

$$\int_{\Delta\nu_f} d\nu_f \int_{\Delta\kappa_f} d\kappa_f \, |\nu_f, \kappa_f^{(0)}\rangle\langle\nu_f, \kappa_f^{(0)}| \,, \tag{20.20a}$$

wobei das Intervall $\Delta\nu_f$ den Energiewert $E_i^{(0)}$ enthält:

$$\Delta\nu_f = \text{Intervall im } \nu_f\text{-Raum um } E(\nu_f)^{(0)} = E_i^{(0)} \text{ herum} \tag{20.20b}$$

Mit

$$\delta(\omega_{if}) = \delta\left(\frac{E(\nu_f)^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar}\right) = \hbar\,\delta\Big(E(\nu_f)^{(0)} - E_i^{(0)}\Big)$$

lautet die „realistische" Version von (20.18) dann

$$P_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\int_{\Delta\nu_f} d\nu_f \int_{\Delta\kappa_f} d\kappa_f \,\delta\Big[E(\nu_f)^{(0)} - E_i^{(0)}\Big]\,\left|\langle\nu_f, \kappa_f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2 \,. \tag{20.21}$$

Für kleine Intervalle von ν_f, κ_f kann das von diesen Quantenzahlen kontinuierlich abhängende Betragsquadrat aus dem Integral herausgezogen werden. Die Größe

$$\rho_f(E) = \int\limits_{\substack{\text{kleines } \Delta\nu_f \\ \text{um } E(\nu_f)^{(0)}=E}} d\nu_f \int\limits_{\Delta\kappa_f} d\kappa_f \,\delta\big[E(\nu_f)^{(0)} - E\big] \tag{20.22}$$

stellt anschaulich die *Dichte der ungestörten Endzustände in der Energieskala* dar. Damit erhalten wir die *Formel für die asymptotisch konstante Übergangsrate bei zeitunab-*

hängiger Störung,

$$\boxed{P_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\rho_f(E_i^{(0)})\,\left|\langle f^{(0)}|V|i^{(0)}\rangle\right|^2\,,} \tag{20.23}$$

die wegen ihrer vielseitigen Anwendbarkeit insbesondere auf Streu-, Zerfalls- und Produktionsprozesse von Fermi als *„Goldene Regel"* bezeichnet wurde.

Als Illustration zu (20.22) betrachten wir etwa einen *Zweikörperzerfall* eines anfangs im Laborsystem ruhenden (zusammengesetzten oder elementaren) Teilchens, dessen innere Quantenzahlen durch $i^{(0)}$ beschrieben seien. Der Endzustand $|f^{(0)}\rangle$ ist hier charakterisiert durch diskrete „innere" Quantenzahlensätze f_1 und f_2 für die beiden Zerfallsfragmente 1 und 2 einschließlich deren Energieeigenwerten ϵ_1, ϵ_2 sowie durch ihren asymptotischen Relativimpuls $\hbar\vec{k}_f$. Er hat die Energie

$$E_f^{(0)} = E_f(k_f) = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \frac{\hbar^2 k_f^2}{2\mu}\,, \tag{20.24}$$

wobei μ die reduzierte Masse der Fragmente ist. Hier besteht offenbar der oben allgemein mit ν_f bezeichnete Quantenzahlensatz nur aus dem Betrag k_f, während das dortige κ_f aus f_1, f_2 und der Richtung $\hat{k}_f$ besteht. Für die Gesamtzerfallsrate wird man über alle möglichen (f_1, f_2)-Sätze summieren (z.B. Spineinstellungen der Fragmente) und $\hat{k}_f$ über alle Richtungen integrieren. Damit wird der „Phasenraumfaktor" (20.22) für diesen Fall zu

$$\begin{aligned}
\rho_f(E_i^{(0)}) &= \int\limits_{\substack{\Delta k_f \text{ um}\\ E_f(k_f)=E_i^{(0)}}} dk_f\, k_f^2\,\delta\left[\frac{\hbar^2 k_f^2}{2\mu} - (E_i^{(0)} - \epsilon_1 - \epsilon_2)\right]\cdot \overbrace{\int d^2\hat{k}_f}^{=4\pi} \sum_{f_1,f_2}\ldots \\
&= 4\pi\,\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_{\Delta k_f} dk_f\,\frac{k_f^2}{2k_f}\,\delta\left[k_f - \sqrt{\frac{2\mu Q}{\hbar^2}}\right]\cdot\sum_{f_1,f_2}\ldots \\
&= 4\pi\,\frac{\mu k_f(Q)}{\hbar^2}\sum_{f_1,f_2}\ldots\,,
\end{aligned} \tag{20.25}$$

wobei

$$Q = E_i^{(0)} - (\epsilon_1 + \epsilon_2) \tag{20.26}$$

die beim Zerfall freiwerdende Energie und $k_f(Q) = \sqrt{2\mu Q/\hbar^2}$ der durch sie festgelegte asymptotische Relativimpuls der Fragmente ist; die Schreibweise deutet an, daß die f_1-f_2-Summation noch am Betragsquadrat des Matrixelements in (20.23) auszuführen ist, denn in dieser Formel waren ja diskrete Quantenzahlen der Einfachheit halber nicht berücksichtigt.

Abschließend sei noch der Fall einer *zeitlich periodischen Störenergie* $V(t)$ der Periode $T = 2\pi/\omega$ betrachtet, die der Hermitezität wegen als

$$V(t) = A\,e^{i\omega t} + A^\dagger\,e^{-i\omega t} \tag{20.27}$$

anzusetzen ist. Dieser Fall liegt z.B. stets bei der Störung eines Atoms oder Moleküls durch eine äußere, monochromatische ebene Welle vor. (20.9) gibt hier

$$\begin{aligned} w_{fi}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \Big| \langle f^{(0)}|A|i^{(0)}\rangle \int_0^{t-t_0} dt'\; e^{-i(\omega_{if}-\omega)t'} \\ &\qquad + \langle f^{(0)}|A^\dagger|i^{(0)}\rangle \int_0^{t-t_0} dt'\; e^{-i(\omega_{if}+\omega)t'} \Big|^2 . \end{aligned} \tag{20.28}$$

Dieses Ergebnis ist (20.14a) sehr ähnlich und erlaubt daher die Anwendung derselben Schlußweisen: Für $t \to \infty$ gibt der erste Term wesentliche Beiträge nur für $\omega_{if} - \omega$ nahe (genauer: in einem Energieband der Breite $2\pi/t$ um) Null, der zweite Term nur für $\omega_{if} + \omega$ nahe bei Null. Für $t \gg 2\pi/\omega$ überlappen diese Bänder nicht mehr wesentlich, so daß der Interferenzterm von (20.28) wegfällt und die Übergangswahrscheinlichkeit bei Endzuständen mit den Energien

$$E_f^{(0)} = E_i^{(0)} - \hbar\omega \quad , \quad E_f^{(0)} = E_i^{(0)} + \hbar\omega \tag{20.29}$$

„resonanzartig“ konzentriert ist – mit ansonsten zu (20.22/20.23) völlig analogen, konstanten Übergangsraten. Dies entspricht der *Emission bzw. Absorption der Energie* $\hbar\omega$ durch das ungestörte System.