

Quantenmechanik I

HS 10

G.M. Graf

ETH Zürich

Inhaltsverzeichnis

1	Die frühe Quantentheorie	1
1.1	Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)	1
1.2	Licht als Teilchen (Einstein 1905)	5
1.3	Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)	6
1.4	Die Quantisierung der Wirkung (Sommerfeld 1915)	8
1.5	Emission und Absorption (Einstein 1917)	11
1.6	Licht als Teilchen (Compton 1922)	13
1.7	Teilchen als Welle (de Broglie 1923)	13
2	Wellen- und Matrizenmechanik	15
2.1	Wellenmechanik und Schrödinger-Gleichung	15
2.2	Matrizenmechanik und Heisenberg-Gleichung	18
3	Die allgemeine Form der Quantenmechanik	22
3.1	Darstellung im Hilbertraum	22
3.2	Das freie Teilchen	30
3.3	Der harmonische Oszillator	32
3.4	Die WKB-Näherung	35
3.5	Symmetrien und Erhaltungssätze	39
4	Das Zweikörperproblem	41
4.1	Schwerpunkts- und Relativbewegung	41
4.2	Das Wasserstoff-Atom	43

5	Streutheorie	46
5.1	Die Greensche Funktion	46
5.2	Streuzustände	47
5.3	Das optische Theorem	49
5.4	Zerlegung in Partialwellen	50
5.5	Resonanzen	51
6	Näherungsmethoden	54
6.1	Störung des Eigenwertproblems	54
6.2	Variationsmethoden	57
6.3	Das Beispiel Helium	59
7	Drehimpuls und Spin	63
7.1	Symmetrien im Hilbertraum	63
7.2	Drehungen	66
7.3	Irreduzible Darstellungen	68
7.4	Einschub: Zusammengesetzte Quantensysteme	70
7.5	Addition von Drehimpulsen	71
7.6	Die quantenmechanische Drehgruppe $SU(2)$	72
7.7	Der Spin des Elektrons	74
A	Anhang: Selbstadjungierte Operatoren	78
B	Anhang: Kugelfunktionen	95
C	Anhang: Die Methode der stationären Phase	99
D	Anhang: Symmetrien in der Quantenmechanik	101
	Literaturhinweise und Index	104

Dank gebührt Prof. W. Hunziker, auf dessen Skript das vorliegende basiert, z.T. durch Verwendung des Quelltextes; ferner Herrn I. Lenzo und Frau A. Schultze, sowie weiteren Mitarbeitern für die Textverarbeitung mehrerer Kapitel und Anhänge.

Erste Ausgabe: WS 04/05.

1 Die frühe Quantentheorie

1.1 Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)

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

Das zunächst freie elektromagnetische (e.m.) Feld genügt auf Grund der Maxwell-Gleichungen der Wellengleichung

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

und der Nebenbedingung

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0, \quad (1.1)$$

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

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

führt auf

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

und weiter

$$\ddot{f} = -\omega^2 f, \quad -\Delta \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} \quad (1.2)$$

für eine Konstante $\omega^2 (\geq 0)$: Dies sind die Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators, bzw. die Eigenwertgleichung für $-\Delta$. Auf dem Rand des Hohlraums sollen die Randbedingungen

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

ideal leitender Wände gelten. Wählt man diesen einfachheitshalber als den Würfel $0 \leq x_i \leq L$, ($i = 1, 2, 3$), so lauten die Eigenschwingungen

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

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

$$k_i = \frac{\pi}{L} n_i, \quad n_i \text{ ganz, } \geq 0, \text{ höchstens ein } n_i = 0. \quad (1.3)$$

Mit $\vec{E} = (E_1, E_2, E_3)$ und $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ verlangt (1.1) $\vec{E} \cdot \vec{k} = 0$: zu jedem \vec{k} gibt es zwei linear unabhängige Eigenschwingungen mit Eigenfrequenzen $\omega = c \cdot |\vec{k}|$. Die Zahl der Eigenschwingungen $\leq \omega$ ist nach (1.3) asymptotisch

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

für grosse ω , wobei $V = L^3$, bzw.

$$\frac{dN}{d\omega} = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} . \quad (1.4)$$

Planck stellt sich die Materie vor als bestehend aus Oszillatoren (“Resonatoren”) verschiedener Frequenzen ω_0 , welche die sonst unabhängigen e.m. Schwingungen ins Gleichgewicht bringen. Er geht dabei in zwei Schritten vor:

- i) Die Resonatoren der Frequenz ω_0 werden durch das e.m. Feld angeregt und strahlen auch zurück. Das resultierende dynamische Gleichgewicht zwischen mittlerer Energie der Eigenschwingung, \bar{U}_ω , und das Resonators, \bar{E}_{ω_0} , ist

$$\bar{U}_{\omega_0} = \bar{E}_{\omega_0} . \quad (1.5)$$

- ii) Danach wird \bar{E}_ω im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T bestimmt (und damit auch \bar{U}_ω).

Die Energieverteilung kann dann durch die spektrale Energiedichte $u(\omega, T)$ beschrieben werden:

$$V \cdot u(\omega, T) d\omega = \bar{U}_\omega \cdot dN$$

ist die Energie aller Moden mit Frequenzen in $[\omega, \omega + d\omega]$; also

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{U}_\omega . \quad (1.6)$$

- i) Die Schwingung eines Resonators, $b e^{-i\omega t}$, genügt der Differentialgleichung (Newtonsche Gleichung)

$$m\ddot{b} + \gamma\dot{b} + m\omega_0^2 b = e\mathcal{E} e^{-i\omega t} , \quad (1.7)$$

falls sie durch eine Schwingung $\sim e^{-i\omega t}$ einer Komponenten \mathcal{E} des elektrischen Felds angeregt wird. Dabei sind m, e die Masse, bzw. die Ladung des Resonators und $\gamma = e^2 \omega_0^2 / (6\pi c^3)$ ist eine summarische Beschreibung der Strahlungsverluste (s. Elektrodynamik). Also ist

$$b = \frac{\frac{e\mathcal{E}}{m}}{\omega_0^2 - \omega^2 - \frac{i\gamma\omega_0}{m}} \approx \frac{e\mathcal{E}}{2m\omega_0} \cdot \frac{1}{\omega_0 - \omega - \frac{i\gamma}{2m}}$$

für $\omega \approx \omega_0$, mit entsprechender (ungestörter) Energie

$$E_{\omega_0}(\omega) = \frac{m}{2} (\omega^2 + \omega_0^2) |b|^2 \approx m\omega_0^2 |b|^2 \approx \frac{m}{4} \frac{\left(\frac{e\mathcal{E}}{m}\right)^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2} . \quad (1.8)$$

Sind die Phasen der verschiedenen Moden unkorreliert, so sind ihre Beiträge (1.8) im Mittel additiv. Die Gesamtenergie eines Resonators ist damit

$$\bar{E}_{\omega_0} = \int_0^\infty E_{\omega_0}(\omega) dN(\omega) = 3V \overline{|\mathcal{E}_{\omega_0}|^2} = \bar{U}_{\omega_0}$$

unter Verwendung von (1.4) und von $(x^2 + a^2)^{-1} \approx \frac{\pi}{a} \delta(x)$. Die letzte Gleichung folgt aus der Isotropie der Strahlung: $3V \overline{|\mathcal{E}_{\omega_0}|^2} = V \overline{|\vec{E}_{\omega_0}|^2} = \bar{U}_{\omega_0}$.

ii) Folgende Überlegung, die Planck nicht machte, drängt sich hier auf. Die Wahrscheinlichkeit, ein Hamiltonsches System mit Phasenkoordinaten p, q in $dpdq$ zu finden, ist bei der Temperatur T nach Boltzmann

$$w(p, q)dpdq = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z(\beta)} dpdq, \quad (1.9)$$

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

$$Z(\beta) = \int dpdq e^{-\beta H(p, q)}. \quad (1.10)$$

Die mittlere Energie ist damit

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

Für einen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator,

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

ist (1.10) ein Gaussssches Integral,

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

und damit

$$\bar{E} = \frac{1}{\beta} = kT, \quad (1.11)$$

was unabhängig von ω_0 ist. Wendet man dies auf die Resonatoren an und, indirekt über (1.5), auf \bar{U}_{ω_0} (oder, wie Rayleigh, direkt auf die Feldoszillatoren (1.2), ohne auf die Einstellung des Gleichgewichts einzugehen), so folgt aus (1.6)

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT, \quad (1.12)$$

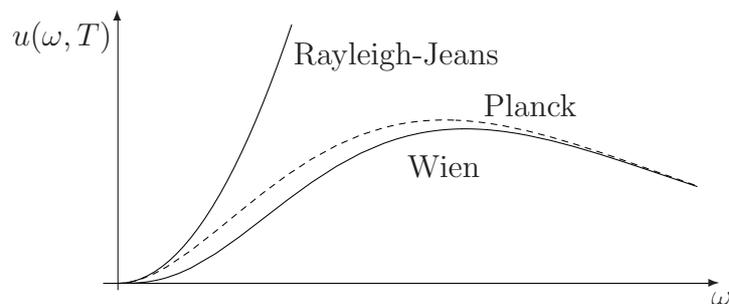
(Rayleigh 1900, berichtigt durch Jeans 1905). Dieses Verhalten führt auf die Energie pro Volumeneinheit

$$\int_0^\infty u(\omega, T) d\omega = \infty \quad (!)$$

(“Ultraviolett katastrophe”) und steht im Widerspruch zum experimentellen Verhalten

$$u(\omega, T) \propto \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad (1.13)$$

für grosse ω (Wien, 1896). Planck folgerte über (1.5, 1.6) $\bar{E}_\omega \propto \omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ und bemerkte, dass \hbar (damals anders benannt) eine neue Naturkonstante sein musste.



Am 7. Oktober 1900 erfuhr Planck von Messungen, die eine Abweichung vom Wienschen Gesetz zeigten. Noch am selben Tag änderte er den Ausdruck für \bar{E}_ω ab und gelangte so zum **Strahlungsgesetz**

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}, \quad (1.14)$$

(s. Übungen für Details). Sie interpoliert zwischen (1.12) und (1.13). Aus dem Vergleich mit der neuen experimentellen Kurve fand er

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

(in Klammern die heutigen Werte) und auch den damals besten Wert für die Avogadro Zahl

$$N_A = \frac{R}{k} = 6,17 (6,022) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Die grossartigste Bestätigung fand das Plancksche Gesetz (1.14) in der gemessenen Spektralverteilung der kosmischen Hintergrundstrahlung bei $T = 2,73\text{K}$ (COBE 1992, WMAP 2003).

Nachträglich (14. Dez. 1900) begründet Planck (1.14) so:

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

(hier ist E die Energie eines Resonators und $h = 2\pi\hbar$).

Die gleichen Teile setzt er dann gleich $\hbar\omega_0$, d.h. die möglichen Energien eines Resonators sind **quantisiert**:

$$E_n = n\hbar\omega_0, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.15)$$

Dies bedingt die Ersetzung von (1.9) durch

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

und damit

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

was über (1.5, 1.6) auf (1.14) führt. (s. Übungen für Plancks äquivalente Überlegung).

Beachte, dass Planck die Feldoszillatoren nicht quantisierte. Als Einstein dies tat (s. unten), erschien ihm der Schritt zu radikal. Umgekehrt bemängelte Einstein, dass die Quantisierungshypothese (1.15) im Widerspruch zum kontinuierlichen Energieaustausch steht, wie er in (1.7) zum Ausdruck kommt.

1.2 Licht als Teilchen (Einstein 1905)

Der 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik besagen in knapper Form $dU = TdS - pdV$, d.h.

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV, \quad (1.16)$$

wobei S : Entropie, U : innere Energie, V : Volumen, p : Druck, T : Temperatur sich auf Gleichgewichtszustände eines physikalischen Systems beziehen. Diese sollen durch Angabe zweier Zustandsvariablen, z.B. U und V , bestimmt sein. So legt (1.16) die partiellen Ableitungen von $S(U, V)$ fest:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V = \frac{1}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{p}{T}.$$

- Für ein ideales Gas aus N Teilchen ist nach dem idealen Gasgesetz

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{p}{T} = \frac{Nk}{V},$$

also

$$S(U, V) - S(U, V_0) = \int_{V_0}^V \frac{\partial S}{\partial V} dV = Nk \log \frac{V}{V_0} = k \log \left(\frac{V}{V_0}\right)^N. \quad (1.17)$$

- Ein Oszillator hat nur eine unabhängige Zustandsvariable, z.B. u oder T . Im Wienschen Grenzfall hat ein Feldoszillator der Frequenz ω die (mittlere) Energie

$$u(T) = \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}},$$

sodass

$$\begin{aligned} \frac{ds}{du} &= \frac{1}{T} = -\frac{k}{\hbar\omega} \log \frac{u}{\hbar\omega}, \\ s(u) &= \int \frac{ds}{du} du = -\frac{ku}{\hbar\omega} \left(\log \frac{u}{\hbar\omega} - 1 \right), \end{aligned} \quad (1.18)$$

(verwende $\int \log x dx = x(\log x - 1)$; die Wahl der Integrationskonstanten ist unwesentlich).

- Einstein betrachtet als System das e.m. Feld im Hohlraum im Frequenzbereich $[\omega, \omega + \Delta\omega)$ (monochromatische Strahlung). Dessen Entropie und Energie sind

$$S(U, V) = \Delta N \cdot S(u), \quad U = \Delta N \cdot u,$$

wobei

$$\Delta N = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \Delta\omega$$

die Anzahl Oszillatoren ist. Also, mit (1.18),

$$S(U, V) = \Delta N \cdot \left(-\frac{kU/\Delta N}{\hbar\omega} \right) \cdot \left(\log \left(\frac{\pi^2 c^3 U}{\hbar\omega^3 \Delta\omega V} \right) - 1 \right)$$

und

$$S(U, V) - S(U, V_0) = \frac{kU}{\hbar\omega} \log \frac{V}{V_0} = k \log \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{U}{\hbar\omega}}.$$

Nun vergleicht dies Einstein mit (1.17) und schliesst:

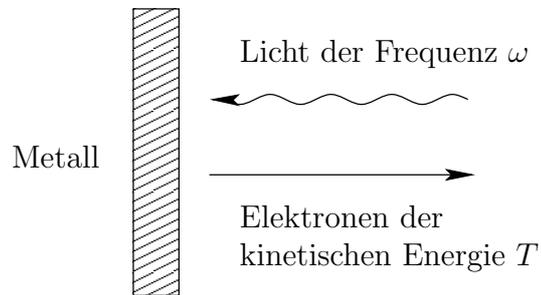
“Monochromatische Strahlung geringer Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereich der Wienschen Strahlungsformel) verhält sich in wärmetheoretischer Beziehung so, wie wenn sie aus voneinander unabhängigen Energiequanten von der Grösse $\hbar\omega$ bestünde.”

Als Gleichung:

$$E = \hbar\omega . \quad (1.19)$$

Er wendet diesen “heuristischen Gesichtspunkt” an, um “zu untersuchen, ob auch die Gesetze der Erzeugung und Verwandlung des Lichts so beschaffen sind, wie wenn das Licht aus derartigen Lichtquanten bestünde”. Eine Anwendung ist auf den **photoelektrischen Effekt** (entdeckt 1887, Hertz).

Beobachtung (Lenard 1902): Die Energie T der emittierten Elektronen hängt (monoton wachsend) nur von der Frequenz, nicht aber von der Intensität der einfallenden Strahlung ab, entgegen der klassischen Vorstellung. Davon abhängig ist hingegen die Emissionsrate.



Deutung (Einstein 1905): ein Lichtquant $\hbar\omega$ wird an ein einziges Elektron übergeben, das dann aus dem Metall mit der Energie

$$T = \hbar\omega - W \quad (1.20)$$

(W : Austrittsarbeit) entweicht. (Erst um 1915 waren die experimentellen Daten gut genug, um (1.20) zu bestätigen.)

1.3 Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)

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

$$\omega_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, m = 1, 2, \dots, \quad n > m, \quad (1.21)$$

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

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

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

wird emittiert beim Übergang $n \rightarrow m$, $E_m < E_n$. (Auch der Übergang $m \rightarrow n$ ist möglich unter Absorption eines Lichtquants gleicher Frequenz.) Mit diesem Ansatz wird der spektroskopische Befund (1.21) als Energiebilanz erklärt. Für das H-Atom ergibt sich

$$E_n = -\text{Ry} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.22)$$

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

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

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

Daraus folgt

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

Nach (1.22) muss $L \propto n$ sein. Bohr setzt als **Quantenbedingung**:

$$L_n = \hbar n, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.23)$$

und findet

$$\begin{aligned} r_n &= a_0 n^2, & a_0 &= \frac{\hbar^2}{me^2} & \text{(Bohr-Radius)}, \\ E_n &= -\text{Ry} \cdot \frac{1}{n^2}, & \text{Ry} &= \frac{me^4}{2\hbar^2} & \text{(Rydbergkonstante)}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

$$\omega_n = \frac{2\text{Ry}}{\hbar n^3} \quad (1.25)$$

mit den heutigen Werten

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

Berücksichtigt man die Mitbewegung des Kerns der Masse M , so ist m durch die reduzierte Masse zu ersetzen; ebenso seine Ladung e durch Ze bei wasserstoffähnlichen Ionen wie He^+ ; also Ry in (1.24) durch

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

Die Wahl von \hbar als Proportionalitätsfaktor in (1.23) ist zwingend, falls man die Gültigkeit der klassischen Strahlungstheorie für grosse n fordert: beim Übergang $n \rightarrow n-1$ soll dann Licht der klassischen Umlauffrequenz ω_n ausgestrahlt werden. In der Tat stimmt

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

mit (1.25) überein. Später (1923) erhebt Bohr dies zum **Korrespondenzprinzip**: Die Quantentheorie reproduziert die klassische Physik im Grenzfall grosser Quantenzahlen.

Grosse Erfolge der Bohrschen Theorie waren u.A.:

- Der richtige Wert von R .
- a_0 als richtige Grössenordnung der Atome
- Die Erklärung des Verhältnisses $R_{\text{He}^+} : R_{\text{H}} = 4,0016$.

1.4 Die Quantisierung der Wirkung (Sommerfeld 1915)

Sommerfeld verallgemeinert die Bohrsche Bedingung (1.23). Die Quantisierung der **gebundenen** Bahnen eines Hamiltonschen System mit **einem** Freiheitsgrad ist die Quantisierung der Wirkung:

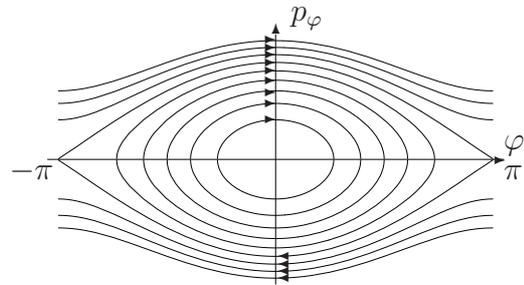
$$\oint p dq = 2\pi n \hbar = nh, \quad (n = (0), (\pm)1, (\pm)2, \dots), \quad (1.26)$$

wobei das Integral sich über eine Bahnkurve erstreckt.

Beispiele. 1. Das ebene Pendel (Masse m , Länge l) mit Hamiltonfunktion

$$H(\varphi, p_\varphi) = \frac{p_\varphi^2}{2ml^2} - mgl \cos \varphi$$

hat je eine Bahnkurve bei Energien $E < mgl$, aber je zwei, falls $E \geq mgl$. Nur im zweiten Fall kann n auch negativ sein.

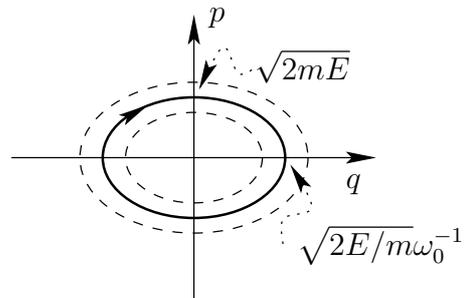


2. Harmonischer Oszillator. Die Bahnkurve der Energie E ,

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

ist eine Ellipse im Phasenraum, also

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



und (1.26) liefert

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

was überraschend mit Plancks Postulat (1.15) übereinstimmt.

3. Ein Teilchen, das sich frei längs einem Kreis bewegt (Phasenkoordinaten (φ, p_φ) , $0 \leq \varphi < 2\pi$). Der Drehimpuls $p_\varphi = L$ ist erhalten. Also ist

$$\oint p_\varphi d\varphi = 2\pi L$$

und (1.26) ist (1.23).

Die Bedingung (1.26) lässt sich auf **vollständig separable Systeme** (s. Allgemeine Mechanik) mit f Freiheitsgraden erweitern: Solche, für welche die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

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

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

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

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

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha), \quad (k = 1, \dots, f). \quad (1.27)$$

Für festes k definiert die Gleichung einen (topologischen) Kreis in der (q_k, p_k) -Ebene, falls die Bewegung beschränkt ist (wie für $f = 1$ die Kreise in der Figur). Die f -dimensionale Schnittfläche ist deren kartesisches Produkt und somit ein **Torus**. Die Sommerfeld-Bedingung ist anwendbar: Sie zeichnet als erlaubt diejenigen Tori (und nicht spezielle, darin verlaufende Bahnen) aus, für welche

$$W_k(\alpha) := \oint p_k dq_k = 2\pi n_k \hbar, \quad (n_k = 0, (\pm)1, \dots). \quad (1.28)$$

für alle $k = 1, \dots, f$, wo p_k durch (1.27) gegeben ist. Dies bestimmt $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$ als Funktion der n_k und insbesondere die möglichen Energien $E_{n_1 \dots n_f}$.

Beispiel. Das 2-Körperproblem (s. Allgemeine Mechanik). Nach Separation der Schwerpunktsbewegung und Verwendung von Polarkoordinaten (r, θ, φ) für die Relativbewegung,

$$\vec{x} = r\vec{e}_r, \quad \dot{\vec{x}} = \dot{r}\vec{e}_r + r\dot{\theta}\vec{e}_\theta + r(\sin\theta)\dot{\varphi}\vec{e}_\varphi,$$

lautet deren kinetische Energie

$$T = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2),$$

mit kanonischen Impulsen

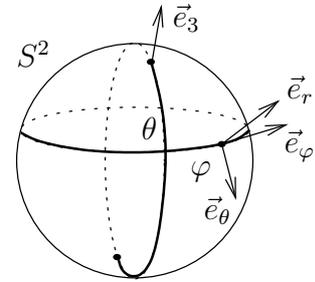
$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi}.$$

Der Drehimpuls ist

$$\vec{L} = m\vec{x} \wedge \dot{\vec{x}} = mr^2\dot{\theta}\vec{e}_r \wedge \vec{e}_\theta + mr^2(\sin\theta)\dot{\varphi}\vec{e}_r \wedge \vec{e}_\varphi = p_\theta\vec{e}_\varphi - \frac{p_\varphi}{\sin\theta}\vec{e}_\theta,$$

sodass

$$\vec{L} \cdot \vec{e}_3 = p_\varphi, \quad \vec{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}. \quad (1.29)$$



Die Hamiltonfunktion lautet

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + V(r)$$

und die Hamilton-Jacobi Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)^2 \right] \right\} + V(r) = E \equiv \alpha_1$$

ist vollständig separabel. Der Ansatz

$$S = S_r(r) + S_\theta(\theta) + S_\varphi(\varphi)$$

führt auf

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\varphi}{\partial \varphi} &= \alpha_\varphi, \\ \left(\frac{\partial S_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta} &= \alpha_\theta^2, \\ \left(\frac{\partial S_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} &= 2m(E - V(r)). \end{aligned}$$

Damit können $W_k(\alpha)$, ($k = r, \theta, \varphi$), in (1.28) berechnet werden:

$$\begin{aligned} W_\varphi(\alpha) &= 2\pi\alpha_\varphi, \\ W_\theta(\alpha) &= 2 \int_{\theta_{\min}=\pi-\theta_{\max}}^{\theta_{\max}} \sqrt{\alpha_\theta^2 - \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta = 2\pi(\alpha_\theta - \alpha_\varphi), \end{aligned}$$

also

$$\alpha_\theta = \frac{1}{2\pi} (W_\varphi + W_\theta), \quad (1.30)$$

$$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr. \quad (1.31)$$

Nach Quantisierung der Wirkungen (1.28) sind die erlaubten **Drehimpulse** und **Energien** durch die Quantenzahlen n_r, n_φ, n_θ bestimmt, s. (1.29, 1.30, 1.31):

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{e}_3 &= \alpha_\varphi = n_\varphi \cdot \hbar, \\ \vec{L}^2 &= \alpha_\theta^2 = \underbrace{[(n_\varphi + n_\theta)\hbar]^2}_{:=l}, \\ E &= E_{n_r, l}. \end{aligned}$$

Die Energien hängen nur von zwei (statt 3) Quantenzahlen ab, dafür kommt jede $2l + 1$ mal vor (**Entartung**), denn $|n_\varphi| \leq l$ wegen $|\vec{L} \cdot \vec{e}_3| \leq |\vec{L}|$, also $(n_\varphi, n_\theta) = (-l, 2l), \dots, (l, 0)$.

Spezialfall: Wasserstoff-Atom (Kepler-Problem), d.h. $V(r) = -e^2/r$. Dann ist für $E < 0$ (damit Bahnen gebunden)

$$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2mE + \frac{2me^2}{r} - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr = -2\pi \left(\alpha_\theta - \frac{me^2}{\sqrt{-2mE}} \right),$$

(verwende

$$2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{-A + 2\frac{B}{r} - \frac{C}{r^2}} dr = -2\pi \left(\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right)$$

für $A, B, C > 0$), und damit

$$n_r \hbar = -l \hbar + e^2 \sqrt{\frac{m}{-2E}}, \quad (n_r = 1, 2, \dots),$$

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2 \hbar^2}, \quad (n = n_r + l = 1, 2, \dots).$$

Dies stimmt mit (1.22) überein. Die Entartung ist nun

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (1.32)$$

Die Entartungen sind Ausdruck von Symmetrien: der Rotationen (Drehimpulserhaltung) beim 2-Körper-Problem und, darüber hinaus beim Kepler-Problem, der Erhaltung des Laplace-Lenz-Vektors.

Auf Systeme, die nicht separabel sind (und dies ist der generische Fall), ist Sommerfelds Bedingung nicht anwendbar.

1.5 Emission und Absorption (Einstein 1917)

Einstein gibt eine neue Herleitung des Planckschen Gesetzes (1.14). Auch er bestimmt die spektrale Energiedichte des Strahlungsfelds über das Gleichgewicht mit der Materie, ohne weder (1.5) noch ein konkretes Modell der Materie, wie die Resonatoren, zu verwenden. Die Moleküle, die einfachheitshalber alle von derselben Sorte seien, haben diskrete Energien E_n , wobei Entartungen ($E_n = E_m$ für $n \neq m$) erlaubt sind. Jedes Molekül kann folgende Übergänge eingehen:

- **spontane Emission:** Übergang $n \rightarrow m$, ($E_n > E_m$) mit

$$\text{Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit: } A_{nm}. \quad (1.33)$$

- **induzierte Emission, bzw. Absorption** in Anwesenheit von Strahlung: Übergang $n \rightarrow m$, ($E_n > E_m$, bzw. $E_n < E_m$) mit

$$\text{Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit: } B_{nm} u(\omega_{nm}). \quad (1.34)$$

wobei $u(\omega)$ die spektrale Energiedichte ist und ω_{nm} eine durch n und m festgelegte Frequenz: $\omega_{nm} = \omega_{mn}$.

Im thermischen Gleichgewicht (Temperatur T) ist die mittlere Anzahl Moleküle im Zustand E_n

$$N_n = N \cdot \frac{e^{-E_n/kT}}{Z},$$

wobei N deren Gesamtzahl und $Z = \sum_n e^{-E_n/kT}$ die sogenannte Zustandssumme ist. Für die Zahl der Moleküle, die pro Zeiteinheit den Übergang $n \rightarrow m$ machen, setzt somit Einstein:

$$W_{nm} = \frac{N}{Z} e^{-E_n/kT} \cdot \begin{cases} B_{nm}u(\omega_{nm}) + A_{nm}, & (E_n > E_m), \\ B_{nm}u(\omega_{nm}), & (E_n < E_m). \end{cases}$$

Im Gleichgewicht ist $W_{nm} = W_{mn}$, also für $E_n > E_m$:

$$u(\omega_{nm}, T) = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \left(\frac{B_{mn}}{B_{nm}} e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} - 1 \right)^{-1}, \quad (1.35)$$

mit expliziter T -Abhängigkeit der rechten Seite! Aus der Wienschen Strahlungsformel (1.13) folgt deshalb die Bohrsche Frequenzbedingung

$$E_n - E_m = \text{konst} \cdot \omega_{nm} =: \hbar\omega_{nm}.$$

Weiter soll bei festen n, m für $T \rightarrow \infty$ das klassische Rayleigh-Jeans Gesetz (1.12) gelten. Dies verlangt zunächst $u \rightarrow \infty$ für $T \rightarrow \infty$, also

$$B_{mn} = B_{nm}, \quad (1.36)$$

und dann weiter

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} \left(e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} - 1 \right)^{-1} \rightarrow \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{kT}{\hbar\omega_{nm}} = \frac{\omega_{nm}^2}{\pi^2 c^3} kT.$$

Daraus folgt die Beziehung

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} \quad (1.37)$$

zwischen spontaner und induzierter Emission und (1.35) wird zum Planckschen Strahlungsgesetz (1.14) für $u(\omega_{nm}, T)$. Weil darin alle Moleküleigenschaften entfallen, muss es für beliebige Frequenzen ω gelten. Die Berechnung der molekularen Grössen E_n, A_{nm}, B_{nm} bleibt der späteren Quantenmechanik vorbehalten. Zum Vergleich mit ihr ist es zweckmässig, die Wahrscheinlichkeit (1.34) für induzierte Übergänge auf die mittlere Anzahl Lichtquanten $\bar{U}_\omega/\hbar\omega$ in einer Mode der Frequenz $\omega = \omega_{nm}$ zu beziehen, vgl. (1.6),

$$B_{nm}u(\omega_{nm}) = B_{nm} \frac{\hbar\omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} N_{\omega_{nm}} =: \tilde{B}_{nm} \cdot N_{\omega_{nm}}.$$

Dann vereinfacht sich (1.37) nämlich zu

$$A_{nm} = \tilde{B}_{nm}.$$

Bemerkenswert ist die Beschreibung (1.33) der spontanen Emission: Selbst im Vakuum ($u = 0$) gibt es für ein Molekül in einem **bestimmten** Quantenzustand nur eine **Wahrscheinlichkeitsaussage** für das zukünftige Verhalten. Dieser prinzipielle Verzicht auf eine (im klassischen Sinn) kausale Dynamik haftet der ganzen Quantentheorie an.

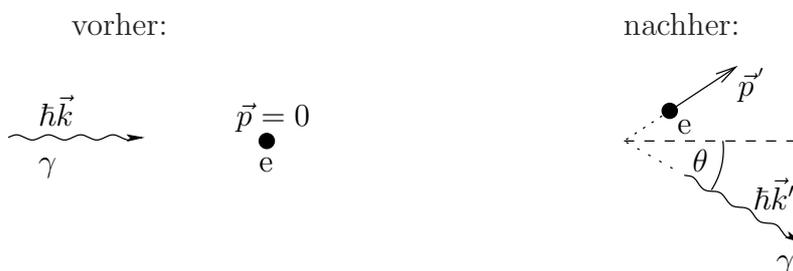
In derselben Arbeit erweitert Einstein seine Lichtquantenhypothese (1.19) zu einer relativistisch kovarianten Beziehung zwischen dem 4er-Impuls $(E/c, \vec{p})$ und dem 4er-Wellenvektor $(\omega/c, \vec{k})$,

$$\begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \omega/c \\ \vec{k} \end{pmatrix}, \quad \text{bzw.} \quad p^\mu = \hbar k^\mu, \quad (1.38)$$

und schliesst somit, dass ein Lichtquant auch einen Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ mit $|\vec{k}| = \omega/c$ trägt.

1.6 Licht als Teilchen (Compton 1922)

Der direkte Nachweis der Wellen-Teilchen Dualität des Lichts lieferte Compton. Bei der Streuung von Röntgenstrahlen an (ruhenden) Elektronen ändert sich der Impuls der Lichtquanten (Teilcheneigenschaft) und wegen (1.38) die Wellenlänge λ der Strahlung (Welleneigenschaft):



Aus der Energie-Impuls Erhaltung

$$\hbar k^\mu + p^\mu = \hbar k'^\mu + p'^\mu$$

folgt

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1.39)$$

Rechnung: Das Minkowski-Quadrat von $\hbar(k'^\mu - k^\mu) = p^\mu - p'^\mu$ ist $-\hbar^2 k^\mu k'_\mu = m^2 c^2 - p^\mu p'_\mu$ mit

$$k^\mu k'_\mu = |\vec{k}||\vec{k}'|(1 - \cos \theta) = 2|\vec{k}||\vec{k}'| \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

$$p^\mu p'_\mu = mc \frac{E'}{c} = mc(mc + \hbar|\vec{k}| - \hbar|\vec{k}'|),$$

also

$$-2\hbar^2 |\vec{k}||\vec{k}'| \sin^2 \frac{\theta}{2} = mc\hbar(|\vec{k}'| - |\vec{k}|).$$

Mit $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$ folgt (1.39).

1.7 Teilchen als Welle (de Broglie 1923)

De Broglie überträgt die Wellen-Teilchen Dualität von Licht auf Materie: einem Teilchen mit Impuls p^μ ist eine Welle ("Materiewelle") zugeordnet mit Wellenvektor k^μ , wie in

(1.38). Aus $p^\mu p_\mu = (E/c)^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2$ folgt das Dispersionsgesetz dieser Wellen:

$$\omega(\vec{k}) = c \sqrt{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 + \vec{k}^2}.$$

In nicht-relativistischer Näherung, wo

$$E(\vec{p}) = \underline{mc^2} + \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (1.40)$$

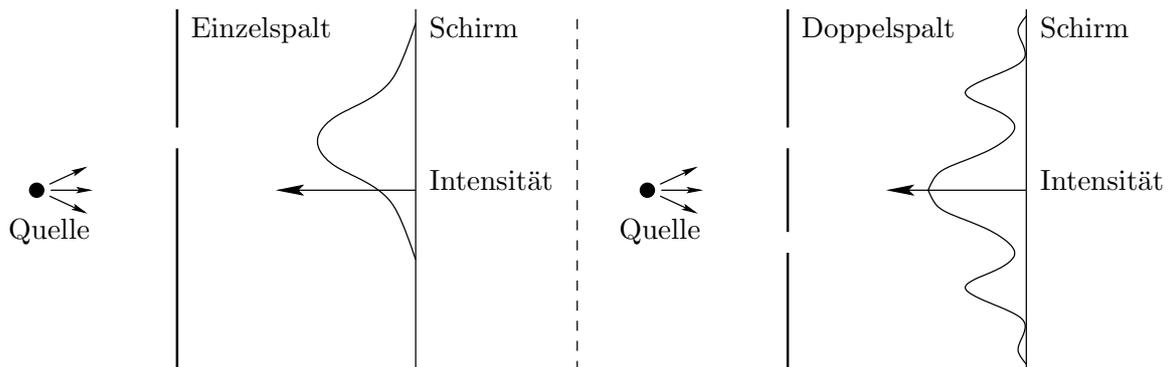
lautet es

$$\omega(\vec{k}) = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}, \quad (1.41)$$

wobei die unterstrichenen Terme der Ruheenergie entsprechen. Nicht relativistisch betrachtet kann eine solche Konstante in der Energie $E(\vec{p})$ weggelassen werden und ebenso (siehe später) bei der Frequenz $\omega(\vec{k})$.

De Broglie vermutet, dass sich Beugungs- und Interferenzerscheinungen auch mit Teilchenstrahlen ergeben.

Beispiel. Doppelspaltexperiment



Die Intensität beim Doppelspalt ist nicht die Summe der Intensitäten von je einem offenen Spalt. Die Interferenz deutet darauf hin, dass hingegen Amplituden additiv sind. Das Experiment kann heute mit Elektronen, Neutronen, ja Fulleren-Molekülen C_{60} durchgeführt werden.

Weitere Entwicklungen, auf die wir hier nicht eingehen, waren das Ausschlussprinzip (Pauli, 1925), welches mit einem weiteren, 2-wertigen Freiheitsgrad im Zusammenhang steht (Pauli, 1924); letzterer wurde sodann als **Spin** des Elektrons gedeutet (Uhlenbeck, Goudsmit 1925).

Darauf folgte die moderne Form der Quantenmechanik in der Gestalt der Matrizenmechanik (Heisenberg, dann Born und Jordan, sowie Dirac, alle 1925) und der Wellenmechanik (Schrödinger 1926), auf die im nächsten Kapitel eingegangen wird.

2 Wellen- und Matrizenmechanik

2.1 Wellenmechanik und Schrödinger-Gleichung

Nach de Broglie, s. (1.38), ist einem Teilchen mit Impuls \vec{p} eine Welle (Zustand)

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad (\vec{p} = \hbar\vec{k}), \quad (2.1)$$

zugeordnet. Allgemeine Zustände ergeben sich durch Superposition

$$\psi(\vec{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p. \quad (2.2)$$

Die Zeitentwicklung eines Zustands der Energie E ergibt sich durch Multiplikation mit

$$\cdot e^{-i\omega t}, \quad (E = \hbar\omega).$$

Für ein **freies Teilchen** ist $E = E(\vec{p})$ und damit

$$\psi(\vec{x}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - E(\vec{p})t)/\hbar} \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p.$$

Die Bewegung des Zustands erfüllt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - E(\vec{p})t)/\hbar} E(\vec{p}) \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p$$

und, falls das Teilchen **nicht-relativistisch** (1.40) ist,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

Anders gesagt: Dies erhält man aus (1.41) durch die Substitution

$$\omega \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{k} \rightarrow -i \vec{\nabla} \quad (2.3)$$

und Anwendung auf $\psi(\vec{x}, t)$. (Für ebene Wellen $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)}$ liefern ja die rechten Seiten (2.3) die linken.)

Für ein **nicht freies** Teilchen mit klassischer Hamiltonfunktion

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

liefert (2.3) die **Schrödinger-Gleichung**

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi. \quad (2.4)$$

Damit ist H auch quantenmechanisch die Erzeugende der Zeitentwicklung. Für Wellen fester Frequenz,

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

lautet (2.4)

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\vec{x}))\psi = 0 . \quad (2.5)$$

Schrödinger (1926) erhielt diese zeitunabhängige Gleichung als wellenoptische Verallgemeinerung der Hamilton-Jacobi Gleichung. Hier soll sein Weg skizziert werden: In der skalaren Wellenoptik ist eine Licht**welle** fester Frequenz $\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-i\omega t}$ eine Lösung der Gleichung (mit Wellenzahl $k(\vec{x}) = \omega n(\vec{x})/c$ und Brechungsindex $n(\vec{x})$)

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0 . \quad (2.6)$$

Sie kann unter Umständen (siehe unten) ein Bündel von Licht**strahlen** beschreiben über die Zerlegung

$$\psi(\vec{x}) = A(\vec{x})e^{iS(\vec{x})}$$

in Amplitude $A(\vec{x})$ und Phase $S(\vec{x})$ (beide reell), und zwar als Schar der Orthogonaltrajektorien $\vec{x}(s)$ (s : Bogenlänge) der Flächen konstanter Phase:

$$\frac{d\vec{x}}{ds} = \frac{\vec{\nabla}S}{|\vec{\nabla}S|} . \quad (2.7)$$

Mit

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(Ae^{iS}) &= (\vec{\nabla}A + iA\vec{\nabla}S)e^{iS} , \\ \Delta(Ae^{iS}) &= \text{div } \vec{\nabla}(Ae^{iS}) = (\Delta A + iA\Delta S + 2i\vec{\nabla}A \cdot \vec{\nabla}S - A(\vec{\nabla}S)^2)e^{iS} \end{aligned}$$

besagt (2.6) nach Trennung von Real- und Imaginärteil

$$\Delta A - A(\vec{\nabla}S)^2 + Ak^2 = 0 , \quad (2.8)$$

$$A\Delta S + 2\vec{\nabla}A \cdot \vec{\nabla}S = 0 . \quad (2.9)$$

Die Strahlenoptik ist eine gute Näherung in Gebieten, wo die Amplitude $A(\vec{x})$ wenig variiert über eine Wellenlänge $2\pi/k$, oder genauer, wo

$$\left| \frac{\Delta A}{A} \right| \ll k^2 . \quad (2.10)$$

Dort wird (2.8) zu

$$(\vec{\nabla}S)^2 = k^2 \quad (2.11)$$

und (2.7) zu

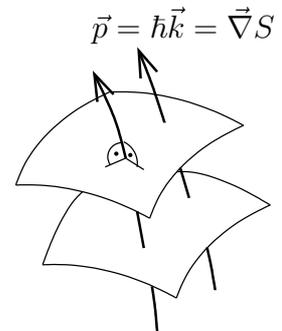
$$\vec{k} \equiv k \frac{d\vec{x}}{ds} = \vec{\nabla}S . \quad (2.12)$$

Die Gleichung $\vec{p} = \vec{\nabla}S$, wodurch in der Hamiltonschen Mechanik die Wirkung S ein Bündel von Bahnen beschreibt, steht über $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ in Übereinstimmung mit (2.12), falls S/\hbar als Phase einer Lösung von (2.5) angesetzt wird. Dann wird (2.11) zu

$$\left(\frac{\vec{\nabla}S}{\hbar} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\vec{x})) ,$$

also zur HJ-Gleichung

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



Schrödinger vollzieht den Übergang von der Mechanik zur Wellenmechanik auch für Hamiltonsche Systeme des Typs

$$H = \frac{1}{2}g^{\alpha\beta}(q)p_\alpha p_\beta + V(q) .$$

Wir formulieren die Schrödinger Gleichung aber nur für N -Teilchensysteme

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{\vec{p}_k^2}{2m_k} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) :$$

Die Wellenfunktion $\psi = \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)$ erfüllt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^N -\frac{\hbar^2 \Delta_k}{2m_k} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right) \psi , \quad (2.13)$$

wobei Δ_k der gewöhnliche Laplace-Operator im \mathbb{R}^3 ist, der nur auf die Variable \vec{x}_k wirkt. Wichtig ist, dass die **Wellenfunktion** $\psi(q)$ auf dem **Konfigurationsraum** des klassischen System lebt, hier dem \mathbb{R}^{3N} . Nur im Fall eines Teilchens kann dieser mit dem physikalischen \mathbb{R}^3 identifiziert werden. Die Auffassung der Materiewelle als einer Welle im Raum ist somit nicht haltbar.

zusammenfällt).

Unter (2.4) verhalten sich die Größen

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi|^2 = A^2 , \quad (2.14)$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi = \frac{A^2}{m} \vec{\nabla} S \quad (2.15)$$

wie eine Dichte, bzw. eine Stromdichte, insofern die **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (2.16)$$

gilt (Nachrechnen; oder: Im zeitabhängigen Fall (2.4) erhält man statt (2.9)

$$A\Delta S + 2\vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S = -2m \frac{\partial A}{\partial t} ,$$

nach Multiplikation mit A also $\text{div}(A^2 \vec{\nabla} S) = -m \partial A^2 / \partial t$, d.h. (2.16)). In integrierter Form:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d^3x = - \int_{\partial\Omega} \vec{j} \cdot d\vec{\sigma} , \quad (\Omega \subset \mathbb{R}^3) .$$

Insbesondere ist $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ konstant in t (falls ψ für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ abfällt).

Eine Energieverschiebung $V(\vec{x}) \rightarrow V(\vec{x}) + E_0$ ändert zwar die Frequenz der Lösung, vgl. (1.41), gemäss $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi(\vec{x}, t) e^{-iE_0 t/\hbar}$, bzw. $A \rightarrow A$, $S \rightarrow S - E_0 t$, was aber ohne Einfluss auf (2.14, 2.15) bleibt.

Die **Deutung** der Zustände $\psi(\vec{x})$ ist **statistisch** (Born 1926): Man normiere ψ so, dass

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = 1 . \quad (2.17)$$

Dann ist ρ eine Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h.

$$\int_{\Omega} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Teilchen in $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ befindet. Ebenso, in Bezug auf (2.13), $|\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)|^2 d^3x_1 \dots d^3x_N$ die, die N Teilchen der Reihe nach in d^3x_1, \dots, d^3x_N um $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N$ zu finden.

2.2 Matrizenmechanik und Heisenberg-Gleichung

Nach Sommerfeld, s. (1.26), genügt das mechanische System mit einem Freiheitsgrad

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

der Quantisierungsbedingung: Eine gebundene Bahn der Energie E ist quantentheoretisch zulässig, falls

$$n(E) := \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx$$

eine ganze Zahl ($n = 0, 1, 2, \dots$) ist. Vorderhand betrachten wir beliebige Bahnen; sie entsprechen reellen $n \geq 0$. Es ist

$$n(E) = \frac{2}{2\pi\hbar} \int_{a_-}^{a_+} \sqrt{2m(E - V(x))} dx ,$$

wobei $a_{\pm} = a_{\pm}(E)$ die Umkehrpunkte der Bahn sind. Die Periode ist, mit $\dot{x} = dx/dt$,

$$T(E) = \oint dt = 2 \int_{a_-}^{a_+} \frac{dx}{\dot{x}} = 2 \int_{a_-}^{a_+} \frac{dx}{\sqrt{2(E - V(x))/m}} = 2\pi\hbar \frac{dn}{dE} ,$$

die Frequenz $\omega = 2\pi/T$ also

$$\omega(n) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn} .$$

Funktionen $a(p, x)$ (Observablen) weisen längs der Bahn, $a(t) = a(p(t), x(t))$, diese Periode auf und sind damit Fourierreihen der Form

$$a(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(n) e^{im\omega(n)t} , \quad (2.18)$$

wobei

$$A_{-m}(n) = \overline{A_m(n)} , \quad (2.19)$$

falls a reell ist. Ebenso

$$\dot{a}(t) = i\omega(n) \sum_{m=-\infty}^{\infty} mA_m(n) e^{im\omega(n)t} . \quad (2.20)$$

Observablen können multipliziert werden, $c(p, q) = a(p, q)b(p, q)$, bzw. $c(t) = a(t)b(t)$. Gruppiert man im Produkt die Terme nach ihrer Frequenz, so resultiert die Faltung

$$C_m(n) = \sum_{m'} A_{m-m'}(n) B_{m'}(n) . \quad (2.21)$$

Insbesondere gilt (2.18) für das Dipolmoment $d(t) = ex(t)$, welches in drei Dimensionen die Ausstrahlung

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{r^3 c^2} (\vec{r} \wedge (\vec{r} \wedge \ddot{\vec{d}}))$$

($r \gg \lambda \gg |\vec{x}|$) bestimmt (vgl. Elektrodynamik): Klassisch strahlt das System in der Bahn $n \in \mathbb{R}$ mit der Frequenz $\omega(n)$ und ihren Oberschwingungen $m\omega(n)$; quantenmechanisch ($n \in \mathbb{N}$) gemäss der Bohrschen Frequenzbedingung für den Übergang $n \rightarrow n - m$:

$$\begin{aligned} \text{klassisch} &\quad \rightarrow \quad \text{quantenmechanisch} \\ m\omega(n) = m \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn} &\quad \rightarrow \quad \omega_{n,n-m} = \frac{E(n) - E(n-m)}{\hbar}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Für grosse n , wo $d^2 E/dn^2 \ll dE/dn$, sind die beiden Ausdrücke annähernd gleich, was das Korrespondenzprinzip auf S. 8 bekräftigt.

Die Quantisierung des klassischen Systems erfordert nach Heisenberg nicht bloss, dass in (2.18) die Frequenzen gemäss (2.22) ersetzt werden, sondern ebenso

$$A_m(n) \rightarrow A_{n,n-m} : \quad (2.23)$$

was für die Phasen recht ist, kann für die Amplituden nur billig sein. Insgesamt

$$A_m(n) e^{im\omega(n)t} \rightarrow A_{n,n-m} e^{i\omega_{n,n-m}t}.$$

Links stehen lauter Eigenschaften der selben Bahn n , unabhängig von $m \in \mathbb{Z}$; rechts Eigenschaften verschiedener Paare von Zuständen $(n, n - m)$. So ist links die Summe (2.18) sinnvoll; nicht aber rechts, sozusagen gemäss dem Verbot, Äpfel und Birnen zu addieren (Heisenberg: “nicht ohne Willkür möglich und deshalb nicht sinnvoll”). Es ist somit die Gesamtheit

$$A = (A_{nn'} e^{i\omega_{nn'}t})_{nn'}$$

als Matrix aufzufassen. Wodurch ist das Produkt (2.21) zu ersetzen? Nach dem Ritzschen Kombinationsprinzip ist

$$\omega_{nn'} + \omega_{n'n''} = \omega_{nn''} \quad (2.24)$$

und damit $e^{i\omega_{nn'}t} e^{i\omega_{n'n''}t} = e^{i\omega_{nn''}t}$. Im Matrixprodukt $C = AB$, d.h.

$$C_{nn''} e^{i\omega_{nn''}t} = \sum_{n'} A_{nn'} e^{i\omega_{nn'}t} B_{n'n''} e^{i\omega_{n'n''}t},$$

kommt (2.24) zum Tragen (“ergibt sich diese Art der Zusammensetzung nahezu zwangsläufig aus der Kombinationsrelation der Frequenzen”).

Im Übrigen ist die Vorschrift (2.22) nicht eindeutig, denn auf $-m$ angewandt ergibt sie

$$m\omega(n) \rightarrow -\omega_{n,n+m} = \omega_{n+m,n} \neq \omega_{n,n-m}.$$

Der Unterschied ist aber $\hbar^{-1} O(d^2 E/dn^2)$ und damit von der selben Ungenauigkeit wie die Näherung, die der Vorschrift (2.22) zugrundeliegt. Folglich ist auch

$$A_m(n) \rightarrow A_{n+m,n}$$

ebenso passend wie (2.23). Die Anwendung beider Regeln auf die Reellitätsbedingung (2.19) liefert eine Gleichung, in der beidseits dasselbe Zustandspaar vorkommt, und zwar

$$A_{n-m,n} = \overline{A_{n,n-m}}, \quad \text{d.h. } A = A^* .$$

Die Energie H nimmt unter den Observablen eine Sonderstellung ein, da erhalten. Ihre Fourierentwicklung ist somit $H_m(n) = \delta_{m0}E(n)$ und quantenmechanisch entspricht ihr nach (2.23) die Diagonalmatrix

$$H_{nn'} = E(n)\delta_{nn'} . \quad (2.25)$$

Damit ist

$$A(t)_{nn'} \equiv A_{nn'}e^{i\omega_{nn'}t} = e^{iE(n)t/\hbar}A_{nn'}e^{-iE(n)t/\hbar} = (e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar})_{nn'} ,$$

kurz

$$A(t) = e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar} . \quad (2.26)$$

Es folgt $\dot{A}(t) = (i/\hbar)e^{iHt/\hbar}(HA - AH)e^{-iHt/\hbar}$ und somit die **Heisenberg-Gleichung**: die Bewegungsgleichung

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] \quad (2.27)$$

einer beliebigen Observablen $A(t)$.

Insbesondere gilt dies für den Ort $X(t)$ und den Impuls $P(t)$, die anstelle der Bahn $(p(t), x(t))$ treten:

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar}[H, X], \quad \dot{P} = \frac{i}{\hbar}[H, P] . \quad (2.28)$$

Nun gilt es die Nabelschnur zur "halbklassischen" Quantentheorie Sommerfelds zu kappen: wo in (2.25) H noch über $E(n)$ durch die Quantisierungsbedingung (1.28) bestimmt ist, soll neu die Energie durch

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (2.29)$$

gegeben sein, wobei $P^2 = P \cdot P$ und $V(X)$ (z.B. für $V(x) = \alpha x^2 + \beta x^3$) als Matrixprodukte zu verstehen sind. Die Berechnung der Kommutatoren in (2.28) verlangt schlussendlich nach jener von $(i/\hbar)[P, X]$.

Letztere wird durch Heisenberg, Born und Jordan wie folgt mit (1.28) in Verbindung gebracht. Klassisch ist nach (2.18) $\oint a(t)dt = (2\pi/\omega(n))A_0(n)$, also nach (2.20, 2.21)

$$n = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint pdx = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p\dot{x}dt = \frac{i}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} mP_{-m}(n)X_m(n) .$$

Ableitung nach n liefert

$$1 = \frac{i}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} m \frac{d}{dn} P_{-m}(n) X_m(n) .$$

Das Korrespondenzprinzip verlangt $X_m(n) \rightarrow X_{n+m,n}$, $P_{-m}(n) \rightarrow P_{n,n+m}$; durch Erweiterung von (2.22) auf $E(n) \rightsquigarrow P_{n,n+m}X_{n+m,n}$ verwandelt es den Ausdruck in

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{i}{\hbar} \sum_m (P_{n,n+m}X_{n+m,n} - P_{n-m,n}X_{n,n-m}) \\ &= \frac{i}{\hbar} ((PX)_{nn} - (XP)_{nn}) = \frac{i}{\hbar} [P, X]_{nn} . \end{aligned}$$

Die Diagonalelemente von $D = (i/\hbar)[P, X]$ sind damit bestimmt. Insbesondere folgt, dass die Matrizen P, X nicht von endlicher Ordnung N sein können, denn die Summe über n würde $N = (i/\hbar)\text{tr}[P, X] = 0$ liefern. Die Bestimmung von $D_{nn'}$, ($n \neq n'$) erfordert eine zusätzliche Annahme: Die Ähnlichkeit (Dirac) von $(i/\hbar)[P, X]$ zur klassischen Poissonklammer $\{p, x\}$ und deren Unabhängigkeit von der Zeit, $\{p(t), x(t)\} = 1$, verleiten zu $\dot{D} = 0$. Aus (2.27), also $\dot{D} = (i/\hbar)[H, D]$, d.h. $\dot{D}_{nn'} = (i/\hbar)(E(n) - E(n'))D_{nn'}$, folgt so $D_{nn'} = 0$, ($n \neq n'$), da $E(n) \neq E(n')$. Insgesamt ist

$$\frac{i}{\hbar} [P, X] = 1 . \quad (2.30)$$

Als Folge davon gilt (s. Übungen)

$$\frac{i}{\hbar} [P, f(X)] = f'(X) , \quad \frac{i}{\hbar} [g(P), X] = g'(P)$$

und die Bewegungsgleichungen (2.28)

$$\dot{P} = -V'(X) , \quad \dot{X} = \frac{P}{m}$$

sind formal identisch mit den kanonischen Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik.

3 Die allgemeine Form der Quantenmechanik

3.1 Darstellung im Hilbertraum

Wir fassen die Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ eines Teilchens (zu fester Zeit) auf als ein Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegrierbaren Funktionen mit dem Skalarprodukt

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(x)\phi(x) d^3x . \quad (3.1)$$

Er soll (2.17) entsprechend normiert sein. Allgemeiner sind Zustände eines quantenmechanischen Systems Vektoren ψ eines Hilbertraums \mathcal{H} über \mathbb{C} mit Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle$: Sie sind stets normiert, d.h.

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1 , \quad (3.2)$$

und stellen bis auf die Äquivalenz

$$|\psi\rangle \sim e^{i\alpha}|\psi\rangle , \quad (\alpha \in \mathbb{R}) \quad (3.3)$$

die **Zustände** des Systems dar.

Observablen und Dynamik sind der Quantenmechanik durch **Operatoren** dargestellt, d.h. (etwas ungenau) durch lineare Abbildungen $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Man schreibt

$$\langle\phi|A|\psi\rangle := \langle\phi|A\psi\rangle .$$

Der zu A **adjungierte Operator** $A^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist durch

$$\langle\phi|A^*\psi\rangle := \langle A\phi|\psi\rangle , \quad (|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}) \quad (3.4)$$

erklärt. Den **Observablen** entsprechen **selbstadjungierte** Operatoren, $A^* = A$. Wir illustrieren den Begriff und die Zuordnung anhand eines Beispiels: ein Teilchen in einer Dimension, also $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. Das Ereignis P , das Teilchen in $\Omega \subset \mathbb{R}$ zu finden (ja: $P = 1$, nein: $P = 0$) ist durch den orthogonalen Projektor $P : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ($P = P^2 = P^*$),

$$(P\psi)(x) = P_\Omega(x)\psi(x) , \quad (3.5)$$

(P_Ω : charakteristische Funktion von Ω) gegeben, insofern

•

$$\langle\psi|P|\psi\rangle = \int \bar{\psi}(x)P_\Omega(x)\psi(x)dx = \int_\Omega |\psi(x)|^2 dx$$

die **Wahrscheinlichkeit** des Ereignisses ist;

- Die **Eigenwerte** von P , d.h. $\lambda = 0, 1$, die möglichen **Ergebnisse** der Messung sind.
- Für die entsprechenden **Eigenvektoren**, $P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, das Ergebnis **deterministisch** ausfällt: $\langle\psi|P|\psi\rangle = 0$ oder 1 .

Das Ergebnis der Messung einer physikalischen Grösse (Observable) ist i.A. nicht auf 1, 0 eingeschränkt, z.B. des Orts $x \in \mathbb{R}$ des Teilchens. Damit verbunden ist der **Ortsoperator** $x : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ($x = x^*$)

$$x : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$$

(Multiplikation mit x), im Sinne, dass

$$\langle x \rangle_\psi := \langle \psi | x | \psi \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx \quad (3.6)$$

der **Erwartungswert** der Messung ist.

Für einen allfälligen Eigenvektor $|\psi\rangle$,

$$x\psi(x) = \lambda\psi(x), \quad (3.7)$$

gilt $\psi(x) = 0$, ($x \neq \lambda$), also $|\psi\rangle = 0$ im Sinne von $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Formal hat (3.7) die Lösung $\psi(x) = \delta(x - \lambda)$, aber $\psi \notin L^2(\mathbb{R})$. Bezeichnet man diesen **uneigentlichen Zustand** zum Eigenwert $\lambda = x$ mit $|x\rangle$, so ist

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

und, vgl. (3.5), $\langle \phi | P | \psi \rangle = \int_\Omega \bar{\phi}(x)\psi(x)dx = \int_\Omega \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$, also formal

$$P = \int_\Omega dx |x\rangle \langle x|. \quad (3.8)$$

Insbesondere ist

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \quad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbf{1},$$

womit die $\{|x\rangle\}$ eine uneigentliche Orthonormalbasis bilden (Dirac- statt Kronecker- δ , Integral statt Summe).

Das **Schwankungsquadrat** der Messung,

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_\psi := \int (x - \langle x \rangle_\psi)^2 |\psi(x)|^2 dx = \|(x - \langle x \rangle_\psi)\psi\|^2 > 0,$$

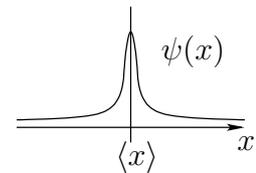
ist zwar stets positiv, da x keine Eigenvektoren hat, kann aber durch passende Wahl von $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ beliebig klein gemacht werden. Dies motiviert die auf $\dim \mathcal{H} = \infty$ zugeschnittene **Definition:**

Das **Spektrum** $\sigma(A)$ eines selbstadjungierten Operators $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist erklärt durch:

$$\lambda \in \sigma(A) : \iff \text{zu jedem } \varepsilon > 0 \text{ existiert ein Zustand } \psi_\varepsilon, (\|\psi_\varepsilon\| = 1) \text{ so, dass} \\ \|(A - \lambda)\psi_\varepsilon\| \leq \varepsilon. \quad (3.9)$$

Bemerkungen. 1. Ein Eigenwert λ liegt vor, falls (3.9) mit $\varepsilon = 0$ gilt; folglich liegt er in $\sigma(A)$. Ferner ist $\lambda \in \mathbb{R}$, da $\bar{\lambda}\langle \psi | \psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle = \langle \psi | A\psi \rangle = \lambda\langle \psi | \psi \rangle$ wegen $A = A^*$. Es gilt aber auch $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ (s. Anhang A).

2. Im **endlich-dimensionalen** Fall, $\dim \mathcal{H} < \infty$, ist die Einheitskugel $\{\psi \in \mathcal{H} | \|\psi\| = 1\}$ kompakt, also folgt aus (3.9): $\|(A - \lambda)\psi\| = 0$ für ein $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$. Also: $\sigma(A) = \{\text{Eigenwerte von } A\}$.



Für den Ortsoperator ist also $\sigma(x) = \mathbb{R}$:

- Das Spektrum von x besteht aus den möglichen Ergebnisse seiner Messung.

Analog für den **Impulsoperator**. Die (uneigentlichen) Eigenzustände sind nach (2.1)

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$$

mit Eigenwert p , aber $\psi_p \notin L^2(\mathbb{R})$. Notation: $|p\rangle$. Für (2.2) ist

$$(p\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int p e^{ipx/\hbar} \widehat{\psi}(p) dp = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} . \quad (3.10)$$

Der Operator

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (3.11)$$

ist ebenfalls selbstadjungiert (partielle Integration) und (3.10) besagt

$$p = \mathcal{F}^{-1} x \mathcal{F} , \quad (3.12)$$

wobei $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$

$$(\mathcal{F}\psi)(p) \equiv \widehat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx = \langle p|\psi\rangle$$

die Fouriertransformation ist. \mathcal{F} ist **unitär**, $\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F}^*$ (Parseval Identität). Folglich ist auch $\sigma(p) = \mathbb{R}$ und die Zustände $|p\rangle$ mit Wellenfunktion ψ_p bilden eine uneigentliche Orthonormalbasis,

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') , \quad \int dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1} ,$$

Eine allgemeinere, präzise Definition eines uneigentlichen Zustandes wird sich dank des Spektralsatzes erübrigen. Trotzdem sei bemerkt: Man könnte vermuten, dass ψ_p auch für $p \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ als einen solchen zugelassen werden sollte, da ja nach wie vor $-i\hbar\psi'_p = p\psi_p$, obschon $\psi_p(x)$ nun exponentiell wachsend statt beschränkt ist. Dem ist nicht so, denn nur für $p_0 \in \mathbb{R}$ stellt ψ_{p_0} eine vernünftige Idealisierung von Zuständen $\psi_n \in L^2(\mathbb{R})$ dar: “ $\psi_n \rightarrow \psi_{p_0}$ ” mit $\|\psi_n\|^{-1} \|(p - p_0)\psi_n\| \rightarrow 0$, ($n \rightarrow \infty$).

Die Verallgemeinerung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation auf beliebige Observablen beruht auf dem Spektralsatz, den wir zunächst im Fall eines endlich-dimensionalen Zustandsraums \mathcal{H} in Erinnerung rufen: Selbstadjungerte Operatoren besitzen eine orthonormierte Eigenbasis $\{\phi_i\}$,

$$A|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle , \\ \langle \phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} , \quad \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \mathbf{1} ,$$

und damit die Spektraldarstellung

$$A = \sum_i a_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a ,$$

wobei $P_a = \sum_{i:\alpha_i=a} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = P_a^* = P_a^2$ der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert a ist. Sie ermöglicht, Funktionen von Operatoren zu definieren,

$$f(A) := \sum_{a \in \sigma(A)} f(a)P_a, \quad (3.13)$$

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

$$(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2)(A) = \alpha_1 f_1(A) + \alpha_2 f_2(A), \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}), \quad (3.14)$$

$$(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A), \quad (3.15)$$

$$\bar{f}(A) = f(A)^*, \quad (3.16)$$

$$f(A) = \begin{cases} \mathbb{1} & \text{für } f(x) \equiv 1, \\ A & \text{für } f(x) = x, \end{cases} \quad (3.17)$$

sowie Stetigkeit bzgl. f , auf die wir nicht näher eingehen.

Die Definition (3.13) besitzt eine Verallgemeinerung auf $\dim \mathcal{H} = \infty$, und zwar den **Spektralsatz**:

Satz. Sei $A = A^*$. Dann gibt es eine eindeutige Zuordnung

$$f \mapsto f(A) \quad (3.18)$$

mit den Eigenschaften (3.14–3.17).

Beweis. s. Anhang A.

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

$$P_I(A) = P_I(A)^* = P_I(A)^2$$

(folgt aus (3.15, 3.16)), und für disjunkte Intervalle I_1, I_2 gilt

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

(folgt aus (3.14)). Für jeden Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist

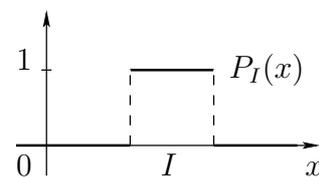
$$W_\psi(I) = \langle\psi|P_I(A)|\psi\rangle$$

ein **Wahrscheinlichkeitsmass** auf \mathbb{R} :

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

Interpretation. $W_\psi(I)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass A im Zustand $|\psi\rangle$ einen Messwert $a \in I$ annimmt. (Dies ist konsistent mit (3.3).)

Insbesondere, wenn A selbst durch einen orthogonalen Projektor P gegeben ist, so ist $\langle\psi|P|\psi\rangle$ die Wahrscheinlichkeit im Zustand $|\psi\rangle$ für das Eintreten des Ereignisses, dem P zugeordnet ist. Dieses ist sicher, genau dann falls $P|\psi\rangle = |\psi\rangle$.



Beispiel. Der Projektor $P = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ hat den einfachen Eigenwert 1 mit Eigenvektor $|\varphi\rangle$ und ist somit dem Ereignis “das System ist im Zustand $|\varphi\rangle$ ” zugeordnet, denn genau in diesem Zustand ist sein Eintreten sicher. Für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ ist

$$\langle\psi|P|\psi\rangle = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2$$

die Wahrscheinlichkeit, es in $|\varphi\rangle$ zu finden.

Für beliebige Observablen A ergeben sich aus obiger Interpretation einige Folgerungen:

Erwartungswert. Die Wahrscheinlichkeit eines Messwerts in $(\lambda, \lambda+d\lambda]$ ist $dW_\psi((-\infty, \lambda])$. Der Erwartungswert von A im Zustand ψ folglich

$$\langle A \rangle_\psi = \int \lambda dW_\psi((-\infty, \lambda]) = \langle\psi|A|\psi\rangle, \quad (3.19)$$

da $\int \lambda dP_{(-\infty, \lambda]}(x) = x$, vgl. (3.14, 3.17).

Beispiel. Für den Ortsoperator x ist $f(x)$ Multiplikation mit der Funktion $f(x)$; somit ist $P_\Omega(x)$ identisch mit (3.5, 3.8). Für den Impulsoperator p ist nach (3.12)

$$f(p) = \mathcal{F}^{-1}f(x)\mathcal{F}, \quad \text{d.h.} \quad \widehat{f(p)\psi}(p) = f(p)\widehat{\psi}(p),$$

bzw.

$$(f(p)\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int f(p)e^{ipx/\hbar}\widehat{\psi}(p)dp. \quad (3.20)$$

Das Ereignis, dass der Messwert des Impuls p in I liegt, hat die Wahrscheinlichkeit

$$\langle\psi|P_I(p)|\psi\rangle = \int_I |\widehat{\psi}(p)|^2 dp.$$

Messwerte. Allgemein sind nun $\lambda \in \sigma(A)$ die möglichen Messwerte der Observablen A :

$$\begin{aligned} \lambda \in \sigma(A) &\iff P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0, \quad \forall \varepsilon > 0, \\ \text{also:} &\iff \forall \varepsilon \exists \psi_\varepsilon (\|\psi_\varepsilon\| = 1) \text{ mit } W_{\psi_\varepsilon}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) > 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Zum Beweis bemerken wir zunächst, dass

$$f \geq g \implies f(A) \geq g(A).$$

Dies folgt aus dem Spezialfall $g = 0$ (also $f = (\sqrt{f})^2 \geq 0$), der seinerseits aus

$$\langle\psi|f(A)|\psi\rangle = \langle\psi|f^{1/2}(A)f^{1/2}(A)|\psi\rangle = \langle f^{1/2}(A)\psi|f^{1/2}(A)\psi\rangle \geq 0$$

folgt.

\Leftarrow : Dann gibt es einen Zustand $|\psi_\varepsilon\rangle$ mit $P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A)|\psi_\varepsilon\rangle = |\psi_\varepsilon\rangle$. Aus $(x-\lambda)^2 P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x) \leq \varepsilon^2$ folgt

$$\|(A-\lambda)\psi_\varepsilon\|^2 = \langle\psi_\varepsilon|(A-\lambda)^2|\psi_\varepsilon\rangle \leq \langle\psi_\varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle,$$

also $\lambda \in \sigma(A)$ nach (3.9).

\Rightarrow : Aus $P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) = 0$ für ein $\varepsilon > 0$ folgt $|\psi\rangle = (1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A))|\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle$. Wegen $(x-\lambda)^2(1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x)) \geq \varepsilon^2(1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x))$ folgt nun

$$\|(A-\lambda)\psi\|^2 \geq \varepsilon^2\|\psi\|^2$$

für alle $|\psi\rangle$, also $\lambda \notin \sigma(A)$.

Schwankungsquadrat und Unschärferelation. Das mittlere Schwankungsquadrat einer Observablen A im Zustand ψ ist gegeben als

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi := \langle(A - \langle A \rangle_\psi)^2\rangle_\psi = \|(A - \langle A \rangle_\psi)\psi\|^2 = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2.$$

Somit ist

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi = 0 \iff A\psi = \lambda\psi : \quad (3.22)$$

Die Eigenzustände von A sind gerade diejenigen Zustände, in denen A mit Sicherheit (Schwankung Null) einen bestimmten Wert annimmt, nämlich den entsprechenden Eigenwert.

Zwei Observablen A, B haben in der Regel keinen gemeinsamen Eigenvektor, d.h. es gibt keinen Zustand des Systems, in dem A und B scharfe Werte annehmen. Ein quantitativer Ausdruck hierfür ist die Unschärferelation (Heisenberg 1925):

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi \langle(\Delta B)^2\rangle_\psi \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle_\psi|^2. \quad (3.23)$$

Beweis. Aus $|\langle\phi|\psi\rangle| \leq \|\phi\|\|\psi\|$ folgt

$$|\langle\psi|[A, B]\psi\rangle| = |\langle A\psi|B\psi\rangle - \langle B\psi|A\psi\rangle| \leq 2\|A\psi\|\|B\psi\|.$$

Quadriere und ersetze $A \rightarrow A - \langle A \rangle_\psi$, $B \rightarrow B - \langle B \rangle_\psi$ (also $[A, B] \rightarrow [A, B]$); es resultiert (3.23).

Bemerkung. Der Beweis beinhaltet zwei Ungleichungen: die Cauchy-Schwarz Ungleichung und die Dreiecksungleichung in der Form $|z - \bar{z}| \leq 2|z|$. Gleichheit gilt wenn ϕ, ψ linear abhängig sind, bzw. wenn z rein imaginär ist. Daraus folgt: In (3.23) herrscht Gleichheit, genau dann falls

$$\alpha(A - a)\psi + \beta(B - b)\psi = 0 \quad (3.24)$$

mit $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$ und $\bar{\alpha}\beta$ rein imaginär; dann ist $a = \langle A \rangle_\psi$ und $b = \langle B \rangle_\psi$.

Beispiel. Auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ sind

$$x_k : \psi(x) \mapsto x_k \psi(x) ; \quad p_k : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \quad (3.25)$$

die Komponenten von Ort und Impuls. Es gilt

$$i[p_k, x_l] = \hbar \delta_{kl}$$

und damit

$$\langle(\Delta p_k)^2\rangle \langle(\Delta x_l)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{kl}. \quad (3.26)$$

Im analogen 1-dimensionalen Fall, $\langle(\Delta p)^2\rangle \langle(\Delta x)^2\rangle \geq \hbar^2/4$, ist das Produkt der Schwankungen minimal genau für die Zustände

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{C}{\pi}} e^{iax/\hbar} e^{-C(x-b)^2/2}$$

mit $C > 0$. Dies sind in der Tat bis auf die Normierung die Lösungen der Differentialgleichung (3.24) mit $A = p$, $B = x$. Der Zusatzbedingung entspricht C reell.

Präparation der Zustände. Die allgemeine Interpretation der Quantenmechanik auf S. 25 setzt eine konkrete Zuordnung zwischen physikalischen Observablen und selbstadjungierten Operatoren voraus, wie sie in den vorangehenden Beispielen zum Ausdruck kommt; grundsätzlich auch eine ebensolche für Zustände. Letztere kann aber auf erstere zurückgeführt werden mittels der Vorschrift (im einfachsten Fall): Liefert die Messung von A den einfachen Eigenwert λ , so ist unmittelbar danach dessen Eigenvektor der Zustand des Systems. (Dies ist konsistent mit (3.3).)

Dynamik. Die Bewegungsgleichung ist die Schrödinger-Gleichung in der allgemeinen Form

$$i\hbar \frac{d\psi_t}{dt} = H|\psi_t\rangle, \quad (H = H^*), \quad (3.27)$$

geschrieben als gewöhnliche Differentialgleichung für die vektorwertige Funktion $t \mapsto |\psi_t\rangle \in \mathcal{H}$. Der Operator H heisst **Hamiltonoperator**.

Beispiele. 1. Ein Teilchen im Potential $V(x)$ (vgl. (2.4)):

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V = \sum_{k=1}^3 \frac{p_k^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (3.28)$$

mit x_k, p_k wie in (3.25). Die über die Vorschrift (3.25) erzielte Übersetzung “Hamiltonfunktion \rightarrow Hamiltonoperator” heisst **kanonische Quantisierung**.

2. N -Teilchensystem (2.13):

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (3.29)$$

auf $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Hier indiziert $k = 1, \dots, N$ die Teilchen, entsprechend wirkt $\vec{p}_k^2 = -\hbar^2 \Delta_k$ auf die Variable $\vec{x}_k \in \mathbb{R}^3$ in $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$.

3. Ein Teilchen der Ladung e im elektromagnetischen Feld:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{x}, t) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^3) \quad (3.30)$$

entsteht wie (3.28) und (3.29) durch kanonische Quantisierung der klassischen Hamiltonfunktion, wobei die elektromagnetischen Potentiale $A_k(\vec{x}, t)$ und $\varphi(\vec{x}, t)$ wieder als Multiplikationsoperatoren aufzufassen sind. Falls das äussere Feld von t abhängt, ist das System nicht autonom. Bekanntlich (vgl. Elektrodynamik) bleiben die elektromagnetischen Felder unverändert unter **Eichtransformationen**

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi,$$

mit einer beliebigen Funktion $\chi = \chi(\vec{x}, t)$; nicht aber der Hamiltonoperator, $H \rightarrow H'$, noch der Zustand. Hingegen erfüllt

$$\psi'(\vec{x}, t) = e^{ie\chi(\vec{x}, t)/\hbar c} \psi(\vec{x}, t) \quad (3.31)$$

die Schrödinger-Gleichung mit Hamiltonoperator H' . Dies folgt aus

$$\begin{aligned} e^{-ie\chi/\hbar c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi' \right) e^{ie\chi/\hbar c} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \\ e^{-ie\chi/\hbar c} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right) e^{ie\chi/\hbar c} &= \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} : \end{aligned} \quad (3.32)$$

wie in der klassischen Mechanik ist $m\vec{v} = \vec{p} - (e/c)\vec{A}$ eichinvariant.

Allgemein wird die Dynamik eines autonomen Systems (H in (3.27) unabhängig von t) beschrieben durch den Propagator (Lösungsabbildung)

$$U(t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi_0 \mapsto \psi_t \quad (3.33)$$

von (3.27), die den (beliebigen) Anfangszustand ψ_0 in den Zustand zur Zeit t abbildet. Die Operatoren $U(t)$ bilden eine 1-parametrische Gruppe ($U(0) = \mathbf{1}$, $U(t)U(s) = U(t+s)$), die wegen

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_t | \psi_t \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle H \phi_t | \psi_t \rangle - \langle \phi_t | H \psi_t \rangle] = 0$$

(benutze $H = H^*$) unitär ist: $\langle U(t)\phi_0 | U(t)\psi_0 \rangle = \langle \phi_t | \psi_t \rangle = \langle \phi_0 | \psi_0 \rangle$. Die Gruppe genügt der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = HU(t), \quad (3.34)$$

deren Lösung

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (3.35)$$

ist. Im Fall $\dim \mathcal{H} < \infty$ ist dies über die Exponentialreihe erklärt. Ansonsten und allgemeiner über den Spektralsatz (3.18). Umgekehrt hat jede 1-parametrische unitäre Gruppe $U(t)$ eine selbstadjungierte Erzeugende (Satz von Stone).

Für nicht-autonome Systeme tritt anstelle von $U(t)$ eine 2-parametrische unitäre Schar $U(t, s) : \psi_s \mapsto \psi_t$, die den (beliebigen) Zustand zur Zeit s in den Zustand zur Zeit t abbildet. Entsprechend ist dann $U(t, t) = \mathbf{1}$, $U(t, r)U(r, s) = U(t, s)$.

Bilder. Erwartungswerte verändern sich im Laufe der Zeit gemäß

$$\langle e^{-iHt/\hbar} \psi | A | e^{-iHt/\hbar} \psi \rangle = \langle \psi | e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} | \psi \rangle =: \langle A \rangle_t. \quad (3.36)$$

In der Schreibweise links findet wie in (3.33) eine zeitliche Entwicklung der Zustände statt, $\psi \rightarrow e^{-iHt/\hbar} \psi$ (**Schrödinger-Bild**). In jener rechts findet wie in (2.26) eine der Observablen statt, $A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$ (**Heisenberg-Bild**) und die Bewegungsgleichung ist (2.26).

Für die Erwartungswerte selbst gilt

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle_t.$$

Instruktiv ist das Beispiel (3.28) des Teilchens im Kraftfeld $\vec{F}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla}V(\vec{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x_k \rangle_t &= \frac{1}{2m} \left\langle \frac{i}{\hbar} [\vec{p}^2, x_k] \right\rangle_t = \frac{1}{m} \langle p_k \rangle_t, \\ \frac{d}{dt} \langle p_k \rangle_t &= \left\langle \frac{i}{\hbar} [V, p_k] \right\rangle_t = \langle F_k \rangle_t. \end{aligned}$$

Ist nun $V(\vec{x}, t)$ ein Polynom in x vom Grad ≤ 2 (Beispiele: freies Teilchen, homogenes Feld, harmonischer Oszillator), so ist $\vec{F}(\vec{x}, t)$ (affin) linear in \vec{x} und deshalb $\langle F_k \rangle_t = F_k(\langle x \rangle_t, t)$. Dann erfüllen die Erwartungswerte von Ort und Impuls exakt die klassischen Bewegungsgleichungen! Näherungsweise gilt dies, solange die Welle $\psi(\vec{x}, t)$ in Gebieten lokalisiert ist, in denen $\vec{F}(\vec{x}, t)$ annähernd linear verläuft.

Die Äquivalenz der beiden Bilder ist aus (3.36) offensichtlich. Allgemeiner ist die Darstellung eines quantenmechanischen Systems nur bis auf unitäre Äquivalenz eindeutig: Unter einer unitären Abbildung $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, bei der Zustände und Observablen gemäss $\psi \mapsto U\psi$, $A \mapsto UAU^*$ transformieren, bleiben die physikalischen Aussagen dieselben. Speziell entspricht (3.35) dem Übergang vom Heisenberg- zum Schrödinger-Bild.

3.2 Das freie Teilchen

Die Schrödinger-Gleichung des freien Teilchens

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi$$

(mit $\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$) löst man am einfachsten über Fouriertransformation, vgl. (3.20),

$$\begin{array}{ccc} \psi(\vec{x}, 0) & \longrightarrow & \psi(\vec{x}, t) \\ \downarrow \mathcal{F} & & \mathcal{F}^{-1} \uparrow \\ \widehat{\psi}(\vec{p}, 0) & \xrightarrow[\text{mit } e^{-i\vec{p}^2 t/2m\hbar}]{\text{Multiplikation}} & \widehat{\psi}(\vec{p}, t) \end{array}$$

d.h.:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}^2 t/2m\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \widehat{\psi}(\vec{p}, 0) d^3 p \\ &= \int d^3 y \underbrace{(2\pi)^{-3} \int d^3 k e^{i[\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y}) - \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}t]} \psi(\vec{y}, 0)}_{g(\vec{x}-\vec{y}, t)} \end{aligned} \quad (3.37)$$

mit $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ (Faltung). Mit

$$\int e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - a\vec{k}^2)} d^3 k = \underbrace{\int e^{-ia(\vec{k} + \frac{\vec{x}}{2a})^2} d^3 k}_{(|a|^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\text{sgn } a)s^2} ds)^3} \cdot e^{i\frac{\vec{x}^2}{4a}}$$

und dem bedingt konvergenten (Fresnel-)Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm is^2} ds = \sqrt{\pi} e^{\pm i\frac{\pi}{4}} \quad (3.38)$$

findet man

$$g(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{3\pi}{4}\text{sgn } t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar|t|} \right)^{3/2} e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}}.$$

Für integrable $|\psi(\vec{y}, 0)|$ folgt damit aus (3.37)

$$|\psi(\vec{x}, t)| \leq \sup_{\vec{x}} |g(\vec{x}, t)| \cdot \int |\psi(\vec{y}, 0)| d^3y \leq \text{konst} \cdot |t|^{-3/2}$$

für alle \vec{x} : das Wellenpaket $\psi(\vec{x}, t)$ zerfliesst. Dies ist ein weiteres Anzeichen, dass $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ nicht etwa als Massendichte eines ausgedehnten Teilchens, sondern (vgl. (2.14)) als Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden bei \vec{x} (zur Zeit t) eines punktförmigen Teilchens aufzufassen ist.

Für grosse t lässt sich (3.37) in führender Ordnung ausrechnen: mit $\sqrt{it} = e^{\frac{i\pi(\text{sgn } t)}{4}} \sqrt{|t|}$ ist

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}} \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\frac{m\vec{x}\cdot\vec{y}}{\hbar t}} \underbrace{e^{i\frac{m\vec{y}^2}{2\hbar t}}}_{1+O(\vec{y}^2/\hbar t)} \psi(\vec{y}, 0) \\ &= e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}} \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} \widehat{\psi}\left(\frac{m\vec{x}}{t}, 0\right) + O(t^{-5/2}), \end{aligned}$$

gleichmässig in \vec{x} , falls $|\vec{y}^2\psi(\vec{y}, 0)|$ integrel ist. Darin kommt der Zusammenhang von (3.37) zur klassischen freien Bewegung

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) + \frac{\vec{p}(0)}{m}t, \quad \vec{p}(t) = \vec{p}(0)$$

zum Ausdruck: für letztere ist

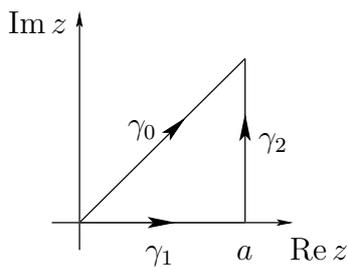
$$m \frac{\vec{x}(t)}{t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \vec{p}(0),$$

für erstere ist die Wahrscheinlichkeit, $m\vec{x}/t$ in $G \subset \mathbb{R}^3$ zu finden, gleich

$$W = \int_{\frac{m\vec{x}}{t} \in G} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \int_G |\widehat{\psi}(\vec{p}, 0)|^2 d^3p,$$

d.h. für grosse t durch die Impulsverteilung im Anfangszustand gegeben.

Berechnung des Fresnel-Integrals



$$\begin{aligned} \gamma_0 : \tau \in (0, \sqrt{2}a) &\mapsto z = e^{\frac{i\pi}{4}} \tau, \\ \gamma_1 : x \in (0, a) &\mapsto z = x, \\ \gamma_2 : t \in (0, 1) &\mapsto z = a(1 + it). \end{aligned}$$

Einerseits ist

$$\int_{\gamma_0} e^{-z^2} dz = e^{\frac{i\pi}{4}} \int_0^{\sqrt{2}a} e^{-i\tau^2} d\tau,$$

andererseits, da e^{-z^2} innerhalb von $\gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_0$ analytisch ist,

$$\int_{\gamma_0} e^{-z^2} dz = \int_{\gamma_1 + \gamma_2} e^{-z^2} dz = \underbrace{\int_0^a e^{-x^2} dx}_{\xrightarrow{a \rightarrow \infty} \sqrt{\pi}/2} + i \int_0^1 \underbrace{dt a e^{-a^2(1-t^2) + 2ita}}_{\square},$$

wobei

$$|\square| = \begin{cases} \leq C(1-t^2)^{-1/2}, \\ \xrightarrow{a \rightarrow \infty} 0 \text{ punktweise.} \end{cases}$$

Das letzte Integral verschwindet für $a \rightarrow \infty$ (dominierte Konvergenz). Also

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\tau^2} d\tau = 2 \int_0^{\infty} e^{-i\tau^2} d\tau = \sqrt{\pi} e^{-i\pi/4}.$$

3.3 Der harmonische Oszillator

Die klassische Hamiltonfunktion des 1-dimensionalen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} f x^2$$

vereinfacht sich nach der kanonischen Transformation

$$x \rightarrow \frac{1}{(fm)^{1/4}} x, \quad p \rightarrow (fm)^{1/4} p$$

zu

$$H = \frac{\omega}{2} (p^2 + x^2),$$

wobei $\omega = \sqrt{f/m}$ die Oszillatorfrequenz ist. Die Bahnen sind dann Kreise im Phasenraum:

$$x(t) + ip(t) = (x(0) + ip(0)) e^{-i\omega t}. \quad (3.39)$$

Quantenmechanisch lautet der Hamiltonoperator nach kanonischer Quantisierung

$$H = \frac{\omega}{2} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right)$$

bzgl. der dimensionslosen Variablen $\xi = x/\sqrt{\hbar}$ (oder direkt $\xi = \sqrt{\omega m \hbar^{-1}} x$ bzgl. der ersten Variablen x). Nützlich erweisen sich die Operatoren (Dirac)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (x + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right), \quad (\text{Vernichtungsoperator}),$$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (x - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right), \quad (\text{Erzeugungsoperator}).$$

Damit ist

$$[a, a^*] = 2 \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right] = 1,$$

$$N := a^* a = \frac{1}{2} \left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - \underbrace{\left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right]}_{=1} \right),$$

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

Für die Eigenwerte E von H gilt damit

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (3.40)$$

wobei n ein Eigenwert von N ist. Wir zeigen gleich: dies sind genau die Zahlen

$$n \in \mathbb{N}. \quad (3.41)$$

Folglich ist $E_0 = \hbar\omega/2$ die Energie des **Grundzustands** $n = 0$ (Nullpunktsenergie). Zunächst ist $n \geq 0$, denn aus $N|\psi\rangle = n|\psi\rangle$ folgt

$$n\|\psi\|^2 = \langle\psi|N|\psi\rangle = \|a\psi\|^2 \geq 0.$$

Für $n = 0$ gibt es einen Eigenvektor $|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} a|\psi_0\rangle = 0 &\iff \frac{d\psi_0}{d\xi} + \xi\psi_0(\xi) = 0 \\ &\iff \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4}e^{-\xi^2/2}, \quad (\text{bis auf ein Vielfaches}). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Die Normierung, $\|\psi_0\|^2 \equiv \int |\psi_0(\xi)|^2 d\xi = 1$, und die Wahl der Phase, $\psi_0(\xi) > 0$, machen ψ_0 eindeutig. Eigenvektoren $|\psi_n\rangle$ zu $n = 1, 2, \dots$ ($N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$, $\|\psi_n\|^2 = 1$) findet man rekursiv dank

$$\begin{aligned} Na^* &= a^*aa^* = a^*(a^*a + 1) = a^*(N + 1), \\ Na^*|\psi_{n-1}\rangle &= a^*(N + 1)|\psi_{n-1}\rangle = na^*|\psi_{n-1}\rangle, \\ \|a^*|\psi_{n-1}\rangle\|^2 &= \langle\psi_{n-1}|\underbrace{aa^*}_{N+1}|\psi_{n-1}\rangle = n\langle\psi_{n-1}|\psi_{n-1}\rangle \end{aligned}$$

als

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^*|\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n|\psi_0\rangle. \quad (3.43)$$

Die $|\psi_n\rangle$'s sind orthogonal, da Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerte von $N = N^*$. Die entsprechenden Wellenfunktionen sind

$$\langle\xi|\psi_n\rangle = \psi_n(\xi) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}}_{\equiv H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}},$$

wobei $H_n(\xi)$ ein Polynom mit führendem Term $(2\xi)^n$ ist:

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2} \underbrace{\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n}_{-e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2}} e^{-\xi^2/2} = e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}, \quad (\text{Hermite Polynome}).$$

Die endlichen Linearkombination der $|\psi_n\rangle$'s sind die Funktionen der Form $e^{-\xi^2/2}P(\xi)$ (P ein Polynom), und diese sind dicht in $L^2(\mathbb{R})$: steht nämlich $|\psi\rangle \in L^2(\mathbb{R})$ orthogonal auf ihnen allen, so ist

$$f(z) := \int e^{-\xi^2/2}\psi(\xi)e^{iz\xi}d\xi$$

eine analytische Funktion mit

$$\left. \frac{d^n f}{dz^n} \right|_{z=0} = \int e^{-\xi^2/2} (i\xi)^n \psi(\xi) = 0 ,$$

also $f \equiv 0$, da f durch die Taylorreihe gegeben ist, und $\psi = 0$, da $e^{-\xi^2/2}\psi(\xi)$ die Fouriertransformierte von f ist. Insbesondere bilden die $|\psi_n\rangle$, ($n \in \mathbb{N}$) eine orthonormierte Basis für $L^2(\mathbb{R})$ (**Besetzungszahlbasis**) und das Spektrum von H ist durch (3.40, 3.41) ausgeschöpft.

Verschiebungsoperatoren. Die Erzeugende der 1-parametrischen Gruppe der Translationen

$$U(s) : \psi(x) \mapsto \psi(x - s)$$

ist

$$i\hbar \left. \frac{d\psi}{ds} \right|_{s=0} = -i\hbar \frac{d\psi}{ds} = p\psi , \quad \text{d.h.} \quad U(s) = e^{-ips/\hbar} .$$

Analog ist $e^{ixs/\hbar}$ eine Translation um s im Impulsraum: $|p\rangle \mapsto |p + s\rangle$. Für $\alpha \in \mathbb{C}$ lässt sich

$$V(\alpha) := e^{\alpha a^* - \bar{\alpha} a}$$

wegen

$$\alpha a^* - \bar{\alpha} a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [\alpha(x - ip) - \bar{\alpha}(x + ip)] = i\sqrt{2\hbar} [(\text{Im } \alpha)x - (\text{Re } \alpha)p] / \hbar \quad (3.44)$$

als Translation im Phasenraum um

$$(\Delta x, \Delta p) = \sqrt{2\hbar} (\text{Re } \alpha, \text{Im } \alpha) , \quad \text{bzw.} \quad \Delta x + i\Delta p = \sqrt{2\hbar} \alpha$$

auffassen. Eigenschaften:

- i) $V(\alpha)^* = V(\alpha)^{-1} = V(-\alpha)$,
- ii) $V(\alpha) = e^{\alpha a^*} e^{-\bar{\alpha} a} e^{-|\alpha|^2/2}$,
- iii) $aV(\alpha) = V(\alpha)(a + \alpha)$.

(i) folgt aus (3.44); (ii) daraus, dass allgemein gilt

$$e^{X+Y} = e^X e^Y e^{-[X,Y]/2} ,$$

falls $[[X, Y], X] = [[X, Y], Y] = 0$, wie wir nun zeigen. Zunächst folgt

$$\frac{d}{dt} (e^{-tX} Y e^{tX}) = -e^{-tX} [X, Y] e^{tX} = -[X, Y] ,$$

also

$$e^{-tX} Y e^{tX} = Y - t[X, Y] ; \quad (3.45)$$

damit ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (e^{-tX} e^{t(X+Y)} e^{-tY} e^{t^2[X,Y]/2}) = \\ e^{-tX} Y e^{t(X+Y)} e^{-tY} e^{t^2[X,Y]/2} + e^{-tX} e^{t(X+Y)} e^{-tY} (-Y + t[X, Y]) e^{t^2[X,Y]/2} = 0 , \end{aligned} \quad (3.46)$$

da (3.45) auch für $X + Y$ anstelle von X gilt. Damit ist die Klammer in (3.46) gleich 1 für $t \in \mathbb{R}$. Die Voraussetzung ist für

$$X = \alpha a^* , \quad Y = -\bar{\alpha} a , \quad [X, Y] = -|\alpha|^2 [a^*, a] = |\alpha|^2$$

erfüllt. (iii) folgt aus (3.45) für $X = \alpha a^* - \bar{\alpha} a$, $Y = a$ und $t = 1$:

$$V(\alpha)^{-1} a V(\alpha) = a - \alpha [a^*, a] = a + \alpha .$$

Die **kohärenten Zustände** sind definiert als

$$|\alpha\rangle = V(\alpha)|0\rangle \equiv V(\alpha)|\psi_0\rangle , \quad (\alpha \in \mathbb{C}) .$$

Wegen (iii), (3.42) ist

$$a|\alpha\rangle = aV(\alpha)|0\rangle = V(\alpha)(a + \alpha)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle ,$$

d.h. $|\alpha\rangle$ ist ein Eigenvektor von a zum Eigenwert α .

Bemerkung. a^* hat hingegen keine Eigenwerte: wäre $a^*|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, so

$$\lambda\langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi_n|a^*\psi\rangle = \langle a\psi_n|\psi\rangle = \begin{cases} \sqrt{n}\langle\psi_{n-1}|\psi\rangle , & (n \neq 0) , \\ 0 , & (n = 0) . \end{cases}$$

Ist $\lambda = 0$, so folgt $|\psi\rangle = 0$; ist $\lambda \neq 0$, so $\langle\psi_0|\psi\rangle = 0$ und damit wieder $|\psi\rangle = 0$.

Insbesondere kennzeichnet α den Erwartungswert von Ort x und Impuls p im Zustand $|\alpha\rangle$:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\langle x \rangle_\alpha + i\langle p \rangle_\alpha) = \langle a \rangle_\alpha = \alpha .$$

Kohärente Zustände haben eine **klassische Dynamik**:

$$e^{-iHt/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}|\alpha_t\rangle , \quad (3.47)$$

wobei $\alpha_t = \alpha e^{-i\omega t}$ die klassische Bahn (3.39) ist, die dem Phasenraumpunkt $\alpha := (x + ip)/\sqrt{2\hbar}$ entspringt. (Die Phase rechts in (3.47) könnte durch Verschiebung des Energienullpunkts eliminiert werden.) Dies folgt mit (ii), (3.42) aus

$$|\alpha\rangle = V(\alpha)|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^*} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle ,$$

$$e^{-iHt/\hbar} |\psi_n\rangle = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |\psi_n\rangle = e^{-i\omega\frac{t}{2}} (e^{-i\omega t})^n |\psi_n\rangle .$$

3.4 Die WKB-Näherung

(Jeffreys 1923; Wentzel, Kramers, Brillouin 1926) Die Eigenwerte (3.40) des harmonischen Oszillators stimmen mit den nach (1.26) erlaubten Energien überein, bis auf die Ersetzung $n \rightarrow n + 1/2$. Es soll hier anhand der Wellenmechanik begründet werden, in welchem (approximativen) Sinn die Quantisierung nach Sommerfeld (s. Abschnitt 1.4) richtig ist.

Wir betrachten dazu etwas allgemeiner einen Hamiltonoperator in einer Dimension der Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R})$$

und suchen Eigenwerte $E = E_n(\hbar)$ bei Energien $< \tilde{E}$, für welche die klassischen Bahnen gebunden sind; ja wir nehmen an, das klassisch erlaubte Gebiet bestehe aus einem Intervall

$$\{x | V(x) < E\} = (a_-(E), a_+(E)), \quad (E < E_0).$$

Die Energie E ist ein Eigenwert, genau dann falls unter den Lösungen von

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.48)$$

(sie bilden einen 2-dim. Raum, da die Differentialgleichung von 2. Ordnung ist) eine existiert mit $0 \neq \psi \in L^2(\mathbb{R})$.

$V(x) < E$: Sei

$$k(x) := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}, \quad (a_- < x < a_+).$$

Der Ansatz $\psi(x) = A(x)e^{iS(x)/\hbar}$. (A, S reell) führt, vgl. (2.8, 2.9), auf

$$A'' - A(S'/\hbar)^2 + Ak^2 = 0, \quad \frac{d}{dx}(A^2 S') = 0.$$

Im "strahlenoptischen Gebiet" (2.10)

$$\left| \frac{A''(x)}{A(x)} \right| \ll k^2(x), \quad (3.49)$$

vereinfacht sich die erste zu $S' = \pm \hbar k$ mit Lösungen

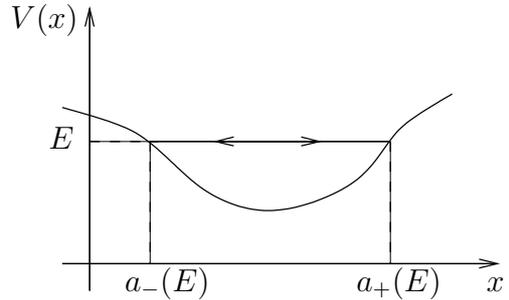
$$\begin{aligned} S(x) &= \pm \hbar \int^x k(x') dx', \\ A^2(x) &= \frac{c_{\pm}^2}{k(x)}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

(Integrationskonstanten sind c_{\pm} und im unbestimmten Integral enthalten). Durch Superposition der beiden Lösungen ψ ergibt sich die WKB-Näherung

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(c_+ e^{i \int^x k(x') dx'} + c_- e^{-i \int^x k(x') dx'} \right).$$

Die Konsistenz der Lösung verlangt, dass (3.50) die Bedingung (3.49) erfüllt. Man findet

$$\frac{A''}{A} = \frac{1}{4} \left(-\frac{5}{4} \left(\frac{V'}{E-V} \right)^2 + \frac{V''}{E-V} \right) : \quad (3.51)$$



Für festes $x \neq a_{\pm}$ ist $A''(x)/A(x)$ endlich, also (3.49) für kleine \hbar (abhängig von x) erfüllt, da $k(x) \rightarrow \infty$ für $\hbar \rightarrow 0$. In der Nähe der Umkehrpunkte, wo

$$E - V(x) \cong -V'(a_{\pm})(x - a_{\pm}) ,$$

ist der erste Term (3.51) singulärer als der zweite, sodass (3.49) liefert:

$$|x - a_{\pm}| \gg \left| \frac{\hbar^2}{2mV'(a_{\pm})} \right|^{1/3} =: \varepsilon \quad (3.52)$$

$V(x) > E$: Sei nun

$$\kappa(x) := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)} , \quad (x < a_- \text{ oder } x > a_+) .$$

Der Ansatz $\psi(x) = A(x)e^{-S(x)/\hbar}$ führt auf

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(c'_+ e^{\int^x \kappa(x') dx'} + c'_- e^{-\int^x \kappa(x') dx'} \right) ,$$

wiederum gültig unter der Bedingung (3.52), die eine kleine Umgebung der Umkehrpunkte ausschliesst. Eine Lösung $\psi \in L^2$ liegt vor, falls

$$\begin{aligned} c'_- &= 0 & \text{bei } x < a_- , \\ c'_+ &= 0 & \text{bei } x > a_+ . \end{aligned}$$

Behauptung: Die Anschlussbedingung bei a_- lautet

$$\begin{aligned} x - a_- \ll -\varepsilon & & x - a_- \gg \varepsilon \\ \frac{1}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_x^{a_-} \kappa dx'} & \longleftrightarrow & \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_{a_-}^x k dx' - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (3.53)$$

für die Lösung ψ , die für $x \rightarrow -\infty$ exponentiell abfällt. Analog für a_+ .

Eine Lösung, die für $x \rightarrow \pm\infty$ abfällt, erfordert somit

$$\cos\left(\int_{a_-}^x k dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \alpha \cos\left(\int_x^{a_+} k dx' - \frac{\pi}{4}\right)$$

für ein $\alpha \in \mathbb{C}$ und alle x mit $x - a_- \gg \varepsilon$, $x - a_+ \ll -\varepsilon$. Dies ist nur möglich für $\alpha = \pm 1$ und auch dann nur für

$$\int_{a_-}^{a_+} k dx - \frac{\pi}{2} = \begin{cases} 2m\pi , & (\alpha = +1) , \\ (2m+1)\pi , & (\alpha = -1) , \end{cases}$$

d.h. mit $n = 2m$, $2m+1$ für

$$\oint k dx = 2\pi\left(n + \frac{1}{2}\right) , \quad (n = 0, 1, 2, \dots) .$$

Dies ist die Sommerfeld-Bedingung (1.26) mit $n \rightsquigarrow n + 1/2$.

Zu konstruieren bleibt eine Lösung für (3.48), die den Umkehrpunkt $a = a_-$ überbrückt und zwischen den beiden Verhalten (3.53) interpoliert. Dazu verwenden wir die Variable

$$y = \frac{x - a}{\varepsilon},$$

in welcher der Gültigkeitsbereiches (3.52) von (3.53)

$$y \ll -1, \quad \text{bzw.} \quad y \gg 1 \quad (3.54)$$

lautet. Die Lösung soll ergänzt werden durch eine, die im linearen Bereich von $V(x) - a$,

$$|V''(a)(x - a)^2| \ll |V'(a)(x - a)|, \quad (3.55)$$

d.h. für

$$|y| \ll \varepsilon^{-1} \left| \frac{V'(a)}{V''(a)} \right|, \quad (3.56)$$

gilt. Da $\varepsilon \rightarrow 0$ für $\hbar \rightarrow 0$, überlappt (3.56) mit beiden Bereichen (3.54). Wegen (3.55) darf man k^2, κ^2 in $x - a$ linearisieren. Die Behauptung (3.53) lautet dann innerhalb von (3.56)

$$y \ll -1 \qquad y \gg 1 \\ \frac{1}{2|y|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|y|^{2/3}} \longleftrightarrow \frac{1}{y^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}y^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) .$$

Ebenfalls darf man $V(x) - E$ in (3.48) linearisieren,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V'(a)(x - a)\psi(x) = 0$$

oder, unter Verwendung von $V'(a) = -|V'(a)|$,

$$\ddot{y} + y\psi(y) = 0$$

($\cdot = d/dy$). Eine Lösung davon ist

$$\psi(y) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\underbrace{i\left(\frac{1}{3}t^3 - yt\right)}_{=: \varphi(t,y)}} dt \quad (3.57)$$

(ist reell, da der Imaginärteil des Integranden ungerade ist), oder genauer

$$\psi(y) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{1}{3}t^3 - yt\right)} e^{-\varepsilon t^2} dt ,$$

denn

$$\ddot{\psi}(y) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{(-t^2)}_{-\frac{d}{dt}\frac{1}{3}t^3 = -\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{3}t^3 - yt\right) - y} e^{i\left(\frac{1}{3}t^3 - yt\right)} dt = -y\psi(y)$$

nach Integration einer Ableitung.

Die Phase φ ist stationär, $0 = \partial\varphi/\partial t = t^2 - y$, bei

$$t = \begin{cases} \pm\sqrt{y}, & (y > 0), \\ \pm i\sqrt{|y|}, & (y < 0), \end{cases}$$

ferner $\partial^2\varphi/\partial t^2 = 2t$.

$y > 0$: Die quadratische Approximation der Phase um $\pm\sqrt{y}$ ist

$$\varphi(t, y) = \mp \frac{2}{3}y^{3/2} \pm \sqrt{y}(t - \sqrt{y})^2 + \dots$$

und für $y \gg 1$ sind die beiden stationären Punkte gut getrennt. Damit ist $\psi(y)$ annähernd gleich der Summe ihrer beiden Beiträge, vgl. (3.38),

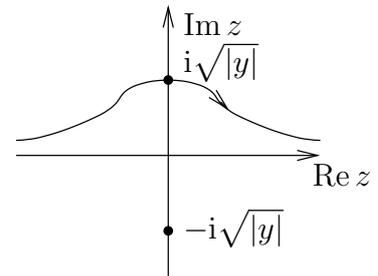
$$\begin{aligned} \psi(y) &= \frac{1}{2y^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}y^{3/2}} e^{i\frac{\pi}{4}} + (i \rightarrow -i) \\ &= \frac{1}{y^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}y^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

$y < 0$: Die Phase nahe den Sattelpunkten $\pm i\sqrt{|y|}$ ist für $y \ll -1$ gut durch

$$i\varphi(t, y) = \mp \frac{2}{3}|y|^{2/3} \mp |y|^{1/2}(t \mp i\sqrt{|y|})^2$$

approximiert. Wir deformieren den Integrationspfad $(-\infty, \infty)$ in (3.57) in die komplexe Ebene, und zwar durch $t = +i\sqrt{|y|}$: dann hat $|e^{i\varphi(t,y)}|$ dort ein Maximum längs des Pfades, welches das Integral dominiert:

$$\psi(y) = \frac{1}{2|y|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|y|^{3/2}}.$$



3.5 Symmetrien und Erhaltungssätze

Wir betrachten die durch $H = H^*$ (Hamiltonoperator) und $A = A^*$ (eine Observable) erzeugten 1-parametrischen unitären Gruppen

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi_0\rangle : \text{Lösung von } i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \text{ zum Anfangszustand } |\psi_0\rangle, \\ |\varphi(\lambda)\rangle &= e^{-iA\lambda/\hbar} |\psi_0\rangle : \text{Lösung von } i\hbar \frac{d|\varphi\rangle}{d\lambda} = A|\varphi\rangle \text{ zum Anfangszustand } |\psi_0\rangle. \end{aligned}$$

Dann ist

$$\left. \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right|_{t=0} = \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [H, A] | \psi_0 \rangle = - \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [A, H] | \psi_0 \rangle = - \left. \frac{d}{d\lambda} \langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle \right|_{\lambda=0}.$$

Folgende Aussagen sind deshalb äquivalent:

- a) A ist eine **Erhaltungsgrösse**, d.h. $\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$ ist für jeden Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ zeitlich konstant. Oder:

$$e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} = A ;$$

- b) $[H, A] = 0$;

- c) $\langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle$ ist unabhängig von λ für jeden Anfangszustand $|\psi_0\rangle$, oder

$$e^{iA\lambda/\hbar} H e^{-iA\lambda/\hbar} = H .$$

Man nennt dann $e^{-iA\lambda/\hbar}$ eine (1-parametrische) **Symmetriegruppe** von H .

Beispiel. Jede Drehung $R \in O(3)$ induziert im Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ eine unitäre Transformation

$$U(R) : \quad \psi(\vec{x}) \mapsto \psi(R^{-1}\vec{x}) . \quad (3.58)$$

Es gilt $U(1) = \mathbb{1}$, $U(R_2)U(R_1) = U(R_2R_1)$, d.h. $R \mapsto U(R)$ ist eine unitäre **Darstellung** der Drehgruppe $O(3)$. Die Drehungen $R(\lambda)$ um eine feste Achse \vec{e} , ($|\vec{e}| = 1$) mit Drehwinkel λ bilden eine 1-parametrische Untergruppe von $SO(3) \subset O(3)$, und es ist

$$\left. \frac{d}{d\lambda} R(\lambda) \vec{x} \right|_{\lambda=0} = \vec{e} \wedge \vec{x} .$$

Die zugehörigen $U(\lambda) \equiv U(R(\lambda))$ bilden eine 1-parametrische unitäre Gruppe. Ihre Erzeugende A ergibt sich aus

$$(A\psi)(\vec{x}) = i\hbar \left. \frac{d}{d\lambda} \psi(R(-\lambda)\vec{x}) \right|_{\lambda=0} = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} \cdot (\vec{e} \wedge \vec{x}) = \vec{e} \cdot \left(\vec{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} \right) , \quad (3.59)$$

d.h. es ist

$$A = \vec{e} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{p}) = \vec{e} \cdot \vec{L} = \text{Drehimpulskomponente in Richtung der Drehachse } \vec{e} .$$

Somit ist $\vec{e} \cdot \vec{L}$ genau dann erhalten, wenn $U(\lambda)$ eine Symmetriegruppe von H ist. Für

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

findet man

$$U(R)^{-1} H U(R) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(R\vec{x}) .$$

Somit ist $\vec{e} \cdot \vec{L}$ erhalten, wenn $V(\vec{x})$ rotationssymmetrisch um die Achse \vec{e} ist. Bei voller Rotationssymmetrie, d.h. falls $V = V(|\vec{x}|)$, sind alle Drehimpulskomponenten erhalten:

$$[H, \vec{L}] = 0 . \quad (3.60)$$

Ebenfalls erhalten ist dann $\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$, d.h.

$$[H, \vec{L}^2] = 0 . \quad (3.61)$$

Bemerkung. In Polarkoordinaten (r, θ, φ) wirkt $R(\lambda) : (r, \theta, \varphi) \mapsto (r, \theta_\lambda, \varphi_\lambda)$ nicht auf r . Ist $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ in diesen dargestellt, so wirken die L_i , ($i = 1, 2, 3$) nach (3.59) nur auf die Polarwinkel θ, φ . Beispiel: $\vec{e} = \vec{e}_3$, also $\theta_\lambda = \theta, \varphi_\lambda = \varphi + \lambda$:

$$L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} .$$

Die L_i 's, und damit \vec{L}^2 , sind selbst-adjungierte Operatoren auf $L^2(\Omega)$, $\Omega = \text{Einheitskugel}$.

4 Das Zweikörperproblem

4.1 Schwerpunkts- und Relativbewegung

Der Hamiltonoperator ist

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^6). \quad (4.1)$$

Speziell beschreibt

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (4.2)$$

die Wechselwirkung eines Elektrons der Ladung $-e$ mit einem Atomkern der Ladung $Z \cdot e$ ($Z = 1$: Wasserstoff-Atom). Zunächst bleiben wir aber bei einem allgemeinen Potential $V(r)$.

Nach klassischem Muster schreibt man H in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\vec{X} = \frac{1}{M}(m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2), \quad \vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad (4.3)$$

und den konjugierten Impulsen

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p} = m\left(\frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2}\right),$$

wobei $M = m_1 + m_2$ und $m = m_1m_2/M$ (reduzierte Masse). So wird

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|), \quad P_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_k}; \quad p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad (4.4)$$

denn es ist gleichgültig, ob die Quantisierung in den Koordinaten (\vec{x}_1, \vec{x}_2) oder (\vec{X}, \vec{x}) erfolgt. Beschränken wir uns auf Wellenfunktionen der Form

$$\Psi(\vec{X}) \psi(\vec{x})$$

(die $L^2(\mathbb{R}^6)$ aufspannen), so ergeben sich zwei unabhängige Schrödingergleichungen:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \frac{\vec{P}^2}{2M} \Psi; \quad i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \psi + V(|\vec{x}|) \right) \psi. \quad (4.5)$$

Die erste beschreibt die freie Bewegung des Schwerpunkts (die wir nicht weiter betrachten), die zweite die Relativbewegung: ein **Zentralkraftproblem** mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^3). \quad (4.6)$$

Da H rotationssymmetrisch ist, gilt der Erhaltungssatz (3.60). Dadurch wird sich das Problem weiter auf eine eindimensionale Schrödingergleichung für die radiale Bewegung reduzieren lassen. Aus (3.61) folgt, dass H die Eigenräume von \vec{L}^2 in sich abbildet. Wir untersuchen daher zuerst das Eigenwertproblem von \vec{L}^2 , dann jenes von H .

Drehimpuls: Wir setzen $\vec{L} = \hbar \vec{M}$, $\vec{M} = -i\vec{x} \wedge \partial/\partial\vec{x}$. Es ist

$$\begin{aligned}\vec{M}^2 &= M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (x_i \partial_j - x_j \partial_i)^2 \\ &= -\sum_{i,j} (x_i \underbrace{\partial_j x_i}_{x_i \partial_j + \delta_{ij}} \partial_j - x_i \underbrace{\partial_j x_j \partial_i}_{\partial_i x_j \partial_j + (1 - \delta_{ij}) \partial_i}) \\ &= -\sum_{i,j} (x_i^2 \partial_j^2 - x_i \partial_i x_j \partial_j - x_i \partial_i + 2\delta_{ij} x_i \partial_i) .\end{aligned}$$

In Polarkoordinaten ist $\sum_i x_i \partial_i = \vec{x} \cdot \vec{\nabla} = r \partial/\partial r$, also

$$\vec{M}^2 = -r^2 \Delta + \left(r \frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + (3-2)r \frac{\partial}{\partial r} = -r^2 \Delta + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r ,$$

oder

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2 . \quad (4.7)$$

Die Eigenvektoren von \vec{M}^2 (als Operator auf $L^2(\Omega)$ aufgefasst, vgl. Bemerkung auf S. 40), sind die Kugelfunktionen Y_l (Definition: s. Anhang B):

$$\vec{M}^2 Y_l = l(l+1) Y_l .$$

Weiter gilt der Satz in Anhang B. Als Operator auf $L^2(\Omega)$ hat damit \vec{M}^2 das rein diskrete Spektrum der Eigenwerte $l(l+1)$, ($l = 0, 1, 2, \dots$), die $(2l+1)$ -fach entartet sind.

Hamiltonoperator: H lässt für jedes l den Unterraum der Wellenfunktionen

$$\psi(\vec{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_l(\vec{e}) \quad (4.8)$$

mit $u \in L^2(0, \infty)$, d.h. $\int_0^\infty |u(r)|^2 dr < \infty$, invariant. (Beachte: $\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \int_\Omega |Y_l(\vec{e})|^2 d^2e \cdot \int_0^\infty |u(r)|^2 dr$, da $d^3x = r^2 dr d^2e$.) In jedem solchen Unterraum reduziert sich $H\psi = E\psi$ auf das "radiale Eigenwertproblem"

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \mathcal{V}(r)\right)u = \varepsilon u \quad (4.9)$$

in $L^2(0, \infty)$, wobei wir

$$\mathcal{V}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) , \quad \varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

gesetzt haben. Wir diskutieren das Verhalten der Lösung bei $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$. Dabei nehmen wir an, dass $V(r)$ für $r \rightarrow \infty$ verschwindet und für $r \rightarrow 0$ weniger singulär ist als $1/r^2$.

Bei $r \rightarrow 0$ reduziert sich (4.9) auf

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0$$

mit der allgemeinen Lösung

$$u(r) = ar^{l+1} + br^{-l} .$$

Falls $l > 0$, ist sie bei $r = 0$ quadratintegrierbar, nur falls $b = 0$. Auch für $l = 0$ ist die Lösung $r^{-l} = 1$ zu verwerfen: dann ist nach (4.8) $\psi(\vec{x}) = 1/r$, also $-\Delta\psi = 4\pi\delta$ nicht quadratintegrierbar. Die verbleibende Lösung ist bis auf die Konstante a bestimmt. Damit hat (4.9) für jedes ε nur eine einzige Lösung $u(\varepsilon, r) \approx r^{l+1}$, ($r \rightarrow 0$): die ‘‘reguläre Lösung’’.

Bei $r \rightarrow \infty$ reduziert sich (4.9) auf

$$-u'' = \varepsilon u$$

mit der allgemeinen Lösung

$$ae^{ikr} + be^{-ikr} , \quad (k = \sqrt{\varepsilon}) .$$

Insbesondere ist zu erwarten, dass die reguläre Lösung $u(\varepsilon, r)$ von (4.9) für $r \rightarrow \infty$ die asymptotische Form

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{ikr} + b(\varepsilon)e^{-ikr} \quad (4.10)$$

besitzt.

Gebundene Zustände entsprechen (normierbaren) Eigenzuständen, $u(\varepsilon, \cdot) \in L^2(0, \infty)$. Dann muss erstens $\varepsilon < 0$: wir legen dann k fest durch

$$k = i\kappa , \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0 , \quad (4.11)$$

also $e^{\pm ikr} = e^{\mp \kappa r}$. Zweitens muss $b(\varepsilon) = 0$ sein: die Eigenwerte ε ergeben sich als **Nullstellen** der Funktion $b(\varepsilon)$. Dann reduziert sich (4.10) auf

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{-\kappa r} , \quad (r \rightarrow \infty) .$$

4.2 Das Wasserstoff-Atom

Wir behandeln nun den Fall (4.2) des Coulombpotentials

$$\mathcal{V}(r) = -\frac{\gamma}{r} , \quad \gamma = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} .$$

Die allgemeine Diskussion motiviert den Ansatz

$$u(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k r^k . \quad (4.12)$$

Einsetzen in die Differentialgleichung liefert unter Benutzung von (4.11) die einfache Rekursion

$$c_{k+1} = c_k \frac{\gamma - 2\kappa k}{l(l+1) - k(k+1)} , \quad (k = l+1, l+2, \dots) . \quad (4.13)$$

Falls die Rekursion nicht abbricht (d.h. alle $c_k \neq 0$), so ist für $k \rightarrow \infty$

$$c_{k+1} \approx c_k \frac{2\kappa}{k+1} , \quad \text{also} \quad c_k \approx C \frac{(2\kappa)^2}{k!} ,$$

was auf

$$u(r) \approx e^{-\kappa r} \cdot C e^{2\kappa r} = C e^{\kappa r}$$

führt. Falls (4.13) hingegen abbricht, d.h. falls für ein n

$$c_n \neq 0, \quad c_{n+1} = 0,$$

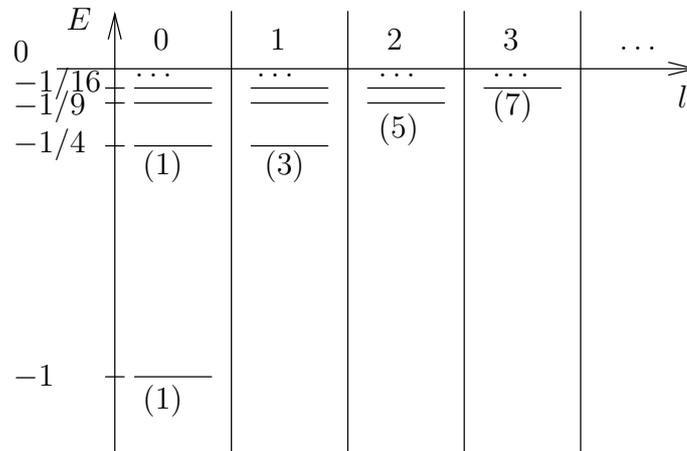
so ist die Lösung eine Eigenfunktion. Die Bedingung dafür ist

$$\kappa_n = \frac{\gamma}{2n}, \quad (n = l + 1, l + 2, \dots),$$

d.h.

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \kappa_n^2 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (4.14)$$

(Schrödinger 1926). Dies ist die von Bohr im Rahmen der “alten Quantentheorie” hergeleitete Formel (1.24) für die Energieniveaus. Das Schema der Eigenwerte stellen wir so dar:



Die Eigenwerte sind aufgetragen in der Einheit 1Ry (Rydberg); die Zahlen in Klammern sind die Vielfachheiten $2l + 1$ der Eigenwerte zu gegebenem l , entsprechend der Dimension des Raums der Kugelfunktionen zum Index l . Zu gegebenem n ist die Vielfachheit (oder Entartung) von E_n gleich

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2,$$

was mit (1.32) übereinstimmt.

Fundamental ist die Existenz eines energetisch tiefsten Zustands ($l = 0, n = 1$): die Energie des H-Atom ist nach unten beschränkt und es ist damit stabil! Dies im Gegensatz zum klassischen H-Atom, wo das (beschleunigte) Elektron beliebig viel Energie durch Ausstrahlung abgeben würde (vgl. Elektrodynamik). Die Wellenfunktion des Grundzustandes ist nach (4.12)

$$u(r) = e^{-\kappa_1 r}, \quad \kappa_1 = \frac{\gamma}{2} = \frac{me^2}{\hbar^2},$$

also (bis auf Normierung), da Y_0 eine Konstante ist,

$$\psi(\vec{x}) = e^{-|\vec{x}|/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Der Bohr-Radius a ist der Radius des Atoms in der Bohrschen Theorie. Durch (4.14) sind alle Eigenwerte von H (vgl. (4.6, 4.2)) gefunden (ohne Beweis). Damit ist aber (im Unterschied zum harmonischen Oszillator) noch nicht das gesamte Spektrum $\sigma(H)$ ausgeschöpft, welches (wie beim freien Teilchen) auch einen kontinuierlichen Anteil $[0, \infty)$ besitzt:



Um dies einzusehen, vgl. (3.9), konstruiere man sich zu jedem $E \geq 0$ und beliebig kleinem $\varepsilon > 0$ ein Zustand ψ mit der Eigenschaft

$$\|(H - E)\psi\| \leq \varepsilon.$$

Idee: ein approximierter Eigenzustand des freien Teilchens, weit weg vom Kern.

5 Streutheorie

5.1 Die Greensche Funktion

Als Vorbereitung zur Streutheorie soll die Helmholtz-Gleichung

$$(\Delta + k^2)\psi = \rho \quad (5.1)$$

für eine lokalisierte Quelle $\rho(\vec{x})$, z.B. $\rho \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gelöst werden. Zu beachten ist, dass $k^2 \in \sigma(-\Delta) = [0, \infty)$. In welchem Sinn ist die Lösung ψ zu verstehen? Sie ist nicht eindeutig, zumindest nicht unter beschränkten Funktionen (die ebene Welle $\psi_0(\vec{x}) = e^{ik\vec{e}_0 \cdot \vec{x}}$, ($|\vec{e}_0| = 1$) ist Lösung der homogenen Gleichung); und sie existiert i.A. nicht, falls $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gefordert wird (es würde $\hat{\rho}(k\vec{e}_0) = 0$ folgen). Dazwischen liegen die nützlichen Lösungen

$$\psi_{\pm}(\vec{x}) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} (\Delta + k^2 \pm i\varepsilon)^{-1} \rho \equiv (\Delta + k^2 \pm i0)^{-1} \rho. \quad (5.2)$$

Wir zeigen weiter unten: Die **Greensche Funktion**

$$G_{\pm}(k, \vec{x} - \vec{y}) = \langle \vec{x} | (\Delta + k^2 \pm i0)^{-1} | \vec{y} \rangle \quad (5.3)$$

ist

$$G_{\pm}(k, \vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r}, \quad (r = |\vec{x}|). \quad (5.4)$$

Damit wird (5.2) zu

$$\psi_{\pm}(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{y}|}}{|\vec{x}-\vec{y}|} \rho(\vec{y}) d^3 y. \quad (5.5)$$

Für grosse r fällt die Lösung ab,

$$\psi_{\pm}(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \int e^{\mp ik\vec{e} \cdot \vec{y}} \rho(\vec{y}) d^3 y + O(r^{-2}), \quad (r \rightarrow \infty, \vec{e} = \vec{x}/r), \quad (5.6)$$

wenn auch $\psi_{\pm} \notin L^2(\mathbb{R}^3)$. Dies folgt aus $|\vec{x} - \vec{y}| = |\vec{x}| - \vec{e} \cdot \vec{y} + O(r^{-1})$.

Bemerkung. Man erkennt in (5.5) die retardierten und avancierten Lösungen der Wellengleichung

$$(\square\psi)(\vec{x}, t) = -\rho(\vec{x}, t), \quad (5.7)$$

und zwar (vgl. Elektrodynamik)

$$\psi_{\pm}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho(\vec{y}, t - |\vec{x} - \vec{y}|/c)}{|\vec{x} - \vec{y}|} d^3 y : \quad (5.8)$$

Für $\rho(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x})e^{i\omega t}$ ist $\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{i\omega t}$ und (5.7, 5.8) werden zu (5.1, 5.5) mit $k = \omega/c$.

Beweis von (5.4). Nach (5.3) ist

$$G_+(k, \vec{x}) = (2\pi)^{-3} \int (-\vec{q}^2 + k^2 + i0)^{-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} d^3 q.$$

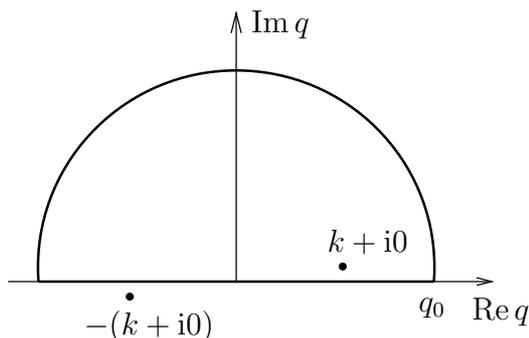
In Polarkoordinaten (q, θ, φ) ist $d^3q = q^2 dq d\varphi d(\cos \theta)$ und $\vec{q} \cdot \vec{x} = qr \cos \theta$. Mit $\cos \theta = u$ ist

$$\begin{aligned} G_+(k, \vec{x}) &= (2\pi)^{-3} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2 + i0} \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \int_{-1}^1 e^{iqr u} du \\ &= (2\pi)^{-2} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2 + i0} \frac{1}{iqr} (e^{ikr} - e^{-ikr}) \\ &= (2\pi)^{-2} \frac{1}{ir} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2 + i0} e^{ikr} . \end{aligned}$$

Das Integral kann mit dem Residuensatz anhand der Contour der Figur berechnet werden. Der Integrand

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{q - (k + i0)} + \frac{1}{q + (k + i0)} \right) e^{ikr}$$

hat Pole bei $q = \pm(k + i0)$ und ist in der oberen Halbebene exponentiell abfallend. Somit verschwindet der Betrag des Halbkreises für $q_0 \rightarrow \infty$ und der umschlossene Pol $q = k + i0$ hat Residuum $-e^{ikr}/2$. Daraus folgt (5.4).

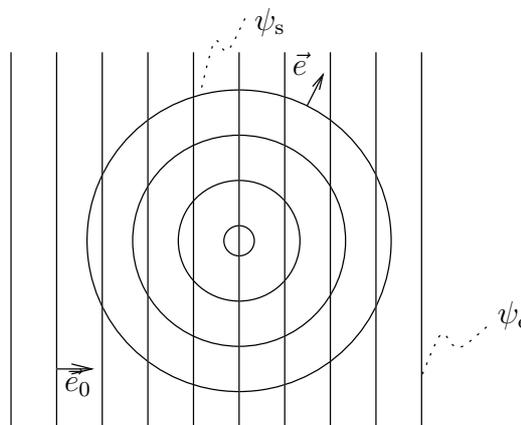


5.2 Streuzustände

Eine ebene Welle $\psi_e(k, \vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$, ($\vec{k} = k\vec{e}_0$) der Richtung \vec{e}_0 ist eine (nicht normierbare) Lösung der freien Schrödinger-Gleichung zur Energie k^2 : $(-\Delta - k^2)\psi_e = 0$. In Anwesenheit eines Potentials kann nach einer Lösung ψ von

$$(-\Delta + \mathcal{V}(\vec{x}))\psi = k^2\psi \quad (5.9)$$

(mit \mathcal{V} wie in (4.9)) gesucht werden, die sich von der einfallenden Welle ψ_e durch eine Streuwelle ψ_s unterscheidet:



$$\begin{aligned} \psi(k, \vec{x}) &= \psi_e(k, \vec{x}) + \psi_s(k, \vec{x}) , \\ \psi_s(k, \vec{x}) &= f(k, \vec{e}) \frac{e^{ikr}}{r} + O(r^{-2}) , \quad (r \rightarrow \infty, \vec{e} = \vec{x}/r) . \end{aligned} \quad (5.10)$$

Hier ist $f(k, \vec{e})$ die **Streuamplitude**. Der Abfall $\sim r^{-1}$ der Amplitude der Streuwelle drückt die zu erwartende Verdünnung der Wahrscheinlichkeitsdichte auf eine Kugel der Fläche $\sim r^2$ aus.

Aus (5.9) folgt

$$(-\Delta - k^2)(\psi - \psi_e) = -\mathcal{V}\psi .$$

Für $k \rightarrow k + i\varepsilon$ ist die Streuwelle $\psi_s = \psi - \psi_e$ wegen $e^{i(k+i\varepsilon)r} = e^{ikr}e^{-\varepsilon r}$ exponentiell abfallend. So ist im Limes $\varepsilon \downarrow 0$

$$\psi(k, \vec{x}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = (\Delta + k^2 + i0)^{-1} \mathcal{V} \psi ,$$

und mit (5.5) wird daraus die inhomogene, lineare Integralgleichung

$$\psi(k, \vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{y}|}}{|\vec{x}-\vec{y}|} \mathcal{V}(\vec{y}) \psi(k, \vec{y}) \quad (5.11)$$

(**Lippmann-Schwinger Gleichung**). Nach (5.6) folgt für $r \rightarrow \infty$ das asymptotische Verhalten (5.10) mit

$$f(k, \vec{e}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3y e^{-ik\vec{e}\cdot\vec{y}} \mathcal{V}(\vec{y}) \psi(k, \vec{y}) . \quad (5.12)$$

Also: Die Integralgleichung (5.11) ist äquivalent zur Schrödinger-Gleichung (5.9) inklusive der asymptotischen Bedingung (5.10) einer auslaufenden Streuwelle.

Durch Iteration von Gl. (5.11) entsteht die Bornsche Reihe. Die einfachste Näherungslösung derselben entsteht, indem man $\psi(k, \vec{y})$ im Bereich des Potentials $\mathcal{V}(\vec{y})$ ersetzt durch die einfallende Welle $e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}}$. Der entsprechende Ausdruck

$$f_B(k', k) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3y e^{-ik(\vec{e}-\vec{e}_0)\cdot\vec{y}} \mathcal{V}(\vec{y}) \quad (5.13)$$

für die Streuamplitude heisst **Bornsche Näherung**.

Interpretation. Obschon die Streulösungen $\psi(k, \vec{x})$ nicht quadratintegrierbar sind, lassen sie sich plausibel interpretieren. Für jede Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung gilt die Kontinuitätsgleichung (2.16) für Wahrscheinlichkeitsdichte ρ und Wahrscheinlichkeits-Stromdichte \vec{j} . Für stationäre Lösungen, und insbesondere für obige Streulösung $\psi(k, \vec{x})e^{-i\hbar k^2 t/2m}$, gilt dabei $\partial\rho/\partial t = 0$. Zur einfallenden ebenen Welle ψ_e und zur Streuwelle ψ_s gehören die Stromdichten

$$\vec{j}^{(e)} = \frac{\hbar}{m} k \vec{e}_0 , \quad \vec{j}^{(s)}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{m} k \frac{|f(k, \vec{e})|^2}{r^2} \vec{e} + O(r^{-3}) .$$

Die Streustromdichte ist asymptotisch radial nach aussen gerichtet, und der gesamte Streustrom durch die Kugel vom Radius r in einem Raumwinkelelement $d\Omega$ wird unabhängig von r :

$$j^{(s)} r^2 d\Omega = j^{(e)} |f|^2 d\Omega .$$

Das Verhältnis

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \vec{e}) := \frac{\text{Streustrom durch } d\Omega}{d\Omega \times \text{einfallende Stromdichte}} = |f(k, \vec{e})|^2 \quad (5.14)$$

ist der **differentielle Streuquerschnitt** in Richtung \vec{e} . Die Notation $d\sigma/d\Omega$ rührt von der klassischen Mechanik her: Dort stiften die Streubahnen eine Zuordnung $d\sigma \ni \vec{b} \mapsto \vec{e} \in d\Omega$ zwischen Zielfehler \vec{b} und Streurichtung \vec{e} . Dementsprechend ist $j^{(e)} d\sigma = j^{(s)} r^2 d\Omega$.

Der **totale Streuquerschnitt** entsteht daraus durch Integration über alle Streurichtungen:

$$\sigma(k) \equiv \int d^2e |f(k, \vec{e})|^2 . \quad (5.15)$$

In den Notationen (5.14, 5.15) nicht explizit widerspiegelt ist die Abhängigkeit der Grössen von der einfallenden Richtung \vec{e}_0 . Für ein Zentralpotential $\mathcal{V}(r)$ hängt $f(k, \vec{e})$ von \vec{e}_0 nur über den Winkel $\angle(\vec{e}, \vec{e}_0)$ ab. Dieser Fall wird im übernächsten Abschnitt näher behandelt.

5.3 Das optische Theorem

Die Vorwärtsrichtung ist durch die Richtung des einfallenden Strahls \vec{e}_0 definiert. Das optische Theorem bringt die Stromerhaltung zum Ausdruck: Der Wahrscheinlichkeitsstrom, der in alle anderen Richtungen gestreut wird, geht dem Strahl in Vorwärtsrichtung verloren:

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(k, \vec{e}_0) . \quad (5.16)$$

Die rechte Seite entspricht diesem Verlust. Der folgende Beweis bringt zum Ausdruck, dass er durch Interferenz zwischen den beiden Teilen von (5.10) zustande kommt.

Beweis. Aus (5.10) folgt

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \psi &= i\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + ik\vec{e} f(k, \vec{e}) \frac{e^{ikr}}{r} + O(r^{-2}) , \\ \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi &= i\vec{k} + \frac{i}{r} (k\vec{e} f(k, \vec{e}) e^{i(kr - \vec{k} \cdot \vec{x})} + \vec{k} \bar{f}(k, \vec{e}) e^{-i(kr - \vec{k} \cdot \vec{x})}) + \frac{i\vec{k}\vec{e}}{r^2} |f(k, \vec{e})|^2 , \end{aligned}$$

woraus sich die Stromdichte \vec{j} aus (2.15) ergibt: insbesondere mit $\vec{k} = k\vec{e}_0$ die Radialkomponente

$$\frac{2m}{\hbar k} \vec{j} \cdot \vec{e} = \vec{e}_0 \cdot \vec{e} + \frac{1}{r} \text{Im} i (f(k, \vec{e}) e^{ikr(1 - \vec{e}_0 \cdot \vec{e})} + \vec{e}_0 \cdot \vec{e} \bar{f}(k, \vec{e}) e^{-ikr(1 - \vec{e}_0 \cdot \vec{e})}) + \frac{|f(k, \vec{e})|^2}{r^2} . \quad (5.17)$$

Das Integral über $\vec{e} \in S^2$ der linken Seite verschwindet wegen $\text{div} \vec{j} = 0$; jenes des ersten Terms rechts, da dieser ungerade in \vec{e} ist. Das Integral der Klammer lässt sich für grosse $\rho = kr$ mit der Methode der stationären Phase berechnen, wie allgemein in Anhang C und hier speziell für S^2 dargelegt:

$$\int f(\vec{e}) e^{i\rho h(\vec{e})} d^2e = \frac{2\pi}{\rho} \sum_i \frac{e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn}(\partial^2 h)(\vec{e}_i)}}{|\det(\partial^2 h)(\vec{e}_i)|^{1/2}} f(\vec{e}_i) e^{i\rho h(\vec{e}_i)} + O(\rho^{-2}) , \quad (\rho \rightarrow \infty) ,$$

wobei \vec{e}_i die stationären Punkte von $h : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ sind und $\partial^2 h$ die Hesse-Matrix ist. Die Funktion $h(\vec{e}) = 1 - \vec{e}_0 \cdot \vec{e} = 1 - \cos \theta$, ($\theta = \angle(\vec{e}, \vec{e}_0)$) ist stationär bei $\vec{e} = \pm \vec{e}_0$ (bzw. $\theta = 0, \pi$) mit $h(\pm \vec{e}_0) = 0, 2$ und $\partial^2 h(\pm \vec{e}_0) = \pm 1$. Das Integral des Ausdrucks, dessen Imaginärteil in (5.17) vorkommt, ist somit

$$\begin{aligned} \frac{2\pi i}{\rho} &[(e^{i\pi/2} f(k, \vec{e}_0) + e^{-i\pi/2} \bar{f}(k, \vec{e}_0)) + (e^{-i\pi/2} f(k, -\vec{e}_0) e^{2i\rho} - e^{i\pi/2} \bar{f}(k, -\vec{e}_0) e^{-2i\rho})] \\ &= \frac{2\pi}{\rho} [-(f(k, \vec{e}_0) - \bar{f}(k, \vec{e}_0)) + (f(k, -\vec{e}_0) e^{2i\rho} + \bar{f}(k, -\vec{e}_0) e^{-2i\rho})] . \end{aligned}$$

Beachte, dass der Beitrag der Rückwärtsrichtung $-\vec{e}_0$ reell ist. So folgt aus (5.17) nach Multiplikation mit r^2 schliesslich

$$0 = \frac{2\pi}{k} (-2\text{Im } f(\vec{k}, \vec{e}_0)) + \int d^2e |f(k, \vec{e})|^2 ,$$

d.h. (5.16).

5.4 Zerlegung in Partialwellen

Die ebene Welle $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = e^{ikr\cos\theta}$ hat, für festes $\rho = kr$, eine Zerlegung nach Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$. Da $L_3 e^{ikr\cos\theta} = 0$, ($L_3 = -i\partial/\partial\phi$) kommen nur solche mit $m = 0$ vor oder, was dasselbe ist, s. (B.9), nur Legendre-Polynome $P_l(\cos\theta)$:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \tilde{j}_l(kr) P_l(\cos\theta) . \quad (5.18)$$

Die Faktoren $i^l(2l+1)$ sind Konvention. Die Entwicklung definiert die Partialwellen $j_l(\rho) = \tilde{j}_l(\rho)/\rho$ (sphärische Besselfunktionen). Da sie der Form (4.8) entsprechen und $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung zur Energie $(\hbar\vec{k})^2/2m$ ist, sind die $\tilde{j}_l(\rho)$ im Ursprung reguläre Lösungen von

$$-u''(\rho) + \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) = u(\rho) . \quad (5.19)$$

Die Partialwellen können anhand der Orthogonalitätsrelation (B.12) bestimmt werden:

$$\frac{\tilde{j}_l(\rho)}{\rho} = \frac{(-i)^l}{2} \int_{-1}^1 e^{i\rho u} P_l(u) du ,$$

wobei wir $\cos\theta = u$, $\vec{k}\cdot\vec{x} = \rho u$ geschrieben haben. Partielle Integration liefert dann

$$\frac{\tilde{j}_l(\rho)}{\rho} = \frac{(-i)^l}{2i\rho} \left(e^{i\rho u} P_l(u) \Big|_{u=-1}^{u=1} - \int_{-1}^1 e^{i\rho u} P_l'(u) du \right) ,$$

wobei das verbleibende Integral durch nochmalige partielle Integration für $\rho \rightarrow \infty$ abgeschätzt werden kann. Es resultiert

$$\begin{aligned} \tilde{j}_l(\rho) &= \frac{1}{2i} (-i)^l e^{i\rho u} P_l(u) \Big|_{-1}^1 + O(\rho^{-1}) \\ &= \frac{1}{2i} (e^{i(\rho - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(\rho - \frac{l\pi}{2})}) + O(\rho^{-1}) \\ &= \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) + O(\rho^{-1}) , \end{aligned} \quad (5.20)$$

wobei $(-i)^l = e^{-il\pi/2}$, $P_l(1) = 1$, $P_l(-1) = (-1)^l = e^{i\pi l}$, s. (B.8), verwendet wurde.

Ist das Potential **sphärisch symmetrisch**, so ist die Streulösung $\psi(k, \vec{x})$ achsialsymmetrisch ($L_3\psi = 0$) und hat eine Partialwellenentwicklung der Form

$$\psi(k, \vec{x}) = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) u_l(k, r) P_l(\cos\theta) , \quad (5.21)$$

wobei die $u_l(k, r)$ im Ursprung reguläre Lösungen von (4.9) mit $\varepsilon = k^2$ sind. Auf letzterer Grundlage ist $u_l(k, r)$ nur bis auf einen Faktor bestimmt; immerhin ist u_l reell bis auf eine Phase,

$$u_l(k, r) = e^{2i\delta_l(k)} \bar{u}_l(k, r) .$$

Der Faktor, und somit die **Streuphase** $\delta_l(k)$, sind aber durch (5.10) absolut bestimmt, wie wir nun zeigen. Für $r \rightarrow \infty$ geht $u_l(k, r)$ in eine Lösung der freien radialen Schrödinger-Gleichung über und ist somit in eine Linearkombination von $e^{\pm ikr}$:

$$u_l(k, r) = \frac{1}{2i} (A_+ e^{i(kr-l\pi/2)} - A_- e^{-i(kr-l\pi/2)}) + O(r^{-1}) ,$$

wobei $A_+ = \bar{A}_- e^{2i\delta_l}$. Aus (5.10) folgt, dass $u_l(k, r)$ denselben **einlaufenden** Teil ($\sim e^{-ikr}$) hat wie $\tilde{y}_l(kr)$, vgl. (5.20), also $A_- = 1$. So ist schliesslich

$$\begin{aligned} u_l(k, r) &= \frac{1}{2i} (e^{i(kr-l\pi/2+2\delta_l)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}) + O(r^{-1}) \\ &= e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) + O(r^{-1}) . \end{aligned}$$

Beachte, dass die Streuphase δ_l aus einer beliebigen regulären Lösung von (4.9) gewonnen werden kann, da sie unter dem Sinus (und nicht nur als Vorfaktor $e^{i\delta_l}$) vorkommt. Für die Streuwelle ergibt sich so die asymptotische Darstellung

$$\psi_s(k, \vec{x}) = \psi(k, \vec{x}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{e^{ikr}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\theta) + O(r^{-2}) ,$$

und damit die Streuamplitude:

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos\theta) .$$

Für den totalen Streuquerschnitt erhält man daraus unter Benutzung von (B.12) und (B.8) die beiden Ausdrücke:

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \tag{5.22}$$

$$= \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(k, 0) . \tag{5.23}$$

Die zweite Form reproduziert das Optische Theorem (5.16) im Fall eines Zentralpotentials. Zusammenfassend ist das Streuproblem reduziert auf die Berechnung der Streuphasen $\delta_l(k)$. Dazu braucht man nur die reguläre Lösung $u_l(k, r)$ der radialen Wellengleichung zu bestimmen.

5.5 Resonanzen

Resonanzen sind Energien $\varepsilon = k^2$, bei welchen der (partielle) Streuquerschnitt

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k)$$

besonders gross ist. Wir nehmen für \mathcal{V} einen kompakten Träger an: $\mathcal{V}(r) = 0$ für $r > R_0$. Die Streuphase $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$ beschreibt die Beziehung zwischen ein- und auslaufenden Anteilen in der regulären Lösung u_l :

$$2iu_l(k, r) = S_l(k)\tilde{h}_l(kr) - \overline{\tilde{h}_l(kr)}, \quad (r > R_0),$$

wobei $\tilde{h}_l(\rho)$ die Lösung der freien Gleichung (5.19) mit der Asymptotik

$$\tilde{h}_l(\rho) = e^{i(\rho - l\pi/2)}(1 + O(\rho^{-1}))$$

einer auslaufenden Welle ist. Insbesondere ist $\tilde{h}_0(\rho) = e^{i\rho}$ und $\tilde{h}_1(\rho) = (\rho^{-1} - i)e^{i\rho}$. Die Funktionen $\tilde{h}_l(\rho)$ haben analytische Fortsetzungen für $\rho \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ mit

$$\tilde{h}_l(-\rho) = (-1)^l \overline{\tilde{h}_l(\bar{\rho})}.$$

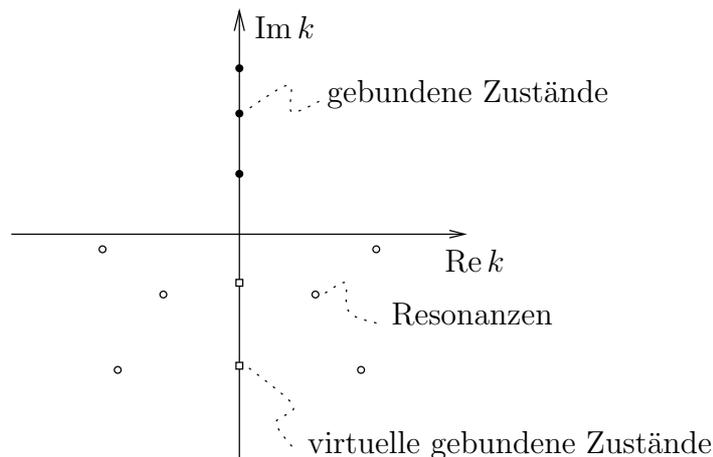
In der radialen Schrödinger-Gleichung (4.9) ist die Abhängigkeit nach $\varepsilon = k^2$ analytisch. Sie wird an die reguläre Lösung $u_l(k, r)$ vererbt, sofern diese z.B. durch $r^{-(l+1)}u_l(k, r) \rightarrow 1$, ($r \rightarrow 0$) eindeutig gemacht wird. Es folgt $u_l(k, r) = u_l(-k, r) = \overline{u_l(\bar{k}, r)}$, da die weiteren Ausdrücke alle erwähnten Eigenschaften der Lösung $u_l(k, r)$ mit ihr teilen. Für $r > R_0$ kann u_l nach Lösungen der freien Gleichung (5.19) zerlegt werden,

$$2iu_l(k, r) = f_l^+(k)\tilde{h}_l(kr) - f_l^-(k)\overline{\tilde{h}_l(\bar{k}r)},$$

wobei die Koeffizienten $f_l^\pm(k)$ (Jost-Funktionen) wiederum analytisch sind. Folglich hat $S_l(k) = f_l^+(k)/f_l^-(k)$ eine analytische Fortsetzung bis auf Pole mit

$$S_l(-k) = S_l(k)^{-1} = \overline{S_l(\bar{k})}. \quad (5.24)$$

In der Halbebene $\text{Re } k > 0$ steht $\tilde{h}_l(kr)$ für eine auslaufende Welle; in $\text{Im } k > 0$ für eine exponentiell abfallende. Ein Pol in der oberen Halbebene steht für eine Welle ohne exponentiell anwachsenden Teil, d.h. für einen gebundenen Zustand. Solche kann es dort nur für k rein imaginär geben, da der Eigenwert $\varepsilon = k^2$ reell ist. Es ergibt sich folgende allgemeine Lage der Pole.



Nach (5.24) ist das Bild symmetrisch bzgl. Spiegelung an der imaginären Achse; jene an der reellen liefert die Lage der Nullstellen. Eine Resonanz liegt vor, wenn sich ein

Pol-Nullstellen-Paar nahe der reellen Achse befindet. Deren Lage sei $E := E_r \mp i\Gamma/2$, ($E_r, \Gamma > 0$), wenn sie durch E statt k parametrisiert wird. Dann ist

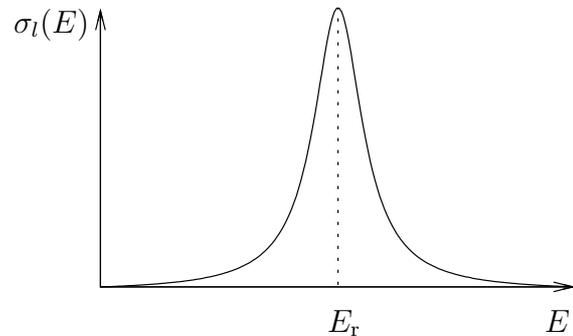
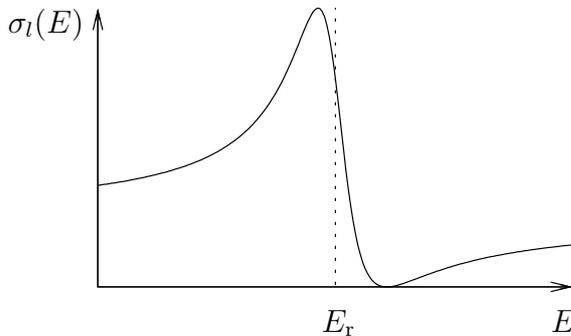
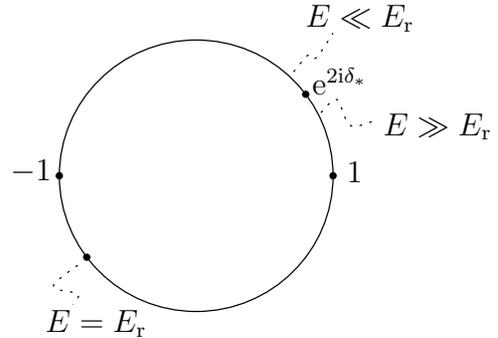
$$e^{2i\delta_l(E)} = \frac{E - (E_r + i\Gamma/2)}{E - (E_r - i\Gamma/2)} \cdot e^{2i\delta_*(E)},$$

wobei der ‘‘Hintergrund’’ $e^{2i\delta_*(E)}$ eine analytische Funktion ohne Pole noch Nullstellen nahe der Resonanzenergie ist, also $\delta_*(E) \approx \delta_*$ für $E \approx E_r$.

Der Verlauf von $\sigma_l(E)$ kann anhand von

$$4 \sin^2 \delta_l(E) = |e^{2i\delta_l(E)} - 1|^2 \quad (5.25)$$

und des Bilds abgelesen werden: Für $\delta_* \neq 0$ durchläuft (5.25) ein Maximum bei $e^{2i\delta_l(E)} = -1$ und ein Minimum bei $e^{2i\delta_l(E)} = 1$, wie in der Figur links (Fano-Feshbach Resonanz).



Oft (aber nicht immer) ist aber $\delta_* \approx 0$ und damit

$$\tan \delta_l = \frac{\Gamma/2}{E_r - E}, \quad \sigma_l(E) = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

(**Breit-Wigner Resonanz**), vgl. Figur rechts. Dabei hat $\Gamma/2$ die Bedeutung der Halbwertsbreite.

Ein Wellenpaket der Energie $\approx E$ weist nach der Streuung eine Verzögerung $\tau = \hbar d\delta_l/dE$ auf gegenüber einem vor der Streuung gleichen, aber stets freien Wellenpaket (vgl. Übung-en). Mit $\tan' x = 1 + \tan^2 x$ ergibt sich hier

$$\frac{d\delta_l}{dE} = \frac{\Gamma/2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

und mit $E \approx E_r \pm \Gamma/2$ liefert dies

$$\tau \approx \hbar/\Gamma$$

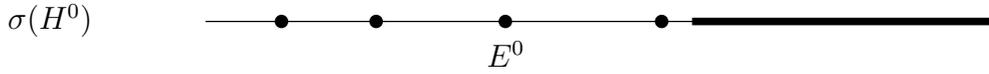
für die mittlere **Lebensdauer** der Resonanz.

Beispiel. Resonanzen mit $E_r = 0$ treten bei der Proton-Neutron Streuung auf, und zwar infolge eines virtuellen gebundenen Zustand bei antiparallelen Spins, bzw. eines gebundenen Zustands bei parallelen.

6 Näherungsmethoden

6.1 Störung des Eigenwertproblems

$H^0 = H^{0*}$ habe den vom Rest des Spektrums isolierten Eigenwert E^0 :



Es sei M^0 der Eigenraum von H^0 zum Eigenwert E^0 , $\dim M^0 \equiv n^0 < \infty$, und P^0 die Projektion auf M^0 . Dann ist $Q^0 \equiv 1 - P^0$ die Projektion auf $M^{0\perp}$. M^0 und $M^{0\perp}$ sind invariant unter H^0 , und die Teile von H^0 in M^0 bzw. $M^{0\perp}$ haben die Spektren $\{E^0\}$, bzw. $\sigma(H^0) \setminus \{E^0\}$. Insbesondere existiert $(E^0 - H^0)^{-1}$ auf $M^{0\perp}$, d.h. auch die reduzierte Resolvente

$$R^0 = (E^0 - H^0)^{-1}Q^0 = Q^0(E^0 - H^0)^{-1}Q^0. \quad (6.1)$$

Wir untersuchen nun das Verhalten des Eigenwerts E^0 unter dem Einfluss einer **Störung**

$$H^0 \rightsquigarrow H^0 + \varepsilon H^1, \quad (H^1 = H^{1*}) \quad (6.2)$$

für kleine Werte des Störparameters ε . Das triviale Beispiel $H^0 = E^0 \cdot 1$ zeigt schon, was passieren kann: der Eigenwert E^0 spaltet auf in n^0 Eigenwerte

$$E_k = E^0 + \varepsilon E_k^1, \quad (k = 1, \dots, n^0),$$

wobei die E_k^1 die Eigenwerte von H^1 sind. Im Allgemeinen nehmen wir an, dass E^0 in n^0 Eigenwerte $E_k(\varepsilon)$ mit Eigenvektoren $\psi_k(\varepsilon)$ aufspaltet, und dass $E_k(\varepsilon)$ und $\psi_k(\varepsilon)$ Entwicklungen nach Potenzen von ε besitzen. So setzen wir an:

$$(H^0 + \varepsilon H^1 - E^0 - \varepsilon E_k^1 - \varepsilon^2 E_k^2 - \dots)(\psi_k^0 + \varepsilon \psi_k^1 + \varepsilon^2 \psi_k^2 + \dots) = 0, \quad (k = 1 \dots n^0)$$

und finden durch Koeffizientenvergleich:

$$(H^0 - E^0)\psi_k^0 = 0, \quad (6.3)$$

$$(H^0 - E^0)\psi_k^1 + (H^1 - E_k^1)\psi_k^0 = 0, \quad (6.4)$$

$$(H^0 - E^0)\psi_k^2 + (H^1 - E_k^1)\psi_k^1 - E_k^2\psi_k^0 = 0, \quad (6.5)$$

.....

Nullte Ordnung. Gl. (6.3) bedeutet nur

$$Q^0\psi_k^0 = 0, \quad (6.6)$$

d.h. $\psi_k^0 \in M^0$. Weiter sind die ψ_k^0 in nullter Ordnung nicht bestimmt. Nur wenn E^0 ein einfacher Eigenwert ist, ist ψ_k^0 (bis auf Vielfache) dadurch bestimmt. Denn ansonsten hängen sie tatsächlich von der Störung ab: sie sind die Grenzwerte der gestörten Eigenvektoren $\psi_k(\varepsilon)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$.

Die E_k^l werden in Ordnungen $l \geq 1$ im Folgenden bestimmt. Bis anhin nicht eindeutig bestimmbar sind hingegen die ψ_k^l , denn nach (6.4, 6.5) kann ihnen ohne Schaden ψ_k^0

hinzuaddiert werden. Diese Freiheit wird beseitigt etwa durch die Forderung $P^0\psi_k(\varepsilon) = \psi_k^0$, d.h.

$$P^0\psi_k^l = 0, \quad (l = 1, 2, \dots). \quad (6.7)$$

Erste Ordnung. Wir operieren mit P^0 auf (6.4). Wegen $P^0(E^0 - H^0) = 0$ und (6.6) ergibt sich

$$P^0 H^1 P^0 \psi_k^0 = E_k^1 \psi_k^0, \quad (k = 1 \dots n^0). \quad (6.8)$$

Die Eigenwertstörungen erster Ordnung E_k^1 sind die Eigenwerte des Operators $P^0 H^1 P^0$ auf M^0 : ein n^0 -dimensionales Eigenwertproblem. Dieses bestimmt die ψ_k^0 (bis auf Normierung) soweit keine Entartungen auftreten. Praktisch wählt man in M^0 eine orthonormierte Basis $\{\varphi_r\}$ ungestörter Eigenvektoren. Dann ist der Operator $P^0 H^1 P^0$ dargestellt durch die Matrix

$$\langle \varphi_r | H^1 | \varphi_s \rangle, \quad (r, s = 1, \dots, n^0).$$

Die E_k^1 sind die Eigenwerte dieser Matrix, die zugehörigen Eigenvektoren (Spaltenvektoren) die Entwicklungskoeffizienten von ψ_k^0 in der Basis $\{\varphi_r\}$. Im Spezialfall $n^0 = 1$ ist bei Normierung $\|\psi^0\| = 1$

$$E^1 = \langle \psi^0 | H^1 | \psi^0 \rangle \quad (6.9)$$

die **Eigenwertverschiebung 1. Ordnung.** Wir operieren noch mit Q^0 auf (6.4) und finden wegen $Q^0\psi_k^0 = 0$:

$$(H^0 - E^0)Q^0\psi_k^1 = -Q^0 H^1 \psi_k^0,$$

also

$$Q^0\psi_k^1 = R^0 H^1 \psi_k^0, \quad (6.10)$$

und mit (6.7)

$$\psi_k^1 = R^0 H^1 \psi_k^0. \quad (6.11)$$

Zweite Ordnung. Wir greifen einen n^1 -fachen Eigenwert E^1 von (6.8) heraus mit Eigenvektoren ψ_k^0 , ($k = 1, \dots, n^1$), welche den zugehörigen Eigenraum $M^1 \subset M^0$ von $P^0 H^1 P^0$ aufspannen ($n^1 \leq n^0$). Es sei P^1 die Projektion auf M^1 , also $P^1\psi_k^0 = \psi_k^0$; $P^1 = P^1 P^0$; $P^1(H^0 - E^0) = 0$ und $P^1 P^0 (H^1 - E^1) P^0 = 0$. Operieren wir mit P^1 auf (6.5) so ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} E_k^2 \psi_k^0 &= P^1 (H^1 - E^1) \psi_k^1 = P^1 P^0 (H^1 - E^1) (P^0 + Q^0) \psi_k^1 \\ &= P^1 H^1 Q^0 \psi_k^1, \end{aligned}$$

und aus (6.10):

$$P^1 H^1 R^0 H^1 P^1 \psi_k^0 = E_k^2 \psi_k^0. \quad (6.12)$$

Dies ist ein n^1 -dimensionales Eigenwertproblem zur Bestimmung der Eigenwertstörungen E_k^2 und derjenigen ψ_k^0 , die in erster Ordnung noch unbestimmt geblieben sind. Im Fall $n^1 = 1$ ist ψ^0 schon durch (6.8) bestimmt, und für $\|\psi^0\| = 1$ ist

$$E^2 = \langle \psi^0 | H^1 R^0 H^1 | \psi^0 \rangle \quad (6.13)$$

die **Eigenwertverschiebung 2. Ordnung.** Wenn E^0 der tiefste Eigenwert von H^0 ist (Grundzustand), so ist $(E^0 - H^0) < 0$ auf $M^{0\perp}$, also $R^0 \leq 0$ und folglich auch $E^2 \leq 0$.

Das Auftreten der reduzierten Resolvente R^0 verunmöglicht oft die exakte Auswertung der Störungsformeln 2. Ordnung. Im Fall, dass H^0 nebst E^0 rein diskretes Spektrum besitzt, mit Eigenwerte $E_m^\perp \neq E^0$ und normierten Eigenvektoren ψ_m^\perp , so ist

$$R^0|\varphi\rangle = \sum_m |\psi_m^\perp\rangle \frac{\langle \psi_m^\perp | \varphi \rangle}{E^0 - E_m^\perp}$$

mit entsprechenden Ausdrücke für (6.11, 6.13).

Beispiel: Stark-Effekt. Wir untersuchen die Störung des Niveaus $n = 2$ des Wasserstoffatoms

$$H^0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

durch ein homogenes elektrisches Feld $(0, 0, E)$:

$$H^1 = -eEx_3.$$

Hier spielt E die Rolle des Störparameters. Die 4 Funktionen

$$\psi_{2lm}(\vec{x}) = \frac{u_{2l}(r)}{r} Y_{lm}(\vec{x}), \quad (l = 0, 1; m = -l, \dots, l).$$

bilden eine orthonormierte Basis im Raum der Eigenfunktionen von H^0 zur Energie $E_2 = -1/4 \text{ Ry}$. Allgemein ist

$$\langle \psi_{nlm} | x_3 | \psi_{n'l'm'} \rangle = 0, \quad (6.14)$$

falls $m \neq m'$, da M_3 mit x_3 vertauscht. Ebenso gilt (6.14) falls $l \neq l'$, da dann die beiden Faktoren des Skalarprodukts ungleiche Parität haben. Die 4×4 -Matrix $\langle \psi_{2lm} | H^1 | \psi_{2l'm'} \rangle$ hat also die sehr einfache Form:

	ψ_{200}	ψ_{210}	ψ_{211}	ψ_{21-1}	
ψ_{200}	0	ε	0	0	
ψ_{210}	$\bar{\varepsilon}$	0	0	0	(6.15)
ψ_{211}	0	0	0	0	
ψ_{21-1}	0	0	0	0	

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -eE \langle \psi_{200} | x_3 | \psi_{210} \rangle = -eE \underbrace{\int_0^\infty dr u_{20}(r) r u_{21}(r)}_{-3\sqrt{3}a_0} \underbrace{\int d\Omega Y_{00} \cos(\theta) Y_{10}}_{1/\sqrt{3}} \\ &= 3ea_0, \quad (a_0 = \text{Bohr-Radius}). \end{aligned}$$

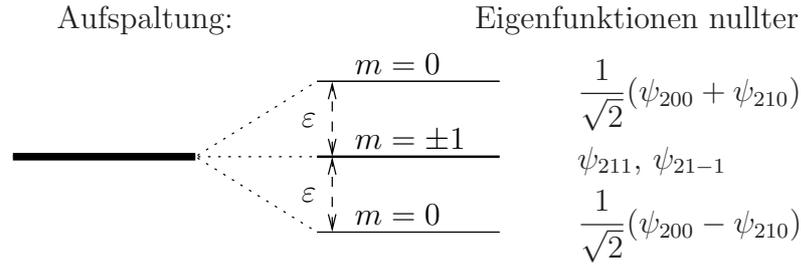
Diese Werte erhält man durch Berechnung der normierten radialen Eigenfunktionen $u_{20}(r)$ und $u_{21}(r)$ unter Benutzung von (4.13). Ausgedrückt durch das Feld des Kerns

$$E_{\text{Bohr}} \equiv \frac{e}{a_0^2} = 5.14 \cdot 10^{11} \text{ Volt} \cdot \text{m}^{-1}$$

im Abstand eines Bohr-Radius schreibt sich

$$\varepsilon = 3 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \cdot E_{\text{Bohr}} a_0 e = 6 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \frac{me^4}{2\hbar^2} = 6 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \text{Ry},$$

ist also praktisch sehr klein gegen die Bindungsenergie des H -Atoms. Aus der Lösung des Eigenwertproblems für die Matrix (6.15) ergibt sich folgendes Bild:

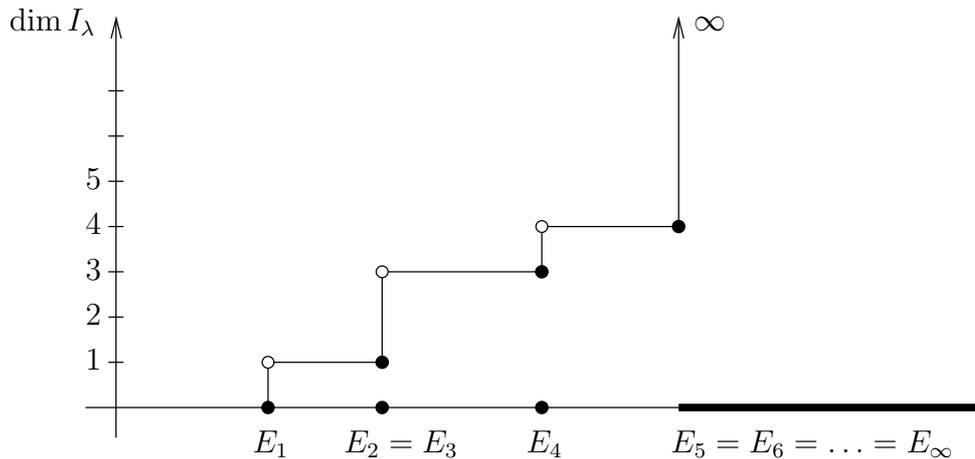


6.2 Variationsmethoden

Es sei $H = H^*$ nach unten beschränkt, I_λ das Intervall $(-\infty, \lambda)$ und $I_\lambda(H)$ die spektrale Projektion von H für dieses Intervall. Definition:

$$E_N \equiv \inf\{\lambda \mid \dim I_\lambda(H) \geq N\}, \quad (N = 1, 2, \dots). \quad (6.16)$$

Typischer Fall:



Es ist $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$, also existiert $\lim_{N \rightarrow \infty} E_N \equiv E_\infty$, wobei auch $E_\infty = \infty$ möglich ist. Die Zahlen $E_N < E_\infty$ bilden die Folge der aufsteigend geordneten, endlich entarteten Eigenwerte von H unterhalb E_∞ , wobei mehrfache Eigenwerte entsprechend oft auftreten.

Satz 1. (Min–Max Prinzip)

$$E_N = \inf_{\dim M=N} \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (6.17)$$

wobei das Infimum über alle Unterräume M der Dimension N zu nehmen ist und stets $\|\psi\| = 1$ vorausgesetzt wird. Im Fall $E_N < E_\infty$ ist das Infimum ein Minimum.

Bemerkung. Das Beispiel $H = p^2$ (kinetische Energie eines Teilchens) zeigt, warum die Unterscheidung von Infimum und Minimum nötig ist. Hier ist

$$\dim I_\lambda(H) = \begin{cases} \infty, & (\lambda > 0), \\ 0, & (\lambda \leq 0), \end{cases} \quad \text{also} \quad E_1 = E_2 = \dots = E_\infty = 0,$$

aber es gibt keinen Zustand ψ mit $\langle \psi | H | \psi \rangle = 0$.

Beweis von Satz 1. Die Eigenvektoren von H zu allen Eigenwerten $< E_N$ spannen einen Raum der Dimension $< N$ auf. Jeder N -dimensionale Unterraum M enthält also einen Zustand ψ , der zu all diesen Eigenvektoren orthogonal ist, so dass

$$E_N \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \leq \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle .$$

Da dies für jeden Unterraum M der Dimension N gilt, ist auch

$$E_N \leq \inf_{\dim M=N} \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle .$$

Sei nun $\lambda > E_N$. Dann ist $\dim I_\lambda(H) \geq N$. Der Bildraum von $I_\lambda(H)$ enthält also einen N -dimensionalen Unterraum M und es ist

$$\max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle \leq \lambda .$$

Somit ist

$$\inf_{\dim M=N} \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle \leq \lambda$$

für alle $\lambda > E_N$, also auch für $\lambda = E_N$. Falls $E_N < E_\infty$, so wählen wir M aufgespannt durch N Eigenvektoren ψ_1, \dots, ψ_N zu den Eigenwerten $E_1 \dots E_N$. Dann ist

$$E_N = \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

für dieses M , und

$$E_N \leq \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

für alle M der Dimension N , also das Infimum in (6.17) ein Minimum.

Satz 2. Sei $H^{(1)} \leq H^{(2)}$, beide beschränkt nach unten. Dann gilt für die entsprechenden Folgen

$$E_N^{(1)} \leq E_N^{(2)} , \quad (N = 1, 2, \dots) . \quad (6.18)$$

Beweis. Sei $\dim M = N$. Für alle $\psi \in M$ ist

$$\langle \psi | H^{(1)} | \psi \rangle \leq \langle \psi | H^{(2)} | \psi \rangle \leq \max_{\psi \in M} \langle \psi | H^{(2)} | \psi \rangle ,$$

also

$$E_N^{(1)} \leq \max_{\psi \in M} \langle \psi | H^{(2)} | \psi \rangle$$

für alle M der Dimension N und folglich $E_N^{(1)} \leq E_N^{(2)}$.

Satz 3. Sei M ein m -dimensionaler Unterraum ($m < \infty$) und ψ_1, \dots, ψ_m eine orthonormierte Basis in M . Dann ist

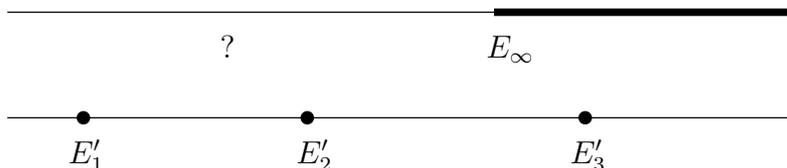
$$E_N \leq E'_N , \quad (N = 1, \dots, m) , \quad (6.19)$$

wobei die E'_N die aufsteigend geordneten Eigenwerte der Matrix $\langle \psi_i | H | \psi_k \rangle$ sind.

Beweis. Die E'_N , ($N = 1, \dots, m$) sind die Eigenwerte des Operators PHP auf M , P =Projektion auf M . Es sei $N \leq m$ und M_N der Unterraum, aufgespannt durch Eigenvektoren ψ_1, \dots, ψ_N von PHP zu den Eigenwerten E'_1, \dots, E'_N . Dann ist

$$E'_N = \max_{\psi \in M_N} \langle \psi | H | \psi \rangle \geq \inf_{\dim M=N} \max_{\psi \in M} \langle \psi | H | \psi \rangle = E_N .$$

Beispiel.



In dieser Situation kann man nur schliessen, dass H mindestens zwei Eigenwerte $E_1 \leq E'_1$ und $E_2 \leq E'_2$ besitzt — die $E'_N \geq E_\infty$ geben keine Information. Ein wichtiger Spezialfall ist

Satz 4. (Grundzustand) Sei $\langle \psi | H | \psi \rangle < E_\infty$ für irgend ein ψ , ($\|\psi\| = 1$). Dann hat H einen endlich entarteten Grundzustand der Energie

$$E_1 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle . \tag{6.20}$$

6.3 Das Beispiel Helium

Das Helium-Atom besteht aus einem Kern ($Z = 2$) und zwei Elektronen, deren Wechselwirkung wir als Störung auffassen: $H = H^0 + H^1$ auf $L^2(\mathbb{R}^6)$ mit

$$H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right), \quad H^1 = \frac{e^2}{r_{12}},$$

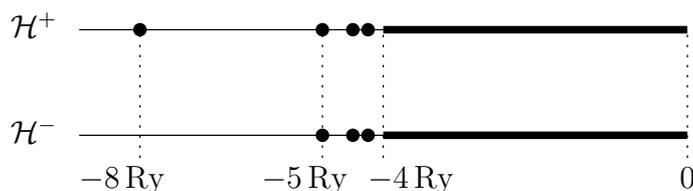
wobei $r_k = |\vec{x}_k|$ und $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$. Der Kern ist fest bei $\vec{x} = 0$ angenommen. H vertauscht mit

$$U : \quad \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mapsto \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$$

und lässt daher die beiden Eigenräume von U (Symmetrie-Sektoren) invariant, nämlich

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^+ &= \{ \psi \mid U\psi = \psi \}, & (\psi \text{ symmetrisch}), \\ \mathcal{H}^- &= \{ \psi \mid U\psi = -\psi \}, & (\psi \text{ antisymmetrisch}). \end{aligned} \tag{6.21}$$

Dies gilt auch für H^0 , man kann daher das Störungsproblem in \mathcal{H}^+ und \mathcal{H}^- getrennt betrachten. Die entsprechenden Spektren von H^0 sind:



mit den normierten Eigenfunktionen

$$\begin{aligned}\psi_{100}^+(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \varphi_{100}(\vec{x}_1)\varphi_{100}(\vec{x}_2), & (n=1), \\ \psi_{nlm}^\pm(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{nlm}(\vec{x}_1)\varphi_{100}(\vec{x}_2) \pm \varphi_{nlm}(\vec{x}_2)\varphi_{100}(\vec{x}_1)), & (n>1),\end{aligned}$$

zu den isolierten Eigenwerten

$$E_n^0 = -4 \cdot \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(1 + \frac{1}{n^2}\right). \quad (6.22)$$

Dabei sind die φ_{nlm} die Wasserstoff-Zustände für die Kernladung $Z = 2$ (He^+ -Ion). Im Intervall $(-4 \text{ Ry}, 0)$ hat H^0 noch ∞ viele Eigenwerte, die im Kontinuum eingebettet sind — diese betrachten wir hier nicht. Unter dem Einfluss der positiven Störung H^1 werden die Eigenwerte (6.22) nach oben verschoben, s. (6.18). Die Schwelle -4 Ry zum Kontinuum bleibt jedoch unverändert, da der Grundzustand von He^+ von der Abstossung der Elektronen nicht berührt wird.

Der Grundzustand. Im normierten Zustand

$$\varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = f(r_1)f(r_2), \quad f(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}, \quad (a > 0)$$

wird

$$\begin{aligned}\langle \Delta_1 \rangle &= \langle \Delta_2 \rangle = - \int d^3x (\nabla f)^2 = -4\pi \int_0^\infty dr r^2 |f'(r)|^2 = -a^{-2}, \\ \langle r_1^{-1} \rangle &= \langle r_2^{-1} \rangle = 4\pi \int_0^\infty dr r |f(r)|^2 = a, \\ \langle r_{12}^{-1} \rangle &= 2 \int d^3x_1 f^2(r_1) \int_{r_2 \leq r_1} d^3x_2 r_{12}^{-1} f^2(r_2) \\ &= 2 \int d^3x_1 f^2(r_1) 4\pi r_1^{-1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 f^2(r_2) \\ &= a^{-1} \int_0^\infty dx x e^{-x} \int_0^x dy y^2 e^{-y} \\ &= a^{-1} \frac{\partial^3}{\partial \sigma \partial \rho^2} \int_0^\infty dx e^{-\sigma x} \int_0^x dy e^{-\rho y} \Big|_{\sigma=\rho=1} = \frac{5}{8} a^{-1}.\end{aligned}$$

Bei der Berechnung von $\langle r_{12}^{-1} \rangle$ wurde verwendet, dass das Coulombpotential einer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung ausserhalb von ihr so ist, als ob sich die gesamte Ladung in ihrem Mittelpunkt befände. Insgesamt:

$$\begin{aligned}\langle H^0 \rangle &= 2 \text{ Ry} \cdot (\alpha^2 - 4\alpha), & \langle H^1 \rangle &= 2 \text{ Ry} \cdot \frac{5}{8} \alpha, \\ \text{Ry} &= \frac{me^4}{2\hbar^2}, & \alpha &= \frac{a_0}{a}, & a_0 &= \frac{\hbar^2}{me^2} = \text{Bohr-Radius}.\end{aligned}$$

• **Störungsrechnung 1. Ordnung.** Hier wählt man φ als Grundzustand von H^0 ($f =$ Grundzustand von He^+), d.h. α so dass $\langle H^0 \rangle$ minimal wird:

$$\alpha = 2 : \quad \left. \begin{aligned}\langle H^0 \rangle &= E_1^0 = -8 \text{ Ry} \\ \langle H^1 \rangle &= +2.5 \text{ Ry}\end{aligned} \right\} \quad \langle H \rangle = -5.5 \text{ Ry},$$

entsprechend einer Energiedifferenz (Ionisierungsenergie) von 1.5 Ry zur Grundzustandsenergie des He^+ .

• **Variationsrechnung.** Hier wählt man α so dass

$$\langle H \rangle = 2 \text{ Ry} \cdot \left(\alpha^2 - \frac{27}{8} \alpha \right)$$

minimal wird:

$$\alpha = \frac{27}{16} : \quad \langle H \rangle = -2 \text{ Ry} \left(\frac{27}{16} \right)^2 = -5.695 \text{ Ry} .$$

Da die Eigenwerte in $\mathcal{H}^- \geq -5 \text{ Ry}$ sind, liegt der Grundzustand von Helium in \mathcal{H}^+ , mit einer Ionisierungsenergie $\geq 1.695 \text{ Ry}$.

Angeregte Zustände. In erster Ordnung Störungsrechnung ist die Verschiebung der Eigenwerte in \mathcal{H}^\pm :

$$\Delta E_{nl}^\pm = \langle \psi_{nlm}^\pm | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_{nlm}^\pm \rangle > 0 ,$$

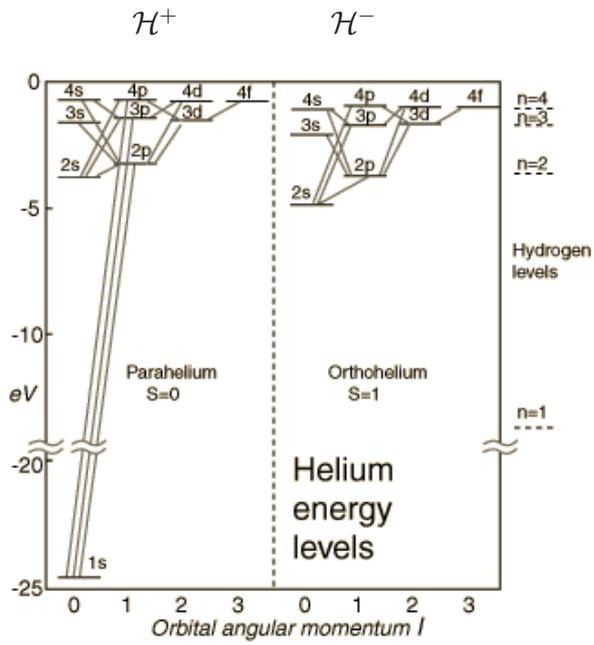
unabhängig von m . (Dies ist eine Folge des auf Seite ?? behandelten Wigner–Eckart Theorems.) Die l -Entartung hingegen wird aufgehoben, ebenso die Entartung zwischen \mathcal{H}^+ und \mathcal{H}^- : man findet

$$\begin{aligned} \Delta E_{nl}^\pm &= D_{nl} \pm A_{nl} , \\ D_{nl} &= e^2 \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} |\varphi_{100}(\vec{x}_1) \varphi_{nlm}(\vec{x}_2)|^2 , \\ A_{nl} &= e^2 \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} \overline{\varphi_{100}(\vec{x}_1)} \varphi_{nlm}(\vec{x}_1) \varphi_{100}(\vec{x}_2) \overline{\varphi_{nlm}(\vec{x}_2)} , \end{aligned}$$

beide unabhängig von m . Nebst dem **direkten Integral** D_{nl} ist auch das **Austauschintegral** A_{nl} ist > 0 , denn A_{nl} ist von der Form

$$A_{nl} = \int d^3x d^3y \frac{\rho(\vec{x}) \overline{\rho(\vec{y})}}{|\vec{x} - \vec{y}|} = \frac{1}{4\pi} \int d^3x \vec{E}(\vec{x}) \cdot \overline{\vec{E}(\vec{x})} > 0 ,$$

wobei — in Analogie zur Elektrostatik — $\vec{E}(\vec{x})$ das von der komplexen Dichte $\rho(\vec{x})$ erzeugte elektrische Feld ist. Das Austauschintegral sorgt also für die Aufhebung der Entartung zwischen \mathcal{H}^+ und \mathcal{H}^- , und zwar so, dass die entsprechenden Eigenwerte in \mathcal{H}^- tiefer liegen als in \mathcal{H}^+ .



Experimentell findet man 2 Termschemata, zwischen denen es keine (oder nur sehr schwache) Übergänge gibt. Denn: Auch die Störung durch ein elektromagnetisches Feld erhält die Symmetrie bezüglich Vertauschung der beiden Elektronen.

Quelle: hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/helium.html

7 Drehimpuls und Spin

7.1 Symmetrien im Hilbertraum

Bevor wir zum eigentlichen Thema des Kapitels gelangen, soll der Zustandsbegriff und insbesondere (3.3) nochmals erörtert werden. Dem folgenden Satz gehen zwei Definitionen voran.

Der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems ist ein Hilbertraum \mathcal{H} über \mathbb{C} . Ein (reiner) Zustand ist ein **Strahl**: $\{\lambda\psi\}$, wobei $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$ fest und $\lambda \in \mathbb{C}$, $|\lambda| = 1$ beliebig ist, und umgekehrt. Eindeutig sind reine Zustände gegeben durch **1-dimensionale orthogonale Projektoren** Π auf \mathcal{H} :

$$\Pi\phi = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle$$

(bzw. $\Pi = |\psi\rangle\langle\psi|$). Sei $\Pi(\mathcal{H})$ die Menge aller solcher Projektoren.

Definition. Eine **Symmetrie** (zwischen \mathcal{H} und \mathcal{H}') ist eine Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$, $\Pi \mapsto \Pi'$, derart dass

$$\text{tr}(\Pi_1\Pi_2) = \text{tr}(\Pi'_1\Pi'_2) . \quad (7.1)$$

Durch Strahlen ausgedrückt:

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = |\langle\psi'_1|\psi'_2\rangle|^2 .$$

Definition. Ein **antilinearer Operator** $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$ ist eine Abbildung mit

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \bar{\lambda}_1 A|\psi_1\rangle + \bar{\lambda}_2 A|\psi_2\rangle , \quad (\lambda_i \in \mathbb{C}, |\psi_i\rangle \in \mathcal{H}) .$$

Sein adjungierter Operator ist durch

$$\langle\phi|A^*\psi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle , \quad (|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H})$$

definiert (beachte den Unterschied zu (3.4)). Eine antilineare **Isometrie** liegt vor, falls

$$\langle A\phi|A\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle ,$$

d.h. $A^*A = 1$. Ist ferner A invertierbar oder, äquivalent dazu, $AA^* = 1$, so heisst A **antiunitär**.

Es gelten die Regeln wie im linearen Fall. Beachte allerdings

$$(\lambda A)^* = A^*\bar{\lambda} = \lambda A^* . \quad (7.2)$$

Satz. (Wigner) Jede Symmetrie ist dargestellt als

$$S(\Pi) = U\Pi U^* \quad (7.3)$$

(d.h. $\psi_2 = U\psi_1$) mit U einer entweder linearen oder antilinearen Isometrie. U ist eindeutig bis auf Multiplikation mit einer Phase $c \in \mathbb{C}$, $|c| = 1$.

Beweis. s. Anhang D.

Bemerkung. Ist die Symmetrie umkehrbar, so ist U unitär oder antiunitär.

Diskrete Symmetrien. Wir betrachten zunächst ein klassisches Teilchen im Raum (oder stillschweigend mehrere), bei dem dynamischer und kinematischer Impuls übereinstimmen: $\vec{p} = m\dot{\vec{x}}$. Die diskreten Symmetrien **Raumspiegelung** P und **Zeitumkehr** T sind

$$\begin{aligned} P : (\vec{x}, \vec{p}) &\rightarrow (-\vec{x}, -\vec{p}) , \\ T : (\vec{x}, \vec{p}) &\rightarrow (\vec{x}, -\vec{p}) . \end{aligned}$$

Sollen P, T auch Symmetrien im Sinne obiger quantenmechanischer Definition sein, so ist von den Operatoren U_P, U_T aus Gl. (7.3)

$$\begin{aligned} U_P^* x_i U_P &= -x_i , & U_P^* p_i U_P &= -p_i , \\ U_T^* x_i U_T &= x_i , & U_T^* p_i U_T &= -p_i \end{aligned}$$

zu verlangen. Insbesondere ist $U_P^*[p_i, x_j]U_P = [p_i, x_j]$, $U_T^*[p_i, x_j]U_T = -[p_i, x_j]$. Vergleich mit $[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ zeigt, dass U_P **linear** und U_T **antilinear** sein muss.

Für eine Symmetrie S mit $S^2 = 1$ folgt aus (7.3) für das entsprechende U

$$U^2 = c$$

mit $|c| = 1$. Im linearen Fall kann durch Wahl der (unbestimmten) Phase von U $c = 1$ erreicht werden. Im antilinearen bringt dies nichts; hingegen folgt aus $U^2 U = U U^2$, dass $c = \bar{c}$. Also

$$U^2 = \begin{cases} 1 , & \text{(linear),} \\ \pm 1 , & \text{(antilinear),} \end{cases}$$

wobei das Vorzeichen eindeutig durch S bestimmt ist. Insbesondere folgt aus $P^2 = T^2 = 1$

$$U_P^2 = 1 , \quad U_T^2 = c_T = \pm 1 .$$

Für ein Teilchen im \mathbb{R}^3 ohne weitere Freiheitsgrade (Spin), also $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, erfüllen die Abbildungen

$$(U_P\psi)(\vec{x}) = -\psi(-\vec{x}) , \quad (U_T\psi)(\vec{x}) = \overline{\psi(\vec{x})}$$

alle obigen Vorgaben und zwar mit $c_T = +1$. Allgemein ist S eine **Symmetrie des Hamiltonoperators** H , falls für das entsprechende U gilt

$$U e^{-iHt/\hbar} = c(t) \begin{cases} e^{-iHt/\hbar} U , & \text{(linear),} \\ e^{+iHt/\hbar} U , & \text{(antilinear),} \end{cases} \quad (7.4)$$

mit $|c(t)| = 1$. Im Fall $S^2 = 1$ folgt daraus

$$c(t) = 1 , \quad (7.5)$$

(s. unten). Äquivalent zu (7.4) ist dann, und zwar in beiden Fällen,

$$[U, H] = 0 ,$$

wie man durch Ableitung nach t sieht.

Beweis von (7.5). Im linearen Fall folgt aus $(Ue^{-iHt/\hbar})U = U(e^{-iHt/\hbar}U)$, dass $c(t) = \overline{c(t)}$, also $c(t) = \pm 1$ und $c(t) = 1$ aus $c(0) = 1$ und Stetigkeit. Im antilinearen Fall multipliziert man (2) mit $(U^*)^2$; da $(U^*)^2 = \pm 1$ kann dies links von links und rechts von rechts geschehen: $U^*e^{-iHt/\hbar} = c(t)e^{iHt/\hbar}U^*$. Das Adjungierte davon (beachte (7.2)) ist (7.4) mit $c(t) \rightarrow \overline{c(t)}$. Es folgt $c(t) = 1$ wie vorher.

Auch für Systeme, bei welchen \vec{x}, \vec{p} keine Observablen sind, ist die Zeitumkehr antilinear. Denn $t \rightarrow -t$ als Symmetrie des Hamiltonoperators bedeutet sinngemäss $U_T e^{-iHt/\hbar} = e^{2i\alpha(t)/\hbar} e^{iHt/\hbar} U_T^*$. Wäre U_T linear, so würde folgen

$$U_T^*(H + \dot{\alpha})U_T = -(H + \dot{\alpha})$$

und insbesondere müsste das Spektrum bei geeigneter Verschiebung des Energienullpunkts symmetrisch bzgl. $\lambda \rightarrow -\lambda$ sein. Diese an sich schon restriktive Bedingung steht im Widerspruch zum Spektrum typischer Hamiltonoperatoren, welches nach unten beschränkt, nach oben aber unbeschränkt ist.

Kontinuierliche Symmetrien. Sei G eine zusammenhängende Lie-Gruppe. Eine **projektive Darstellung** von G in \mathcal{H} ist eine (umkehrbare) Symmetrie $S_g : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H})$ für $g \in G$ mit

$$S_g \circ S_h = S_{gh}, \quad S_g(\Pi) \text{ stetig in } g. \quad (7.6)$$

Nach dem Satz entspricht der Symmetrie S_g eine (bis auf eine Phase eindeutigen) Abbildung $U_g : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit

$$S_g(\Pi) = U_g \Pi U_g^*$$

und (7.6) bedeutet

$$U_g U_h = \omega(g, h) U_{gh}$$

mit $\omega(g, h) \in U(1) = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$. ($g \mapsto U_g$ heisst ebenfalls projektive Darstellung von G). Insbesondere ist U_g unitär (und nicht antiunitär), da jedes $g \in G$ von der Form $g = h^2$ ist. Durch Betrachtung von $U_f U_g U_h$ folgt

$$\omega(f, g)\omega(fg, h) = \omega(f, gh)\omega(g, h) \quad (7.7)$$

und speziell $\omega(g, e) = \omega(e, g) = \omega(e, e)$, (e : Einheit in G). Die Phase $\omega(g, h)$ ist nicht eindeutig: Unter der "Eichtransformation" $U_g \mapsto \lambda(g)U_g$ mit $\lambda(g) \in U(1)$ geht sie über in die äquivalente Phase

$$\omega'(g, h) = \omega(g, h)\lambda(g)\lambda(h)\lambda(gh)^{-1}. \quad (7.8)$$

Insbesondere ist U_g äquivalent zu einer (üblichen) Darstellung, falls $\omega'(g, h) \equiv 1$ erzielt werden kann.

Satz. Betrachte die Listen von zusammenhängenden Lie-Gruppen:

- (i) $SO(n)$, Euklidische Bewegungsgruppe, $\Lambda(4)$ (Lorentz-Gruppe), $\mathcal{P}(4)$ (inhomogene Lorentz-Gruppe);
- (ii) \mathbb{R} (bzgl. +), $SU(n)$, $Spin(n)$ ($n \geq 2$), universelle Überlagerungsgruppen aus (i).

In einer genügend kleinen Umgebung von $e \in G$ kann $\omega(g, h) = 1$ gewählt werden. Für die **einfach zusammenhängenden** unter ihnen (Liste (ii)) gilt dies global. Dann ist jede projektive Darstellung von G zu einer (üblichen) unitären Darstellung äquivalent.

Nicht in die Liste aufgenommen werden dürfen \mathbb{R}^n ($n \geq 2$), sowie die Galilei-Gruppe.

7.2 Drehungen

Unter einer Drehung $R \in \text{SO}(3)$, $\vec{x} \mapsto R\vec{x}$ eines quantenmechanischen Systems ändern sich seine Zustände $\psi \in \mathcal{H}$ gemäss $\psi \mapsto U(R)\psi$, wobei $U(R)$ eine **unitäre Darstellung** von $\text{SO}(3)$ ist, d.h.

$$\begin{aligned} U : \text{SO}(3) &\rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{\text{lineare Abbildungen } \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\}, \\ R &\mapsto U(R) \end{aligned} \quad (7.9)$$

ein Homomorphismus ist,

$$U(R_1)U(R_2) = U(R_1R_2), \quad U(1) = \mathbf{1},$$

der unitär ist: $U(R)^{-1} = U(R)^*$.

Beispiel. Vgl. (3.58):

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3), \quad (U_0(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}). \quad (7.10)$$

Bemerkung. Nach dem vorigen Abschnitt erfordert die Quantenmechanik erfordert bloss, dass die Darstellung der $\text{SO}(3)$ eine projektive ist. Wir übersehen dies zunächst, kommen aber später auf Seite 74 darauf zurück.

Infinitesimale Drehungen sind Elemente Ω des Tangentialraums an $\text{SO}(3)$ im Punkt $\mathbf{1}$,

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} R(t) \right|_{t=0}, \quad (7.11)$$

wobei $t \mapsto R(t)$ eine differenzierbare Kurve in $\text{SO}(3)$ durch $R(0) = \mathbf{1}$ ist. Mit Ω_1 und Ω_2 sind dann auch

$$\begin{aligned} \alpha_1\Omega_1 + \alpha_2\Omega_2 &= \left. \frac{d}{dt} R_1(\alpha_1t)R_2(\alpha_2t) \right|_{t=0}, \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}), \\ R\Omega_1R^{-1} &= \left. \frac{d}{dt} RR_1(t)R^{-1} \right|_{t=0}, \quad (R \in \text{SO}(3)), \\ [\Omega_1, \Omega_2] &= \left. \frac{d}{dt} R_1(t)\Omega_2R_1(t)^{-1} \right|_{t=0} \end{aligned} \quad (7.12)$$

infinitesimale Drehungen: Diese bilden mit der Klammer $[\cdot, \cdot]$ die **Lie-Algebra** $\text{so}(3)$ von $\text{SO}(3)$. Wegen

$$\begin{aligned} R^T(t)R(t) = \mathbf{1} &\quad \Rightarrow \quad \Omega^T + \Omega = 0, \\ \Omega^T + \Omega = 0 &\quad \Rightarrow \quad (e^{\Omega t})^T (e^{\Omega t}) = e^{(\Omega^T + \Omega)t} = \mathbf{1} \end{aligned}$$

besteht $\text{so}(3)$ aus allen antisymmetrischen 3×3 -Matrizen. Jede solche Matrix ist von der Form

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

d.h.

$$\Omega(\vec{\omega})\vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x} \quad (7.13)$$

mit $\vec{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in \mathbb{R}^3$. So ist $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{so}(3) = 3$, z.B. mit Basisvektoren

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

wobei $\{\vec{e}_i\}$ die Standardbasis für \mathbb{R}^3 ist. Für $\vec{\omega} = \omega\vec{e}$, ($|\vec{e}| = 1$) ist $e^{\Omega(\vec{\omega})t} = R(\vec{e}, \omega t)$ die Drehung um Achse \vec{e} und Winkel ωt . Es gilt:

$$R\Omega(\vec{\omega})R^{-1} = \Omega(R\vec{\omega}), \quad (R \in \text{SO}(3)),$$

also $[\Omega(\vec{\omega}_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2)$ und insbesondere

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad (\text{und zyklisch}). \quad (7.14)$$

Jeder unitären Darstellung (7.9) der $\text{SO}(3)$ auf \mathcal{H} entspricht nun eine Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$:

$$U(\Omega) := \left. \frac{d}{dt} U(R(t)) \right|_{t=0} \quad (7.15)$$

mit Ω , $R(t)$ wie in (7.11). (1. Genau: falls $\dim \mathcal{H} < \infty$; ansonsten ist $U(\Omega)$ ein unbeschränkter Operator mit $\psi \in D(U(\Omega))$ genau dann, falls $U(R(t))\psi$ differenzierbar ist. 2. $U(\Omega)$ ist eindeutig durch Ω bestimmt, obschon es $R(t)$ in (7.11) nicht ist.) Die Abbildung $\Omega \mapsto U(\Omega)$ ist nämlich ein Homomorphismus der $\mathfrak{so}(3)$:

$$\begin{aligned} U(\alpha_1\Omega_1 + \alpha_2\Omega_2) &= \alpha_1 U(\Omega_1) + \alpha_2 U(\Omega_2), & (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}), \\ U([\Omega_1, \Omega_2]) &= [U(\Omega_1), U(\Omega_2)], \end{aligned} \quad (7.16)$$

wobei letzteres aus

$$U(R\Omega R^{-1}) = U(R)U(\Omega)U(R)^{-1}, \quad (R \in \text{SO}(3))$$

folgt. Dass die Darstellung unitär ist, bedeutet nun

$$U(\Omega)^* = -U(\Omega).$$

Für jedes $\vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$ definieren wir den selbstadjungierten **Drehimpulsoperator**

$$M(\vec{\omega}) := iU(\Omega(\vec{\omega})), \quad (7.17)$$

also

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

wobei die Vertauschungsrelationen der $M_i = M(\vec{e}_i)$

$$[M_1, M_2] = iM_3 \quad (\text{und zyklisch}) \quad (7.18)$$

lauten.

7.3 Irreduzible Darstellungen

Eine Darstellung auf \mathcal{H} heisst **irreduzibel**, falls $\{0\}$, \mathcal{H} ihre einzigen invarianten Teilräume sind. Jede Darstellung zerfällt in eine direkte Summe irreduzibler, sodass es genügt, letztere zu klassifizieren. Wir tun dies für $\mathfrak{so}(3)$, denn damit erfasst man wegen (7.15) auch die von $\mathrm{SO}(3)$. Ferner setzen wir $\dim \mathcal{H} < \infty$ voraus (was für die Anwendungen genügt), nicht aber, dass die Darstellung unitär ist ($M_i = M_i^*$, $i = 1, 2, 3$). Sei

$$M_{\pm} = M_1 \pm iM_2 ,$$

(**Auf- und Absteigeoperatoren**), sodann (7.18) gleichbedeutend ist mit

$$[M_3, M_{\pm}] = \pm M_{\pm} , \quad [M_+, M_-] = 2M_3 . \quad (7.19)$$

Sei ψ ein Eigenvektor von M_3 :

$$M_3\psi = z\psi$$

für ein $z \in \mathbb{C}$. Damit ist auch $z \pm 1$ ein Eigenwert, sofern $M_{\pm}\psi \neq 0$:

$$M_3M_{\pm}\psi = M_{\pm}M_3\psi + [M_3, M_{\pm}]\psi = (z \pm 1)M_{\pm}\psi .$$

Da $\dim \mathcal{H} < \infty$, kann dieses Argument nicht beliebig wiederholt werden: Es gibt einen Eigenwert $j \in \mathbb{C}$ mit Eigenvektor ψ_j , derart dass

$$M_3\psi_j = j\psi_j , \quad M_+\psi_j = 0 .$$

Wir setzen induktiv

$$M_-\psi_m =: \psi_{m-1} \quad (7.20)$$

für $m = j, j-1, \dots$; somit ist

$$M_3\psi_m = m\psi_m . \quad (7.21)$$

Auch diese Folge muss abbrechen, d.h. es gibt ein $k \in \mathbb{N}$, sodass

$$\psi_{j-k} \neq 0 , \quad M_-\psi_{j-k} = 0 . \quad (7.22)$$

Falls

$$M_+\psi_m = \mu_m\psi_{m+1} \quad (7.23)$$

(was für $m = j$ zutrifft mit $\mu_j = 0$), so gilt auch

$$\begin{aligned} M_+\psi_{m-1} &= M_+M_-\psi_m = [M_+, M_-]\psi_m + M_-M_+\psi_m \\ &= (2m + \mu_m)\psi_m \equiv \mu_{m-1}\psi_m . \end{aligned}$$

Es folgt induktiv

$$\mu_m = j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+1+m) .$$

Die Bedingung (7.22) besagt $\mu_{j-k-1} = 0$, also $2j = k$:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots . \quad (7.24)$$

Jeder irreduziblen Darstellung entspricht damit ein solches j . Umgekehrt verifiziert man, dass M_3, M_\pm , durch (7.20, 7.21, 7.23) auf Basisvektoren ψ_j, \dots, ψ_{-j} definiert, (7.19) erfüllen und somit eine Darstellung \mathcal{D}_j der $\mathfrak{so}(3)$ liefern. Darin ist

$$\vec{M}^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = M_\pm M_\mp + M_3(M_3 \mp 1)$$

ein Vielfaches der 1:

$$\vec{M}^2 \psi = j(j+1)\psi, \quad (\psi \in \mathcal{D}_j), \quad (7.25)$$

denn dies gilt für $\psi = \psi_j$ und \vec{M}^2 vertauscht mit M_i , ($i = 1, 2, 3, +, -$).

Satz. Die endlich dimensionalen irreduziblen Darstellungen \mathcal{D}_j , der $\mathfrak{so}(3)$, s. (7.14) sind parametrisiert durch (7.24) mit $\dim \mathcal{D}_j = 2j + 1$. Es gilt (7.25).

Ist die Darstellung unitär, d.h. $M_i = M_i^*$, ($i = 1, 2, 3$), und damit $M_\pm^* = M_\mp$, so ist eine orthonormierte Basis

$$\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$$

für \mathcal{D}_j durch

$$|j, j\rangle := \frac{\psi_j}{\|\psi_j\|}, \quad \sqrt{\mu_m}|j, m\rangle := M_-|j, m+1\rangle$$

gegeben. Diesbezüglich ist

$$\begin{aligned} \vec{M}^2|j, m\rangle &= j(j+1)|j, m\rangle, \\ M_3|j, m\rangle &= m|j, m\rangle, \\ M_\pm|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Führt man umgekehrt ein Skalarprodukt ein, indem man die Basis $\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$ als orthonormiert erklärt, so ist die Darstellung \mathcal{D}_j unitär.

Bemerkung. Es gibt keine ∞ -dimensionale unitäre irreduzible Darstellungen der $\mathfrak{so}(3)$, wohl aber nicht unitäre.

Beispiele. 1. Die 1-dim. Darstellung \mathcal{D}_0 ist **trivial**: $M_i = 0$.

2. Die **fundamentale** Darstellung ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ (besser: \mathbb{C}^3) mit $U(R) = R$, bzw. $U(\Omega) = \Omega$. Sie ist irreduzibel, hat Dimension 3 und ist somit isomorph zu \mathcal{D}_1 . Dasselbe gilt für die **adjungierte** Darstellung auf $\mathcal{H} = \mathfrak{so}(3)$ (besser: die Komplexifizierung $\mathfrak{so}(3)_\mathbb{C}$) mit, s. (7.12, 7.15),

$$U(R)\Omega = R\Omega R^{-1}, \quad U(\Omega_1)\Omega_2 = [\Omega_1, \Omega_2].$$

3. Der Raum \mathcal{Y}_l der Kugelfunktionen zum Index $l = 0, 1, 2, \dots$ (s. Anhang B) trägt die Darstellung \mathcal{D}_l , da $\vec{M}^2 = l(l+1)$ und $\dim \mathcal{Y}_l = 2l + 1$.

Für jede Darstellung \mathcal{D}_j , die aus $\mathfrak{SO}(3)$ stammt, ist j ganzzahlig, d.h. $j = 0, 1, 2, \dots$, denn wegen $U(R(\vec{e}_3, \varphi)) = e^{-iM_3\varphi}$ und $R(\vec{e}_3, 2\pi) = 1$ ist $|j, m\rangle = e^{-2\pi im}|j, m\rangle$, also $m \in \mathbb{Z}$.

7.4 Einschub: Zusammengesetzte Quantensysteme

Wie baut man zwei Teilsysteme zu einem Gesamtsystem zusammen? Beispiel: der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^6)$ der 2-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ wird aufgespannt durch die (Tensor)produkte:

$$\psi^{(1)}(\vec{x}_1)\psi^{(2)}(\vec{x}_2) = (\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)})(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

von 1-Teilchen Wellenfunktionen $\psi^{(i)} \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Allgemein: der Hilbertraum des Gesamtsystem ist das **Tensorprodukt** der Hilberträume der Teilsysteme:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}. \quad (7.27)$$

Die Definition davon ist durch folgenden Satz gegeben:

Satz. Das Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ zweier Vektorräume, $\mathcal{H}^{(i)}$, ($i = 1, 2$), und eine Abbildung $\otimes : \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ sind (bis auf Isomorphie) durch folgende Eigenschaft bestimmt: Zu jeder Bilinearform $b : \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathbb{C}$ gibt es genau eine Linearform $l : \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$l(v^{(1)} \otimes v^{(2)}) = b(v^{(1)}, v^{(2)}), \quad (v^{(i)} \in \mathcal{H}^{(i)}), \quad \text{d.h.}$$

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} & \xrightarrow{b} & \mathbb{C} \\ \downarrow \otimes & \nearrow l & \\ \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} & & \end{array}$$

Sind $\mathcal{H}^{(i)}$ Hilberträume, so auch $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, und zwar mit Skalarprodukt bestimmt durch

$$(v^{(1)} \otimes v^{(2)}, w^{(1)} \otimes w^{(2)}) = (v^{(1)}, w^{(1)}) \cdot (v^{(2)}, w^{(2)}).$$

Die konkrete Herstellung des Tensorprodukts ist: Sind $\{e_m^{(i)}\}_{m=1}^{n_i}$, ($n_i = \dim \mathcal{H}^{(i)}$), Basen für $\mathcal{H}^{(i)}$, so ist die **Produktbasis**

$$\{e_{m_1}^{(1)} \otimes e_{m_2}^{(2)}\}_{m_1, m_2=1}^{n_1, n_2}$$

eine für $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$.

Eine Motivation des Postulats (7.27) ist: Der Raum der Zustände des zusammengesetzten Systems enthält solche die durch Angabe der Zustände der Teilsysteme gegeben sind, $\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}$, sowie auch deren linearen Superpositionen. Man beachte den Unterschied zu klassischen Systemen, wo es beim kartesischen Produkt $\Omega_1 \times \Omega_2$ der Zustandsräume der Teilsysteme bleibt. Der Unterschied ist weniger eklatant, wenn auf der klassischen Seite nicht Zustände, sondern Wahrscheinlichkeitsverteilungen über diesen herangezogen werden. Solche Verteilungen werden ebenfalls über das Tensorprodukt aus denjenigen der Teilsystemen erzeugt: $M(\Omega_1 \times \Omega_2) = M(\Omega_1) \otimes M(\Omega_2)$, wobei $M(\Omega)$ der Raum der Masse über Ω bezeichnet. (Diese Tatsache widerspiegelt sich in der Möglichkeit von Korrelationen zwischen den Teilsystemen.) In Anbetracht der probabilistischen Interpretation der Quantenmechanik ist letzterer Vergleich eher berechtigt.

7.5 Addition von Drehimpulsen

Drehungen eines zusammengesetzten Systems sind durch die **Tensorprodukt**darstellung

$$U(R) = U^{(1)}(R) \otimes U^{(2)}(R), \quad (R \in \text{SO}(3)) \quad (7.28)$$

gegeben, wobei das Tensorprodukt von Operatoren $A^{(i)}$ auf $\mathcal{H}^{(i)}$, ($i = 1, 2$), erklärt ist durch

$$(A^{(1)} \otimes A^{(2)})(\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}) = A^{(1)}\psi^{(1)} \otimes A^{(2)}\psi^{(2)}$$

auf $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$. Aus (7.15) folgt für die Drehimpulsoperatoren (7.17)

$$M_i = M_i^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes M_i^{(2)}, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (7.29)$$

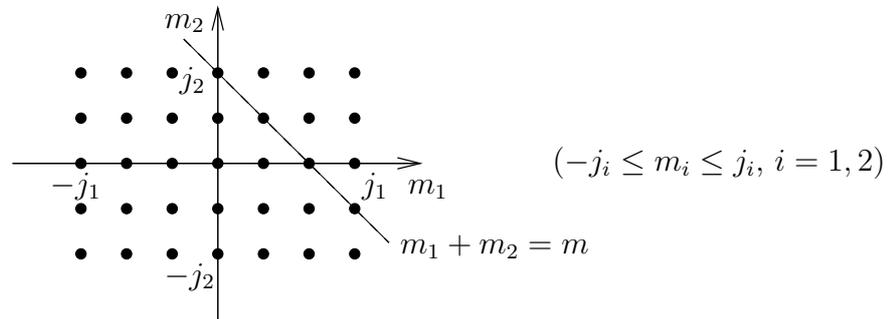
und dies soll auch die Definition des Produkts zweier Darstellungen der $\text{so}(3)$ sein, die nicht notwendigerweise von $\text{SO}(3)$ stammen.

Das Produkt von zwei irreduziblen Darstellungen \mathcal{D}_j zerfällt gemäss der **Clebsch-Gordan Reihe**

$$\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2} = \mathcal{D}_{j_1+j_2} \oplus \mathcal{D}_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus \mathcal{D}_{|j_1-j_2|}. \quad (7.30)$$

Beweis. Die Vektoren der Produktbasis sind Eigenvektoren von M_3 , vgl. (7.26, 7.29),

$$M_3|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle.$$



Aus der Figur ersieht man: Die Vielfachheiten des Eigenwertes $m = m_1 + m_2$ ist

$$\begin{aligned} \text{für } m = j_1 + j_2 & : 1 \\ \text{für } m = j_1 + j_2 - 1 & : 2 \\ \vdots & \vdots \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| & : 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| - 1 & : 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \vdots & \vdots \end{aligned}$$

falls $m \geq 0$ und gleich unter $m \rightarrow -m$. Daraus folgt: Keine irreduzible Darstellung \mathcal{D}_j mit $j > j_1 + j_2$ kommt in $\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2}$ vor; $\mathcal{D}_{j_1+j_2}$ kommt einmal vor und enthält je einen Eigenvektor mit Eigenwert mit $m = -j, \dots, j$. Der verbleibende Eigenvektor mit $m = j_1 + j_2 - 1$ bedingt eine Darstellung $\mathcal{D}_{j_1+j_2-1}$, und so weiter bis $\mathcal{D}_{|j_1-j_2|}$. \square

7.6 Die quantenmechanische Drehgruppe SU(2)

SU(2) ist die Gruppe der komplexen 2×2 -Matrizen V mit

$$V^*V = 1, \quad \det V = 1.$$

Infinitesimale Elemente

$$A = \left. \frac{dV(t)}{dt} \right|_{t=0} \quad (7.31)$$

($V(t)$ differenzierbar, $V(0) = 1$) sind komplexe Matrizen mit

$$A^* + A = 0, \quad \text{tr } A = 0,$$

(verwende $\log \det V(t) = \text{tr } \log V(t)$). Sie bilden die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2)$, versehen mit

$$[A_1, A_2] = A_1A_2 - A_2A_1,$$

vgl. (7.12). Wieder enthält sie nämlich mit A auch

$$A' = VAV^*, \quad (V \in \text{SU}(2)). \quad (7.32)$$

Die Elemente $A \in \mathfrak{su}(2)$ sind von der Form

$$A \equiv A(\vec{a}) = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_j a_j \equiv -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

($\vec{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$) mit **Pauli-Matrizen**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.33)$$

Insbesondere ist $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{su}(2) = 3$ und eine Basis ist

$$A_j = -i \frac{\sigma_j}{2}, \quad (j = 1, 2, 3).$$

Die Matrizen (7.33) erfüllen

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

($\varepsilon_{123} = +1$ und ε_{ijk} total antisymmetrisch), d.h.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathbb{1} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}). \quad (7.34)$$

Damit ist

$$[A(\vec{a}), A(\vec{b})] = A(\vec{a} \wedge \vec{b}), \quad (7.35)$$

bzw.

$$[A_1, A_2] = A_3 \quad (\text{und zyklisch}).$$

Die Lie-Algebren $\mathfrak{su}(2)$ und $\mathfrak{so}(3)$, s. (7.14), sind isomorph über

$$R : \mathfrak{su}(2) \rightarrow \mathfrak{so}(3), \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega}), \quad (7.36)$$

d.h. $A_j \mapsto \Omega_j$, ($j = 1, 2, 3$). Die Abbildung $R : A \mapsto \Omega$ ist durch

$$[A, A(\vec{a})] = A(\Omega\vec{a}) \quad (7.37)$$

charakterisiert, wie man mit $A = A(\vec{\omega})$, $\Omega = \Omega(\vec{\omega})$ aus (7.13, 7.35) sieht. Die irreduziblen Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ sind damit die \mathcal{D}_j aus dem Satz auf Seite 69.

Jede Darstellung $U(V)$ der $SU(2)$ liefert eine der $\mathfrak{su}(2)$ durch, vgl. (7.15, 7.16),

$$U(A) = \left. \frac{d}{dt} U(V(t)) \right|_{t=0} \quad (7.38)$$

mit a , $V(t)$ wie in (7.31). Diese bestimmt $U(V)$ wegen

$$U(e^{At}) = e^{U(A)t} .$$

Beispiele. 1. Die fundamentale Darstellung der $SU(2)$ ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ mit $U(V) = V$, bzw. $U(A) = A$. Sie ist irreduzibel, hat Dimension 2 und ist somit isomorph zu $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$.

2. Die adjungierte Darstellung der $SU(2)$ auf $\mathcal{H} = \mathfrak{su}(2)$ (oder $\mathcal{H} = \mathfrak{su}(2)_{\mathbb{C}}$) ist, s. (7.32),

$$U(V)A = VAV^{-1} , \quad (V \in SU(2)) .$$

Als Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$, $U(A)B = [A, B]$, ist sie wegen (7.35) isomorph zur fundamentalen Darstellung \mathcal{D}_1 der $\mathfrak{so}(3)$. Insbesondere hat sie Dimension 3.

Im Unterschied zum Fall von $SO(3)$ gilt hier auch die Umkehrung von (7.38):

Satz. Jeder Darstellung \mathcal{D}_j , ($j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$), der $\mathfrak{su}(2)$ entspricht eine, U_j , der $SU(2)$. Dabei gilt

$$U_j(-V) = (-1)^{2j} U_j(V) . \quad (7.39)$$

Beweis: induktiv nach j . Die Behauptung gilt für $j = 0, \frac{1}{2}$. Gilt sie für j , so ist $U(V) := U_j(V) \otimes V$ eine Darstellung auf $\mathcal{D}_j \otimes \mathcal{D}_{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}_{j-\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{D}_{j+\frac{1}{2}}$, s. (7.30), mit $U(-V) = (-1)^{2j+1} U(V)$. Dies gilt auch für die irreduzible Teildarstellung $\mathcal{D}_{j+\frac{1}{2}}$. \square

Nach dem Satz lässt sich die Darstellung (7.36) zu einer von $SU(2)$ heben. So erscheint $SO(3)$ als Darstellung der $SU(2)$:

$$R : SU(2) \rightarrow SO(3) , \quad V \mapsto R = R(V) \quad (7.40)$$

mit

$$V = e^{A(\vec{a})t} \mapsto R = e^{\Omega(\vec{a})t} . \quad (7.41)$$

Die Abbildung ist charakterisiert durch

$$VA(\vec{a})V^{-1} = A(R\vec{a}) , \quad (7.42)$$

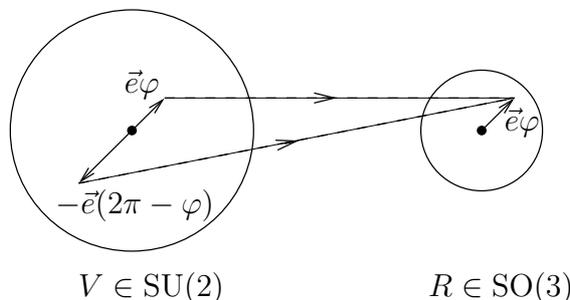
denn infinitesimal ist dies (7.37), vgl. Bsp. 2. Der Homomorphismus (7.40) ist surjektiv (da jedes $R \in SO(3)$ von der Form (7.41) ist), nicht aber injektiv, da

$$R(V) = R(-V) , \quad (7.43)$$

s. (7.42); ja es ist $VAV^{-1} = A$ für alle $A \in \mathfrak{su}(2)$ genau dann, wenn $V = \pm 1$. Also:

$$\mathrm{SO}(3) \cong \mathrm{SU}(2)/\{\pm 1\}. \quad (7.44)$$

Die Zuordnung (7.40) kann anhand zweier Vollkugeln der Radien 2π und π veranschaulicht werden:



- Durch $R = R(\vec{e}, \varphi) = e^{\Omega(\vec{e}\varphi)}$ ist jede Drehung eindeutig durch einen Punkt $\vec{e}\varphi$ der Vollkugel vom Radius π , $\{\vec{e}\varphi \mid |\vec{e}| = 1, 0 \leq \varphi \leq \pi\}$, gegeben, bis auf die Identifikation der Diametralpunkte $(\pm\vec{e}, \pi)$ wegen

$$R(\vec{e}, \varphi) = R(-\vec{e}, 2\pi - \varphi)$$

für $\varphi = \pi$. Insbesondere ist $\mathrm{SO}(3)$ nicht einfach zusammenhängend. Eine zweimal durchlaufene, nicht zusammenziehbare Schleife wird es aber. (Genauer: die 1. Homotopiegruppe ist $\pi_1(\mathrm{SO}(3)) = \mathbb{Z} \bmod 2$.)

- Wegen $(\vec{\sigma} \cdot \vec{e})^2 = 1$ für $|\vec{e}| = 1$ ist durch Summation der Exponentialreihe

$$e^{A(\vec{e}\varphi)} = e^{-\frac{i}{2}(\vec{\sigma} \cdot \vec{e})\varphi} = 1 \cos \frac{\varphi}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{e}) \sin \frac{\varphi}{2};$$

damit ist jedes $V = e^{A(\vec{a})} \in \mathrm{SU}(2)$ eindeutig durch einen Punkt $\vec{e}\varphi$ der Vollkugel vom Radius 2π gegeben, bis auf die Identifikation aller Punkte des Randes wegen $e^{A(2\pi\vec{e})} = -1$. Insbesondere ist $\mathrm{SU}(2)$ einfach zusammenhängend.

Bemerkung. Mit (7.43, 7.39) liefert jede Darstellung \mathcal{D}_j mit j halbzahlig, d.h. $j = 1/2, 3/2, \dots$, eine projektive Darstellung der $\mathrm{SO}(3)$. Umgekehrt sind die \mathcal{D}_j 's alle solche Darstellungen der $\mathrm{SO}(3)$, denn sie stiften ebensolche der $\mathrm{SU}(2)$, also nach dem Satz auf Seite 65 Darstellungen im engeren Sinn.

7.7 Der Spin des Elektrons

In einer Theorie ohne Spin wäre ein Atom mit festem Kern (bei $\vec{x} = 0$) und N Elektronen in einem äusseren homogenen Magnetfeld (in 3-Richtung $\vec{B} = B\vec{e}_3$) beschrieben durch

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} (\vec{p}_i - (e/c)\vec{A}(\vec{x}_i))^2 + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad \vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \wedge \vec{x}). \quad (7.45)$$

Hier ist m die Masse der Elektronen und V das Coulomb-Potential der Wechselwirkung der Elektronen zum Kern sowie untereinander. Es ist rotations-symmetrisch:

$$V(R\vec{x}_1, \dots, R\vec{x}_N) = V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad (R \in \mathrm{SO}(3)).$$

Behält man nur die in B linearen Glieder, so ist

$$(\vec{p} - (e/c)\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - (e/c)(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + (e/c)^2 \vec{A}^2 = \vec{p}^2 - \vec{B} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{p}) + O(B^2),$$

da $\vec{p} \cdot \vec{A} = (1/2)\varepsilon_{ijk}p_i B_j x_k = (1/2)\varepsilon_{ijk}B_j x_k p_i = \vec{A} \cdot \vec{p}$, und folglich

$$H = H_0 + \mu_B B M_3, \quad (\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = \text{Bohrsches Magneton}), \quad (7.46)$$

wobei H_0 das ungestörte Atom beschreibt und

$$\sum_{i=1}^N \vec{x}_i \wedge \vec{p}_i = \vec{L} =: \hbar \vec{M}$$

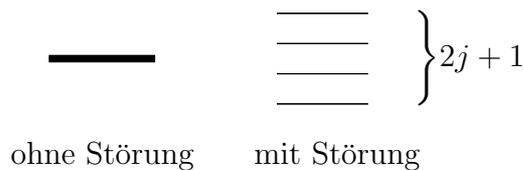
der Gesamtdrehimpuls ist. Im Unterschied zu H ist H_0 invariant unter Drehungen

$$(U_0(R)\psi)(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \psi(R\vec{x}_1, \dots, R\vec{x}_N), \quad (R \in \text{SO}(3)).$$

Sei E_0 ein endlich entarteter Eigenwert von H_0 . Der zugehörige Eigenraum ist ebenfalls invariant unter U_0 und trägt somit eine Darstellung der $\text{SO}(3)$. In der Regel ist diese irreduzibel, denn die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen heben allfällige Entartungen zwischen verschiedenen Darstellungen auf, so wie beim He-Atom, vgl. Seite ???. Jeder solche "einfache Term" E_0 von H_0 trägt eine Drehimpulsquantenzahl $j = 0, 1, \dots$ und die natürliche Vielfachheit $2j + 1$. Diese Entartung kann erst durch eine nicht rotationssymmetrische Störung des Hamiltonoperators aufgehoben werden, wie z.B. jene in (7.46). In diesem Fall ist

$$H_0|j, m\rangle = (E_0 + \mu_B B m)|j, m\rangle, \quad (m = j, \dots, -j), \quad (7.47)$$

wobei $|j, m\rangle$ die durch \mathcal{D}_j gestiftete Basis des Eigenraums von E_0 ist. Demnach wäre die Aufspaltung $\Delta E_m = \mu_B B m$ proportional zu B und ansonsten universell, d.h. unabhängig von N und E_0 .



Aus der Beobachtung der Spektren (**Zeeman-Effekt**) findet man hingegen

- $2j + 1$ gerade, also j halbganz, für N ungerade;
- die Aufspaltung ist nicht universell.

Die theoretische Möglichkeit, dass die Drehimpulsquantenzahl j eines System halbzahlig ist, wird offenbar durch das Elektron verwirklicht. Zu ihrer Implementierung soll der Hilbertraum eines einzelnen Elektrons nicht $L^2(\mathbb{R}^3)$, sondern (Pauli 1927)

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

sein. Darauf wirkt $V \in \text{SU}(2)$ gemäss

$$U(V) = U_0(R(V)) \otimes V ,$$

wobei $U_0(R)$ die Darstellung von $R \in \text{SO}(3)$, s. (7.10), in der Theorie ohne Spin ist und $R(V)$ der Abbildung (7.40) entspricht. Der Freiheitsgrad mit Hilbertraum \mathbb{C}^2 und Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ heisst **Spin**

$$\vec{S} = \hbar \vec{M} \quad (7.48)$$

des Elektrons. In der (fundamentalen) Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ ist $M_j = iU(A_j)$ gegeben durch

$$M_j = \frac{\sigma_j}{2} .$$

Damit ist

$$M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und die Basis (7.26) ist gerade die Standardbasis für \mathbb{C}^2 ,

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\vec{e}_3\rangle , \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |-\vec{e}_3\rangle : \quad (7.49)$$

Spin nach oben, bzw. unten bezüglich der Quantisierungsrichtung \vec{e}_3 . Eigenbasen für M_1 bzw. M_2 sind

$$\begin{aligned} M_1 : \quad |\vec{e}_1\rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} , & |-\vec{e}_1\rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \\ M_2 : \quad |\vec{e}_2\rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} , & |-\vec{e}_2\rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Der **Gesamtdrehimpuls** des Elektrons ist nun, vgl. (7.29),

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{S} , \quad (7.50)$$

wobei $\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$ neu als Bahndrehimpuls bezeichnet wird.

Für die Zustände $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ gibt es verschiedene Schreibweisen. In der Spinorschreibweise wird $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^2$, $\vec{x} \mapsto \psi(\vec{x})$ aufgefasst als 2-komponentige Wellenfunktion von \vec{x} mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int d^3x (\psi(\vec{x}), \varphi(\vec{x}))_{\mathbb{C}^2} .$$

In der Basis (7.49) wird man also $\psi(\vec{x})$ darstellen durch den Spaltenvektor

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\vec{x}) \\ \psi_{-1/2}(\vec{x}) \end{pmatrix} , \quad \text{bzw.} \quad \psi(\vec{x}) = \psi_{+1/2}(\vec{x}) |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \psi_{-1/2}(\vec{x}) |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle ,$$

auf den die Spinoperatoren in offensichtlicher Weise wirken. Alternativ lässt sich ψ auffassen als komplexe Funktion von zwei Variablen \vec{x}, s :

$$\psi : \mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\} \rightarrow \mathbb{C} , \quad (\vec{x}, s) \mapsto \psi(\vec{x}, s) ,$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{s=\pm 1/2} \int d^3x \overline{\psi(\vec{x}, s)} \varphi(\vec{x}, s) .$$

Der Zusammenhang mit der Spinorschreibweise ist $\psi(\vec{x}, s) = \psi_s(\vec{x})$, und die Bedeutung der Spinvariablen s erhellt aus

$$(S_3\psi)(\vec{x}, s) = \hbar s \psi(\vec{x}, s) .$$

Zur Beschreibung der Zustände mehrerer Elektronen wird sich diese zweite Form besser eignen.

A Anhang: Selbstadjungierte Operatoren

1. Grundlagen

- Hilbertraum \mathcal{H} über \mathbb{C} mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) ; Norm $\|u\| := (u, u)^{1/2}$.

Konvergenzbegriffe in \mathcal{H} :

— Normkonvergenz:

$$u_n \rightarrow u, \quad \text{d.h.} \quad \|u_n - u\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

— schwache Konvergenz:

$$u_n \xrightarrow{w} u, \quad \text{d.h.} \quad (v, u_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} (v, u), \quad (\forall v \in \mathcal{H}).$$

Es gilt:

$$u_n \xrightarrow{w} u, \quad \|u_n\| \rightarrow \|u\| \quad \Rightarrow \quad u_n \rightarrow u. \quad (\text{A.1})$$

- Beschränkte Operatoren, $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$:

$$B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad u \mapsto Bu, \quad \text{linear}$$

mit $\|Bu\| \leq C\|u\|$ für ein $C \geq 0$; $\|B\| :=$ kleinstes solches C .

Konvergenzbegriffe in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

— Normkonvergenz:

$$B_n \rightarrow B, \quad \text{d.h.} \quad \|B_n - B\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

— starke Konvergenz:

$$B_n \xrightarrow{s} B, \quad \text{d.h.} \quad B_n u \rightarrow Bu, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

— schwache Konvergenz:

$$B_n \xrightarrow{w} B, \quad \text{d.h.} \quad B_n u \xrightarrow{w} Bu, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

Es gilt, s. (A.1):

$$B_n \xrightarrow{w} B, \quad \|B_n u\| \rightarrow \|Bu\| \quad (\forall u \in \mathcal{H}) \quad \Rightarrow \quad B_n \xrightarrow{s} B. \quad (\text{A.2})$$

- Satz von Riesz: Sei $D \subset \mathcal{H}$ ein dichter Teilraum, d.h. $\overline{D} = \mathcal{H}$ (\overline{D} : Normabschluss von D). Zu jeder beschränkten Linearform l auf D ,

$$l : D \rightarrow \mathbb{C}, \quad v \mapsto l(v), \quad \text{linear} \\ |l(v)| \leq C\|v\|,$$

gehört ein eindeutiges $u \in \mathcal{H}$, sodass

$$l(v) = (u, v). \quad (\text{A.3})$$

Anwendung: Ebenso gehört zu jeder Sesquilinearform b auf D ,

$$b : D \times D \rightarrow \mathbb{C}, \quad (u, v) \mapsto b(u, v), \quad \begin{array}{l} \text{linear in } v \\ \text{antilinear in } u \end{array} \\ |b(u, v)| \leq C\|u\|\|v\|,$$

ein eindeutiges $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, sodass

$$b(u, v) = (u, Bv) . \quad (\text{A.4})$$

Bemerkungen. 1) b , und somit B , ist durch $b(u, u)$ über die Polarisationsidentität bestimmt:

$$b(u, v) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^{-k} b(u + i^k v, u + i^k v) . \quad (\text{A.5})$$

2) Ist $b(u, u) \geq 0$, ($\forall u \in \mathcal{H}$), so gilt die Cauchy Ungleichung

$$|b(u, v)|^2 \leq b(u, u) \cdot b(v, v) .$$

2. Unbeschränkte Operatoren

Definition. Ein Operator A auf \mathcal{H} ist eine lineare Abbildung

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H} \supset D(A) & \longrightarrow & R(A) \subset \mathcal{H} , \quad u \mapsto Au \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{Teilraum} & & \text{Teilraum} \\ \text{Definitionsbereich} & & \text{Wertebereich} \\ \text{von } A \text{ (domain)} & & \text{von } A \text{ (range)} \end{array}$$

Regeln.

$$\begin{aligned} A = B & : D(A) = D(B) \text{ und } Au = Bu, (\forall u \in D(A)) \\ A \subset B & : D(A) \subset D(B) \quad \text{''} \quad \text{''} \quad \text{''} \\ & (B \text{ heisst Fortsetzung von } A) \\ D(A + B) & = D(A) \cap D(B) \text{ und } (A + B)u = Au + Bu \\ D(AB) & = \{u \in D(B) \mid Bu \in D(A)\} \text{ und } (AB)u = A(Bu) \\ A^{-1} \text{ existiert} & : A \text{ ist injektiv, } D(A^{-1}) = R(A), R(A^{-1}) = D(A) \end{aligned}$$

Der Nullraum von A ist $N(A) = \{u \in D(A) \mid Au = 0\}$.

$$A \text{ injektiv} \Leftrightarrow N(A) = \{0\} .$$

Definition. Sei A ein Operator. Falls

$$\left. \begin{array}{l} u_n \in D(A) \\ u_n \rightarrow 0 \\ Au_n \rightarrow v \end{array} \right\} \Rightarrow v = 0 , \quad (\text{A.6})$$

so heisst A **abschliessbar**; dann ist der **Abschluss** $\bar{A} (\supset A)$ definiert durch

$$\left. \begin{array}{l} u_n \in D(A) \\ u_n \rightarrow u \\ Au_n \rightarrow v \end{array} \right\} \Rightarrow: u \in D(\bar{A}) , \quad \bar{A}u = v , \quad (\text{A.7})$$

wobei (A.6) die Eindeutigkeit von v in (A.7) sichert. A heisst **abgeschlossen**, falls $\overline{A} = A$, d.h. falls die linke Seite von (A.7) $u \in D(A)$, $Au = v$ impliziert.

Lemma 1. Sei $A^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ (d.h. $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ ist injektiv und surjektiv, ferner A^{-1} beschränkt). Dann ist $A = \overline{A}$.

Beweis. Aus $u_n \in D(A)$, $u_n \rightarrow u$, $Au_n \rightarrow v$ folgt $u_n \rightarrow A^{-1}v = u$. □

Definition. Die **Resolventenmenge** $\rho(A)$ von A ist

$$\rho(A) := \{z \in \mathbb{C} \mid (z - A)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})\}, \quad (\text{A.8})$$

d.h. $z \in \rho(A)$ gdf $N(z - A) = \{0\}$, $R(z - A) = \mathcal{H}$ und die **Resolvente** $(z - A)^{-1}$ beschränkt ist.

Falls es **ein** solches z gibt, ist nach dem Lemma $z - A$ und somit auch A **abgeschlossen**.

Das **Spektrum** von A ist

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A). \quad (\text{A.9})$$

$\rho(A)$ ist eine offene Menge (ohne Beweis), $\sigma(A)$ also eine abgeschlossene.

Für $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ ist

$$(z_1 - A)^{-1} - (z_2 - A)^{-1} = (z_2 - z_1)(z_1 - A)^{-1}(z_2 - A)^{-1},$$

insbesondere kommutieren die Resolventen von A .

Definition. Sei A ein **dicht definierter** Operator, d.h. $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$. Die **Adjungierte** A^* von A ist dann wie folgt definiert: $u \in D(A^*)$, falls

$$|(u, Av)| \leq C\|v\|, \quad (\forall v \in D(A));$$

dann ist die Linearform $v \mapsto (u, Av)$ auf $D(A)$ beschränkt, nach (A.3) also

$$(u, Av) = (w, v)$$

für ein durch u eindeutig bestimmtes $w \in \mathcal{H}$:

$$A^*u := w.$$

Offensichtlich ist A^* ein linearer Operator auf \mathcal{H} .

Bemerkung. Für $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gilt: $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $\|A^*\| = \|A\|$; $(\lambda A)^* = \bar{\lambda}A^*$, $(\lambda \in \mathbb{C})$; $(A + B)^* = A^* + B^*$; $(AB)^* = B^*A^*$; $A^{**} = A$.

Allgemein gilt für ein dicht definierter Operator A :

Lemma 2. i) A^* ist abgeschlossen.

ii) A^* ist dicht definiert gdf A abschliessbar ist; dann ist $A^{**} = \overline{A}$.

iii) $N(A^*) = R(A)^\perp$.

iv) Falls $A^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, so auch $(A^*)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$.

v) Ist A abgeschlossen, so gilt $\rho(A^*) = \overline{\rho(A)}$ (komplexe Konjugation).

Beweis. Nur iii): Für $u \in D(A^*)$ ist

$$(u, Av) = (A^*u, v), \quad (\forall v \in D(A)). \quad (\text{A.10})$$

Dies verschwindet, falls $u \in N(A^*)$, also $u \in R(A)^\perp$. Umgekehrt folgt daraus $u \in D(A^*)$, dann $u \in N(A^*)$ aus (A.10). \square

Definition. Sei A dicht definiert.

a) A heisst **symmetrisch**, falls

$$(u, Av) = (Au, v), \quad (\forall u, v \in D(A)),$$

oder, je gleichbedeutend,

$$(u, Au) \in \mathbb{R}, \quad (\forall u \in D(A)), \quad (\text{A.11})$$

s. (A.5), bzw.

$$A \subset A^*. \quad (\text{A.12})$$

b) A heisst **selbstadjungiert**, falls

$$A = A^*.$$

Die Unterscheidung zwischen a), b) entfällt für beschränkte Operatoren (also überhaupt, falls $\dim \mathcal{H} < \infty$), ist aber für $\dim \mathcal{H} = \infty$ echt, selbst für abgeschlossene A .

Als Vorbereitung für ein Beispiel benötigen wir:

Lemma 3. Für $\psi \in L^2[0, 1]$ sei $d\psi/dx$ als Distribution definiert,

$$\frac{d\psi}{dx}[v] = -\psi\left[\frac{dv}{dx}\right], \quad (\forall v \in C_0^\infty(0, 1)).$$

Falls $d\psi/dx \in L^2[0, 1]$, so ist $\psi(x)$ stetig (d.h. ψ kann dann als stetige Funktion gewählt werden). Gilt auch $d\varphi/dx \in L^2[0, 1]$, so

$$\int_0^1 \left(\frac{d\psi}{dx} \varphi(x) + \psi(x) \frac{d\varphi}{dx} \right) dx = \psi(x)\varphi(x) \Big|_0^1.$$

Beweisskizze. i) Ist $d\psi/dx = 0$, so ist $\psi(x)$ konstant.

ii) $\tilde{\psi}(x) := \int_0^x \frac{d\psi}{dx'} dx'$ ist wohldefiniert (da $\int_0^x \left| \frac{d\psi}{dx'} \right| dx' \leq \left(\int_0^x \left| \frac{d\psi}{dx'} \right|^2 dx' \right)^{1/2} \left(\int_0^x 1 dx' \right)^{1/2}$) und stetig; ferner als Distribution $d\tilde{\psi}/dx = d\psi/dx$.

i), ii) zusammen: $\psi = \tilde{\psi} + \text{konst.}$ \square

Beispiel. Sei $\mathcal{H} = L^2[0, 1]$.

a) Die Operatoren \tilde{p} , p sind dicht definiert als

$$\begin{aligned} D(\tilde{p}) &= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \frac{d\psi}{dx} \in L^2[0, 1] \right\}, & \tilde{p}\psi &= -i \frac{d\psi}{dx}, \\ D(p) &= \left\{ \psi \in D(\tilde{p}) \mid \psi(0) = 0 = \psi(1) \right\}, & p\psi &= \tilde{p}\psi. \end{aligned}$$

Offenbar ist

$$p \subsetneq \tilde{p}.$$

Behauptung. i) \tilde{p} ist abgeschlossen; ii) $\tilde{p}^* = p$. Also ist p abgeschlossen (s. Lemma 2i)) und symmetrisch, da

$$p \subset \tilde{p} = \bar{\tilde{p}} = p^*$$

(s. Lemma 2ii)), nicht aber selbstadjungiert.

Beweis. i) aus $\psi_n \in D(\tilde{p})$, $\psi_n \rightarrow \psi$, $\tilde{p}\psi_n \rightarrow \varphi$ folgt für jede Testfunktion $v \in C_0^\infty(0, 1)$

$$(v, \varphi) = \lim_n -i \underbrace{\left(v, \frac{d\psi_n}{dx}\right)}_{\frac{d\psi_n}{dx}[\bar{v}] = -\psi_n[\frac{d\bar{v}}{dx}]} = \lim_n i \left(\frac{dv}{dx}, \psi_n\right) = i \underbrace{\left(\frac{dv}{dx}, \psi\right)}_{-\frac{d\psi}{dx}[\bar{v}]},$$

also $-id\psi/dx = \varphi \in L^2[0, 1]$ und damit $\psi \in D(\tilde{p})$, $\tilde{p}\psi = \varphi$.

ii) $\varphi \in D(\tilde{p}^*)$ bedeutet

$$|(\tilde{p}\psi, \varphi)| \leq C\|\psi\|, \quad (\forall \psi \in D(\tilde{p})) \quad (\text{A.13})$$

und insbesondere

$$\left|\frac{d\varphi}{dx}[\bar{v}]\right| \leq C\|v\|, \quad (\forall v \in C_0^\infty(0, 1)), \quad (\text{A.14})$$

also $d\varphi/dx \in L^2(0, 1)$, s. (A.3), d.h. $\varphi \in D(\tilde{p})$. Zudem ist für $\psi \in D(\tilde{p})$

$$\begin{aligned} (\tilde{p}\psi, \varphi) - (\psi, \tilde{p}\varphi) &= i \int_0^1 \left(\frac{d\bar{\psi}}{dx} \varphi(x) + \bar{\psi}(x) \frac{d\varphi}{dx} \right) dx \\ &= \bar{\psi}(1)\varphi(1) - \bar{\psi}(0)\varphi(0). \end{aligned}$$

Hier ist $|(\psi, \tilde{p}\varphi)|/\|\psi\|$ ($\leq \|\tilde{p}\varphi\|$) beschränkt, nicht aber $\psi(0)/\|\psi\|$, $\psi(1)/\|\psi\|$, die unabhängig voneinander durch Wahl von ψ gross gemacht werden können. Also gilt (A.13) gdf $\varphi(0) = 0 = \varphi(1)$, d.h. falls $\varphi \in D(p)$; dann ist auch $\tilde{p}^*\varphi = \tilde{p}\varphi = p\varphi$.

b) Sei $\alpha \in \mathbb{C}$ mit $|\alpha| = 1$ fest gewählt und p_α dicht definiert durch

$$D(p_\alpha) = \{\psi \in D(\tilde{p}) \mid \psi(1) = \alpha\psi(0)\}, \quad p_\alpha\psi = \tilde{p}\psi.$$

Ebenfalls ist $p_\alpha \subset \tilde{p}$.

Behauptung. $p_\alpha^* = p_\alpha$.

Beweis. $\varphi \in D(p_\alpha^*)$ impliziert wie in (A.14) $\varphi \in D(\tilde{p})$, ferner für $\psi \in D(p_\alpha)$

$$(p_\alpha\psi, \varphi) - (\psi, \tilde{p}\varphi) = \bar{\psi}(0)(\bar{\alpha}\varphi(1) - \varphi(0)) = \bar{\alpha}\bar{\psi}(0)(\varphi(1) - \alpha\varphi(0)).$$

Nun ist $\varphi \in D(p_\alpha^*)$ äquivalent zu $\varphi \in D(\tilde{p})$, $\varphi(1) = \alpha\varphi(0)$, also zu $\varphi \in D(p_\alpha)$; dann ist auch $p_\alpha^*\varphi = \tilde{p}\varphi = p_\alpha\varphi$.

Satz 3. Sei A ein symmetrischer Operator. Dann sind äquivalent:

- a) $A^* = A$
- b) $\sigma(A)$ ist reell

- c) $R(z - A) = \mathcal{H}$ für alle z mit $\text{Im } z \neq 0$ (oder, äquivalent, für $z = \pm i$)
d) A ist abgeschlossen und $N(z - A^*) = \{0\}$ für alle z mit $\text{Im } z \neq 0$ (oder $z = \pm i$).

Beweis. Wegen (A.11) ist für $u \in D(A)$

$$|\text{Im } z| \|u\|^2 = |\text{Im } (u, (z - A)u)| \leq \|u\| \|(z - A)u\| ,$$

also

$$\|(z - A)u\| \geq |\text{Im } z| \|u\| , \quad (\forall u \in D(A)) . \quad (\text{A.15})$$

Insbesondere ist $N(z - A) = \{0\}$ für $\text{Im } z \neq 0$.

i) Wäre $R(z - A) = \mathcal{H}$ für ein $\text{Im } z \neq 0$, so wäre nach (A.15) $z \in \rho(A)$; nach Lemma 1 $z - A$ und damit A abgeschlossen.

ii) Wäre A abgeschlossen, so wäre es $R(z - A)$, ($\text{Im } z \neq 0$), auch. Denn: $(z - A)u_n \rightarrow v$ mit $u_n \in D(A)$ impliziert nach (A.15), dass u_n Cauchy ist, also $u_n \rightarrow u$, und wir schliessen $u \in D(A)$, $(z - A)u = v$.

Daraus, aus Lemma 2iii) und aus $M^{\perp\perp} = \overline{M}$ folgt (c) \Leftrightarrow (d). Die restlichen Äquivalenzen beweisen wir über (a) \Rightarrow (c/d, "alle") \Rightarrow (b) \Rightarrow (c/d, " $\pm i$ ") \Rightarrow (a). Die Implikation (c) \Rightarrow (b) folgt aus (i), (b) \Rightarrow (c) aus der Definition von $\sigma(A)$.

(a) \Rightarrow (d): A ist abgeschlossen nach Lemma 2i). Zudem ist $N(z - A^*) = N(z - A) = \{0\}$, ($\text{Im } z \neq 0$) nach (A.15).

(c und d) \Rightarrow (a): Wegen (A.12) genügt es, $D(A^*) \subset D(A)$ zu zeigen. Sei $u \in D(A^*)$. Wegen (c) gibt es $v \in D(A)$, sodass $(i - A^*)u = (i - A)v = (i - A^*)v$, also $(i - A^*)(u - v) = 0$; wegen (d) ist $u = v \in D(A)$. \square

3. Projektionswertige Masse

Definition. Ein **projektionswertiges Mass** (P -Mass) E auf \mathbb{R} ist ein $*$ -Homomorphismus $C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $f \mapsto E(f)$, d.h.

$$E(\alpha f + \beta g) = \alpha E(f) + \beta E(g) , \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C}) , \quad (\text{A.16})$$

$$E(fg) = E(f)E(g) , \quad (\text{A.17})$$

$$E(f)^* = E(\bar{f}) . \quad (\text{A.18})$$

Ist zudem

$$\{E(f)u \mid f \in C_0^\infty(\mathbb{R}), u \in \mathcal{H}\} \quad (\text{A.19})$$

dicht in \mathcal{H} , so ist E ein **Spektralmaß**.

Wir werden E auf sukzessiv grössere Funktionenklassen fortsetzen, die schliesslich die charakteristischen Funktionen χ_M gewisser Mengen $M \subset \mathbb{R}$ umfassen. Dann wird $E_M := E(\chi_M)$ ein orthogonaler Projektor, vgl. (A.17, A.18), sein mit

$$E_{M_1}E_{M_2} = 0 , \quad E_{M_1 \cup M_2} = E_{M_1} + E_{M_2} , \quad (M_1 \cap M_2 = \emptyset) . \quad (\text{A.20})$$

Dies erklärt den Namen " P -Mass". Da die Fortsetzungen eindeutig sein werden, nennen wir sie immer noch E .

Sei

$$C_\infty(\mathbb{R}) = \{f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ stetig mit } \lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0\} .$$

Beachte, dass $C_\infty(\mathbb{R})$ der Abschluss von $C_0^\infty(\mathbb{R})$ in der Norm

$$\|f\|_\infty = \sup\{|f(x)| \mid x \in \mathbb{R}\}$$

ist.

Lemma 4. Sei $E : C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ein P -Mass. Dann gilt

$$\|E(f)\| \leq \|f\|_\infty . \quad (\text{A.21})$$

Es hat deshalb eine eindeutige, stetige Fortsetzung zu $E : C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Diese erfüllt wieder (A.16–A.18, A.21), sowie

$$E(f) \geq 0, \quad (f \geq 0) . \quad (\text{A.22})$$

Beweis. (A.21): Wegen $E(\alpha f) = \alpha E(f)$ genügt es zu zeigen, dass $\|E(f)\| \leq 1$ für $\|f\|_\infty < 1$. Dann ist $g = f\sqrt{1-|f|^2} \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, also

$$\begin{aligned} 0 \leq E(g)^* E(g) &= E(|g|^2) = E(|f|^2) - E(|f|^4), \\ E(|f|^2) &\geq E(|f|^4) = E(|f|^2)^* E(|f|^2) \geq 0 . \end{aligned}$$

Mit $\|B\| = \sup_{\|u\|=1} (u, Bu)$ für $B \geq 0$ folgt

$$\|E(|f|^2)\| \geq \|E(|f|^4)\| , \quad (\text{A.23})$$

und mit $\|B^*B\| = \|B\|^2$ auch noch

$$\begin{aligned} \|E(|f|^2)\| &= \|E(f)^* E(f)\| = \|E(f)\|^2 , \\ \|E(|f|^4)\| &= \|E(|f|^2)\|^2 = \|E(f)\|^4 , \end{aligned}$$

sodass $\|E(f)\| \leq 1$ nach (A.23).

(A.22): Für $f \geq 0$, $f \in C_\infty(\mathbb{R})$ ist auch $\sqrt{f} \in C_\infty(\mathbb{R})$, also $E(f) = E(\sqrt{f})^* E(\sqrt{f}) \geq 0$. \square

Borel-Funktionen auf \mathbb{R} . Für beliebige Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ schreiben wir

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x) \quad (\text{A.24})$$

für den punktweisen Limes. Falls f_n beschränkte Funktionen sind mit $\sup_n \|f_n\| \leq C < \infty$, so schreiben wir statt (A.24) auch

$$\text{p-}\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x) ,$$

(dann ist $\|f\|_\infty \leq C$).

Definition. Die Klasse $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ der Borel-Funktionen auf \mathbb{R} ist die kleinste Funktionenklasse \mathcal{F} mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad & C_\infty(\mathbb{R}) \subset \mathcal{F} , \\ (\text{b}) \quad & \text{Aus } f_n \in \mathcal{F} \text{ und } f_n \rightarrow f \text{ folgt } f \in \mathcal{F} . \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Ersetzt man $f_n \rightarrow f$ durch $f_n \xrightarrow{p} f$, so erhält man die Klasse der beschränkten Borel-Funktionen $\mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) = \{f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}) \mid \|f\|_\infty < \infty\}$.

Lemma 5. *Jede konstante Funktion $f(x) = c$ gehört zu $\mathcal{B} = \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $\mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$. Mit f, g sind auch $f + g$, fg und \bar{f} in \mathcal{B} : \mathcal{B} ist eine Funktionenalgebra mit Einselement und komplexer Konjugation.*

Beweis. Nur $fg \in \mathcal{B}$: Sei $g \in C_\infty(\mathbb{R})$ fest. Die Klasse \mathcal{F} aller f mit $fg \in \mathcal{B}$ erfüllt (A.25), umfasst also \mathcal{B} . Nun sei $f \in \mathcal{B}$ fest. Die Klasse \mathcal{F} aller g mit $fg \in \mathcal{B}$ erfüllt wieder (A.25), also ist $fg \in \mathcal{B}$ für $f, g \in \mathcal{B}$.

Definition. $M \subset \mathbb{R}$ heisst **Borel-Menge**, falls $\chi_M \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Lemma 6. *Borel-Mengen sind*

- das Komplement jeder Borel-Menge.
 - die Vereinigung und der Durchschnitt abzählbar vieler Borelmengen.
 - jede offene und jede abgeschlossene Menge.
- (ohne Beweis).

Integrale. Ein **Integral** auf \mathbb{R} ist ein positives lineares Funktional $C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$:

$$I(f) \geq 0, \quad (f \geq 0).$$

Satz 7. *Jedes Integral I mit*

$$I(f) \leq \|f\|_\infty \tag{A.26}$$

hat eindeutige (lineare, positive) Fortsetzungen auf

(i) $I : \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$ mit der Eigenschaft (A.26) und

$$I(f_n) \rightarrow I(f), \quad (f_n \xrightarrow{p} f), \tag{A.27}$$

sowie weitergehend auf

- (ii) • alle $g \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $g \geq 0$, wobei $0 \leq I(g) \leq \infty$,*
• alle $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ mit $I(|f|) < \infty$, wobei $I(f) \in \mathbb{C}$ mit der Eigenschaft (dominierte Konvergenz)

$$I(f_n) \rightarrow I(f), \tag{A.28}$$

falls $f_n \rightarrow f$ mit $|f_n| \leq g$, $I(g) < \infty$.

Dies ist der Satz von Riesz-Markov. Man schreibt auch

$$I(f) = \int f(\lambda) d\mu(\lambda), \tag{A.29}$$

wobei μ das entsprechende Borel-Mass ist: $\mu(M) = I(\chi_M)$, (M Borel-Menge).

Satz 8. *Jedes P-Mass $E : C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ hat eine eindeutige Fortsetzung $E : \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit (A.16–A.18, A.21, A.22) und*

$$E(f_n) \xrightarrow{s} E(f), \quad (f_n \xrightarrow{p} f). \tag{A.30}$$

Beweis. Eindeutigkeit: Seien E_1, E_2 solche Fortsetzungen mit $\mathcal{F} = \{f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \mid E_1(f) = E_2(f)\}$. Da \mathcal{F} (A.25) erfüllt, ist $\mathcal{F} = \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$.

Existenz: Für jedes $u \in \mathcal{H}$ ist

$$I_u(f) := (u, E(f)u) \quad (\text{A.31})$$

ein Integral mit $|I_u(f)| \leq \|u\|^2 \|f\|_\infty$, das nach Satz 7 eine Fortsetzung auf $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ hat. Die Sesquilinearform

$$b_f(u, v) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^{-k} I_{u+i^k v}(f), \quad (f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})), \quad (\text{A.32})$$

erfüllt $b_f(u, v) = (u, E(f)v)$ für $f \in C_\infty(\mathbb{R})$, s. (A.5). Die Klasse aller $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, für welche b_f eine beschränkte Sesquilinearform (mit Norm $\|f\|_\infty$) ist, erfüllt (A.25) wegen (A.27). Somit ist $E(f) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ durch $(u, E(f)v) = b_f(u, v)$ definiert für alle $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, vgl. (A.4). Ferner ist nach (A.27)

$$(u, E(f_n)v) \rightarrow (u, E(f)v), \quad (f_n \xrightarrow{p} f), \quad (\text{A.33})$$

d.h. $E(f_n) \xrightarrow{w} E(f)$. Damit zeigt man die Eigenschaften (A.16–A.18), etwa (A.17) nach dem Muster des Beweises von Lemma 5. Aus (A.33) folgt deshalb

$$\|E(f_n)v\|^2 = (v, E(|f_n|^2)v) \rightarrow (v, E(|f|^2)v) = \|E(f)v\|^2,$$

mit (A.2), also $E(f_n) \xrightarrow{s} E(f)$. □

Korollar. Durch $E_M = E(\chi_M)$ ist für jede Borel-Menge $M \subset \mathbb{R}$ ein Projektor $E_M = E_M^2 = E_M^*$ erklärt mit den Eigenschaften (A.20). Ausserdem gilt für jede Folge M_n von Borel-Mengen

$$\begin{aligned} E_{M_1 \cap M_2 \cap \dots} &= s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} E_{M_1 \cap M_2 \cap \dots \cap M_n}, \\ E_{M_1 \cup M_2 \cup \dots} &= s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} E_{M_1 \cup M_2 \cup \dots \cup M_n}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Bemerkung. In der Schreibweise (A.29) lautet (A.31) $I_u(f) = \int f(\lambda) d\mu_u(\lambda)$ mit $\mu_u(M) = (u, E_M u)$. Man schreibt deshalb auch

$$E(f) := \int f(\lambda) dE(\lambda). \quad (\text{A.35})$$

Definition. Der **Träger** $\text{supp } E$ eines P -Masses E ist

$$x \in \text{supp } E \Leftrightarrow E_M \neq 0 \text{ für jede offene Menge } M \ni x.$$

Lemma 9. $\text{supp } E$ ist abgeschlossen und

$$E_{\mathbb{R} \setminus \text{supp } E} = 0. \quad (\text{A.36})$$

Für jede stetige, beschränkte Funktion f ist

$$\|E(f)\| = \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)|. \quad (\text{A.37})$$

Beweis. $x \notin \text{supp } E$ gdf $E_M = 0$ für eine offene Umgebung $M \ni x$. Damit ist $\mathbb{R} \setminus \text{supp } E$ offen und $E_K = 0$ für jede kompakte Menge $K \subset \mathbb{R} \setminus \text{supp } E$. Wegen $\mathbb{R} \setminus \text{supp } E = \bigcup_{n=1}^{\infty} K_n$ mit $K_n = \{x \in \mathbb{R} \mid |x| \leq n, \text{dist}(x, \text{supp } E) \geq 1/n\}$ folgt (A.36) aus (A.34).

Sei $\chi = \chi_{\text{supp } E}$. Nach (A.36) ist $E(1 - \chi) = 0$, also

$$\|E(f)\| = \|E(\chi f)\| \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |\chi(x)f(x)| = \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)| \quad (\text{A.38})$$

für alle $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, s. (A.21). Ist f stetig und $c < \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)|$, so enthält $M = \{x \mid |f(x)| > c\}$ auch ein $\lambda \in \text{supp } E$. Da M offen ist, ist $E_M \neq 0$, also gibt es ein $u \in \mathcal{H}$, ($\|u\| = 1$), mit $u = E_M u$. Für dieses ist

$$\|E(f)u\|^2 = (u, E(|f|^2 \chi_M)u) \geq c^2 (u, E(\chi_M)u) = c^2 \|u\|^2,$$

also $c \leq \|E(f)\|$, womit die zu (A.38) umgekehrte Ungleichung auch gilt. \square

Im Anschluss an Satz 8 erlaubt die Zusatzeigenschaft (A.19) eines Spektralmasses eine weitere Formulierung:

Lemma 10. *Der Teilraum (A.19) ist dicht in \mathcal{H} genau dann, falls $E(1) = \mathbf{1}$, (d.h. $E_{\mathbb{R}} = \mathbf{1}$).*

Beweis. Wegen $E(f)u = E(1)E(f)u$ ist der Teilraum nicht dicht, falls $E(1) \neq \mathbf{1}$. Sei umgekehrt $E(1) = \mathbf{1}$. Da die Funktion $f \equiv 1$ der p -Limes einer Folge $f_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist, folgt aus (A.30), dass $u = E(1)u = \lim_n E(f_n)u$, für alle $u \in \mathcal{H}$. \square

Schliesslich erweitern wir ein P -Mass auf unbeschränkte Funktionen f , um den Preis, dass $E(f)$ es auch sein darf.

Satz 11. *Jedes P -Mass E hat eine eindeutige Fortsetzung*

$$E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \{\text{dicht definierte, abgeschlossene Operatoren auf } \mathcal{H}\}$$

mit

$$D_f := D(E(f)) \supset D_g, \quad (|f| \leq g)$$

und

$$E(f_n)u \rightarrow E(f)u, \quad (u \in D_g), \quad (\text{A.39})$$

falls $f_n \rightarrow f$, $|f_n| \leq g$. Diese erfüllt

$$E(\alpha f + \beta g) \supset \alpha E(f) + \beta E(g)$$

(mit $=$, falls f oder $g \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$),

$$E(fg) \supset E(f)E(g) \quad (\text{A.40})$$

(mit $=$, falls $g \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$), sowie (A.18, A.22).

Beweis. (nur Konstruktion von $E(f)$). Für festes $u \in \mathcal{H}$ ist

$$I_u(f) = (u, E(f)u)$$

ein Integral für $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ im Sinn von Satz 7, Teil (i). Es gilt

$$I_u(|f|^2) = (u, E(f)^* E(f)u) = \|E(f)u\|^2, \quad (\text{A.41})$$

nach der Dreiecksungleichung für $\|E(f)u\|$ also

$$I_{\alpha u + \beta v}(|f|^2)^{1/2} \leq |\alpha| I_u(|f|^2)^{1/2} + |\beta| I_v(|f|^2)^{1/2}, \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C}). \quad (\text{A.42})$$

Auch ist

$$I_{u - E(1)u}(|f|^2) = \|E(f)(u - E(1)u)\|^2 = 0. \quad (\text{A.43})$$

Für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ setzen wir dann mit Teil (ii) des Satzes

$$D_f := \{u \in \mathcal{H} \mid I_u(|f|^2) < \infty\}$$

und behaupten: D_f ist (a) ein Teilraum, der (b) dicht in \mathcal{H} liegt. Sei dazu $f_n := f\chi_{\Omega_n}$, $\Omega_n = \{x \mid |f(x)| \leq n\}$, also $f_n \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$. Wegen $f_n \rightarrow f$, $|f_n| \leq |f|$ folgt mit (A.28)

$$I_u(|f_n|^2) \rightarrow I_u(|f|^2), \quad (\text{A.44})$$

sodass (A.42, A.43) auch für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ gelten. Insbesondere ist (a) gezeigt. Zum Beweis von (b): für $n \geq m$ ist $f_n\chi_{\Omega_m} = f_m$; damit ist

$$I_{E_{\Omega_m}u}(|f_n|^2) = \|E(f_n)E(\chi_{\Omega_m})u\|^2 = \|E(f_m)u\|^2$$

unabhängig von n , nach (A.44) also $E_{\Omega_m}u \in D_f$. Da $E_{\Omega_m}u \xrightarrow{m \rightarrow \infty} E(1)u$ und da $u - E(1)u \in D_f$, s. (A.43), folgt (b). Nun können wir eine Sesquilinearform $b_f(u, v)$ wie in (A.32) definieren, diesmal für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ und $u, v \in D_f$. Für $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ ist

$$b_f(u, v) = (u, E(f)v) \quad (\text{A.45})$$

mit, s. (A.41),

$$|b_f(u, v)| \leq \|u\| \|E(f)v\| = \|u\| I_v(|f|^2)^{1/2}. \quad (\text{A.46})$$

Wegen (A.28) mit $|f_n| \leq 1 + |f|^2$ ist $I_{u+i^k v}(f_n) \rightarrow I_{u+i^k v}(f)$ und damit $b_{f_n}(u, v) \rightarrow b_f(u, v)$, sodass (A.46) auch für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $u, v \in D_f$ gilt. Nach (A.3) definiert dann (A.32) $E(f)v$ für $v \in D_f \equiv D(E(f))$. \square

4. Selbstadjungierte Operatoren, Spektralmasse und 1-parametrische unitäre Gruppen

Satz (von Neumann, 1930). Für jedes Spektralmaß E auf \mathbb{R} ist

$$A = E(\text{id}), \quad (\text{id} : \lambda \mapsto \lambda), \quad (\text{A.47})$$

d.h. in der Notation (A.35)

$$A = \int \lambda dE_\lambda,$$

selbstadjungiert. Umgekehrt hat jeder Operator $A = A^*$ eine Spektraldarstellung (A.47), wobei das Spektralmaß E durch A eindeutig bestimmt ist.

Korollar. $\text{supp } E = \sigma(A)$.

Bemerkung. Für $A = A^*$ stimmt somit (3.9) mit der allgemeinen Definition (A.9) des Spektrums überein, vgl. auch (3.21).

Wichtig für den unten dargelegten Beweis des Spektralsatzes ist

Definition. Eine 1-parametrische unitäre Gruppe ist eine Abbildung

$$U : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) , \quad t \mapsto U(t)$$

mit den Eigenschaften

$$U(t)^{-1} = U(t)^* , \quad (\text{A.48})$$

$$U(0) = \mathbf{1} , \quad (\text{A.49})$$

$$U(t+s) = U(t) U(s) , \quad (\text{A.50})$$

$$\text{s-lim}_{t \rightarrow 0} U(t) = \mathbf{1} . \quad (\text{A.51})$$

Bemerkung. Es folgt

$$\text{s-lim}_{t \rightarrow t_0} U(t) = U(t_0) , \quad U(-t) = U(t)^{-1} .$$

Definition. Die **Erzeugende** A von U ist

$$Av := -i \frac{d}{dt} U(t)v \Big|_{t=0} = -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (U(t) - \mathbf{1})v , \quad (\text{A.52})$$

wobei $v \in D(A)$, falls der Limes existiert.

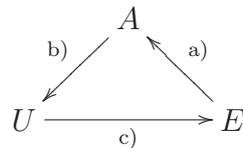
Es ist evident, dass A mindestens symmetrisch ist:

$$0 = i \frac{d}{dt} (U(t)u, U(t)v) \Big|_{t=0} = (Au, v) - (u, Av) , \quad (u, v \in D(A)) . \quad (\text{A.53})$$

Es gilt aber mehr:

Satz 12. Die Erzeugende A einer 1-parametrischen unitären Gruppe U ist selbstadjungiert. Umgekehrt ist jeder Operator $A = A^*$ eine Erzeugende (A.52), wobei U durch A eindeutig bestimmt ist.

Zum Beweis der Sätze betrachten wir die beiden Zuordnungen in je nur einer Richtung, sowie eine weitere zwischen 1-parametrischen unitären Gruppen und Spektralmasse:



Lemma 13.

- a) Sei E ein Spektralmaß und $E \mapsto A$ durch (A.47) gegeben. Dann ist $A = A^*$.
- b) Sei $A = A^*$. Dann ist A die Erzeugende (A.52) einer eindeutig bestimmten 1-parametrischen unitären Gruppe, notiert $A \mapsto U$.
- c) Sei U eine 1-parametrische unitäre Gruppe. Dann gibt es ein eindeutig bestimmtes Spektralmaß E (notiert $U \mapsto E$) mit

$$U(t) = E(e^{it\lambda}). \quad (\text{A.54})$$

Die drei Abbildungen sind injektiv.

Beweis der Sätze. Es genügt zu zeigen, dass die Zusammensetzung der Abbildungen (a, b, c) die Identität ergibt. Da sie injektiv sind, reicht es, bei einem beliebigen Vertex, z.B. A , zu beginnen. Nach Konstruktion von (b, c) ist

$$Av = -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E(e^{it\lambda}) - \mathbf{1})v = -i \lim_{t \rightarrow 0} E\left(\frac{e^{it\lambda} - 1}{t}\right)v$$

mit $v \in D(A)$ gdf der Limes existiert. Für $v \in D(E(\lambda)) (= D(E(|\lambda|)))$ folgt mit (A.39) wegen

$$\frac{e^{it\lambda} - 1}{t} \xrightarrow{t \rightarrow 0} \lambda, \quad \left| \frac{e^{it\lambda} - 1}{t} \right| \leq |\lambda|,$$

dass die rechte Seite gleich $E(\lambda)v$ ist, also $A \supset E(\lambda)$. Zusammen mit der adjungierten Beziehung, $A = A^* \subset E(\lambda)^* = E(\lambda)$, folgt $A = E(\lambda)$. \square

Beweis von a). Sei $A := E(\lambda)$.

$A^* = A$: folgt aus $E(f)^* = E(\bar{f})$ für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, s. Satz 11. $E \mapsto A$ injektiv: Aus $(z - \lambda)(z - \lambda)^{-1} = \mathbf{1}$, ($\text{Im } z \neq 0, \lambda \in \mathbb{R}$) folgt mit (A.40) und Lemma 10

$$\begin{aligned} (z - E(\lambda))E((z - \lambda)^{-1}) &= E(z - \lambda)E((z - \lambda)^{-1}) = \mathbf{1}, \\ E((z - \lambda)^{-1})(z - E(\lambda)) &\subset \mathbf{1}, \end{aligned}$$

also

$$(z - A)^{-1} = E((z - \lambda)^{-1}). \quad (\text{A.55})$$

Wegen (A.16, A.17) ist dann $E(f)$ für alle f der Form

$$f(\lambda) = \sum_{i=1}^n a_i (z_i - \lambda)^{-n_i}, \quad (\text{Im } z_i \neq 0, a_i \in \mathbb{C}, n_i = 1, 2, \dots),$$

durch A bestimmt. Diese f 's liegen nach dem Satz von Weierstrass dicht in $C_\infty(\mathbb{R})$ bzgl. der $\|f\|_\infty$ -Norm. Damit ist das Spektralmaß E durch A bestimmt. \square

Beweis des Korollars. Nach (A.55, A.37) ist

$$\|(z - A)^{-1}\| = \sup_{x \in \text{supp } E} |z - x|^{-1}, \quad (\text{Im } z \neq 0).$$

Diese Norm divergiert genau dann, wenn $\text{dist}(z, \sigma(A)) \rightarrow 0$, die rechte Seite, wenn $\text{dist}(z, \text{supp } E) \rightarrow 0$. \square

Beweis von b). Nach Definition (A.52) ist A durch U bestimmt, d.h. $A \mapsto U$ injektiv. Die Konstruktion von U bei gegebenem $A = A^*$ besteht aus folgenden Schritten.

- i) Approximation von A durch $A_n^\pm \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.
- ii) Definition: $U(\pm t) = \text{s-lim}_n e^{\pm i A_n^\pm t}$ für $t \geq 0$.
- iii) $U(t)$ ist eine 1-parametrische unitäre Gruppe.
- iv) Die Erzeugende von $U(t)$ ist A .

i) Wir setzen, s. Satz 3,

$$A_n^+ = inA(A + in)^{-1} = in + n^2(A + in)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \quad (\text{A.56})$$

und behaupten

$$\lim_{n \rightarrow \infty} A_n^+ v = Av, \quad (\forall v \in D(A)). \quad (\text{A.57})$$

Wegen $A_n^+ v = in(A + in)^{-1} Av$ genügt es, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} in(A + in)^{-1} u = u, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

Wegen $\|in(A + in)^{-1}\| \leq 1$ genügt es, dies für $u \in D(A)$ zu zeigen:

$$u = (A + in)^{-1}(A + in)u = in(A + in)^{-1}u + (A + in)^{-1}Au,$$

wobei der letzte Term für $n \rightarrow \infty$ verschwindet.

ii)
$$e^{iA_n^+ t} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (iA_n^+ t)^k$$

ist analytisch in t mit

$$\frac{d}{dt} e^{iA_n^+ t} = iA_n^+ e^{iA_n^+ t}.$$

Für $t \geq 0$ erfüllt

$$U_n^+(t) := e^{iA_n^+ t} = e^{itn^2(A+in)^{-1}} e^{-tn}$$

(A.49–A.51) sowie

$$\|U_n^+(t)\| \leq e^{t\|n^2(A+in)^{-1}\|} e^{-tn} \leq e^{tn} e^{-tn} = 1. \quad (\text{A.58})$$

Da die A_n 's miteinander kommutieren, ist

$$\begin{aligned} U_m^+(t) - U_n^+(t) &= \int_0^t ds \frac{d}{ds} (U_n^+(t-s)U_m^+(s)) \\ &= i \int_0^t ds U_n^+(t-s)U_m^+(s)(A_m - A_n) \end{aligned}$$

und somit

$$\|(U_m^+(t) - U_n^+(t))v\| \leq |t| \|(A_m - A_n)v\|.$$

Mit (A.57) ist $U_n^+(t)v$ Cauchy, also existiert

$$U(t)v := \lim_{n \rightarrow \infty} U_n^+(t)v, \quad (t \geq 0), \quad (\text{A.59})$$

zunächst für $v \in D(A)$, gleichmässig in beschränkten t -Intervallen. Da $D(A)$ dicht ist und wegen (A.58) gilt dasselbe für $v \in \mathcal{H}$. Analog definieren wir A_n^- durch Ersetzung $i \rightarrow -i$ in (A.56) und

$$U_n(-t) := e^{-iA_n^- t}, \quad U(-t) := s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} U_n^-(-t)$$

für $t \geq 0$. Damit ist $U(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, ($t \in \mathbb{R}$) mit $\|U(t)\| \leq 1$.

iii) Eigenschaften (A.49–A.51) gehen von $U_n^\pm(t)$ auf $U(t)$ über, (A.50) allerdings nur für t, s mit selbem Vorzeichen. Ist ihr Vorzeichen verschieden, so genügt der Spezialfall $t = -s$,

$$U(t)U(-t) = U(-t)U(t) = \mathbf{1} : \quad (\text{A.60})$$

Sei nämlich z.B. $s \geq t \geq 0$. Dann folgt aus $U(s) = U(s-t)U(t) = U(t)U(s-t)$, dass

$$U(s)U(-t) = U(s-t), \quad U(-t)U(s) = U(s-t).$$

Gl. (A.60) folgt aus

$$\begin{aligned} U_n^+(t)U_n^-(-t) - 1 &= i \int_0^t ds U_n^+(s)U_n^-(-s)(A_n^+ - A_n^-) \\ \|(U_n^+(t)U_n^-(-t) - 1)v\| &\leq |t| \|(A_n^+ - A_n^-)v\| \end{aligned}$$

und (A.57). Wegen (A.60) existiert $U(t)^{-1}$ und $\|U(t)v\| \leq \|v\| \leq \|U(t)v\|$. Damit ist $U(t)$ unitär.

iv) Es ist

$$U_n^+(t)v - v = i \int_0^t ds U_n^+(s)A_n v, \quad (t \geq 0).$$

Daraus, aus (A.57, A.59) und aus analogen Gleichungen für $t \leq 0$ folgt

$$U(t)v - v = i \int_0^t ds U(s)A v, \quad (t \in \mathbb{R})$$

für $v \in D(A)$. Damit existiert

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (U(t) - 1)v = iA v, \quad (v \in D(A)),$$

also $A \subset B$, wobei B die Erzeugende von U ist. Nach (A.53) ist $B \subset B^*$, also auch $A \supset B$, d.h. $B = A$. \square

Beweis von c). Wieder bestimmt (A.54) U eindeutig aus E . Konstruktion von E :

i) Definition von $E(f)$ für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$.

ii) Eigenschaften (A.16–A.19).

iii) Gl. (A.54).

$$i) \quad E(f) := \int dt \hat{f}(t) U(t), \quad (f \in C_0^\infty(\mathbb{R})), \quad (\text{A.61})$$

wobei die Fouriertransformierte

$$\hat{f}(t) := (2\pi)^{-1} \int dx f(x) e^{-itx}$$

für $|t| \rightarrow \infty$ rascher als jede Inverse Potenz von t abfällt. Damit ist (A.61) als starker Limes von Riemann-Summen wohldefiniert und $E(f) \in \mathcal{H}$.

ii) Evident sind (A.16, A.18), letzteres wegen $U(t)^* = U(-t)$.

$$(A.17): \quad f(x)g(x) = \int dt ds \hat{f}(t)\hat{g}(s)e^{i(t+s)x} = \int dt e^{itx} \int ds \hat{f}(t-s)\hat{g}(s),$$

also

$$\begin{aligned} E(fg) &= \int dt \left(\int ds \hat{f}(t-s)\hat{g}(s) \right) U(t) \\ &= \int dt ds \hat{f}(t)\hat{g}(s)U(t+s) = E(f)E(g) \end{aligned}$$

wegen (A.50).

(A.19): Zu zeigen ist $w = 0$, falls $w \perp E(f)u$ für alle $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, $u \in \mathcal{H}$. Insbesondere ist dann

$$0 = (w, E(f)w) = \int dt \hat{f}(t)(w, U(t)w).$$

Da $(w, U(t)w)$ stetig in t ist, folgt $(w, U(t)w) = 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$, also auch für $t = 0$: $\|w\|^2 = 0$.

iii) Für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist

$$e^{itx} f(x) = \int ds \hat{f}(s)e^{i(t+s)x} = \int ds \hat{f}(s-t)e^{isx},$$

also für alle $u \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} E(e^{itx})E(f)u &= \int ds \hat{f}(s-t)U(s)u \\ &= U(t) \int ds \hat{f}(s)U(s)u = U(t)E(f)u. \end{aligned}$$

Wegen (A.19) folgt nun (A.54). □

Beispiel. Auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ist die Translation um t definiert als

$$(U(t)\psi)(x) = \psi(x-t). \tag{A.62}$$

$U(t)$ ist eine 1-parametrische unitäre Gruppe mit Erzeugenden $-p$, wobei

$$D(p) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \frac{d\psi}{dx} \in L^2(\mathbb{R}) \right\}, \quad p\psi = -i \frac{d\psi}{dx}.$$

Wir vergleichen dies mit Bsp. a) auf S. 81. Dass dort p, \tilde{p} nicht selbstadjungiert sind, steht nun im Zusammenhang damit, dass $x \mapsto x-t$ das Intervall $[0, 1] \ni x$ nicht bewahrt, also (A.62) keine 1-parametrische unitäre Gruppe mehr definiert. Dies ist wieder der Fall, falls $[0, 1]$ "zum Kreis geschlossen" wird: Sei $\alpha \in \mathbb{C}$ mit $|\alpha| = 1$ und

$$(U_\alpha(t)\psi)(x) = \alpha^{[x-t]}\psi((x-t)), \quad (t \in \mathbb{R}),$$

wobei $\lambda = [\lambda] + (\lambda)$ in ganzer Teil und Rest zerlegt wurde. Für $0 < t < 1$ und $\psi(x)$ stetig ist es $(U_\alpha(t)\psi)(x)$ auch, ausser allenfalls bei $x = t$:

$$(U_\alpha(t)\psi)(t-) = \alpha^{-1}\psi(1) , \quad (U_\alpha(t)\psi)(t+) = \psi(0) .$$

Insbesondere ist $U_\alpha(t)\psi \in D(\tilde{p})$ gdf $\psi \in D(\tilde{p})$ und $\psi(1) = \alpha\psi(0)$, also $\psi \in D(p_\alpha)$ aus Bsp. b), S. 82. Man schliesst, dass $-p_\alpha$ die Erzeugende von U_α ist.

B Anhang: Kugelfunktionen

Gesucht ist ein “natürliches” vollständiges Funktionensystem auf der Einheitskugel $S^2 = \{\vec{e} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{e}| = 1\}$.

Motivation. Die analoge Frage für den Einheitskreis $S^1 = \{\vec{e} \in \mathbb{R}^2 \mid |\vec{e}| = 1\} = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid x_1 + ix_2 = e^{i\theta}, \theta \in \mathbb{R} \bmod 2\pi\}$ hat eine von den Fourierreihen her wohlbekannte Antwort:

$$f_n(\vec{e}) = e^{in\theta} \quad (n \in \mathbb{Z}).$$

Die Funktionen f_n sind die Einschränkung auf S^1 folgender Polynome auf \mathbb{R}^2

$$u_n(x_1, x_2) = \begin{cases} (x_1 + ix_2)^n & , \quad n > 0 \\ 1 & , \quad n = 0 \\ (x_1 - ix_2)^{-n} & , \quad n < 0. \end{cases}$$

Beachte, dass u_n ein homogenes, harmonisches Polynom vom Grad $|n|$ ist, und dass

$$u_n(r\vec{e}) = r^{|n|} f_n(\vec{e}).$$

Im Falle der Einheitskugel $\Omega \equiv S^2$ setzen wir deshalb:

Definition. $Y_l : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ ist eine Kugelfunktion zum Index $l = 0, 1, 2, \dots$, falls Y_l die Einschränkung auf Ω eines homogenen, harmonischen ($\Delta u_l = 0$) Polynoms $u_l : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ ist:

$$u_l(r\vec{e}) = r^l Y_l(\vec{e}). \quad (\text{B.1})$$

Satz.

- $\vec{M}^2 Y_l = l(l+1)Y_l$.
- $(Y_l, Y_{l'}) = 0$ für $l \neq l'$.
- Die Y_l (zu festem l) bilden einen $(2l+1)$ -dimensionalen Unterraum $\mathcal{Y}_l \subset L^2(\Omega)$.
- Diese Unterräume spannen $L^2(\Omega)$ auf:

$$L^2(\Omega) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{Y}_l.$$

Beweis. a) Aus

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2,$$

vgl. (4.7), folgt mit (B.1)

$$0 = \Delta u_l = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2 \right) r^l Y_l = r^{l-2} (l(l+1) - \vec{M}^2) Y_l.$$

b) Eigenvektoren selbstadjungierter Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal: $l(l+1)(Y_l, Y_{l'}) = (\vec{M}^2 Y_l, Y_{l'}) = (Y_l, \vec{M}^2 Y_{l'}) = l'(l'+1)(Y_l, Y_{l'})$.

c) Sei H_l der Raum aller homogenen Polynome

$$P_l(\vec{x}) = \sum_{\substack{m_i \in \mathbb{N} \\ m_1+m_2+m_3=l}} c_{m_1 m_2 m_3} x_1^{m_1} x_2^{m_2} x_3^{m_3}$$

vom Grad l . Die Anzahl der Koeffizienten ist

$$\dim H_l = (l+1) + l + (l-1) + \dots + 1.$$

Offenbar $\Delta : H_l \rightarrow H_{l-2}$. Der Raum K_l der homogenen, harmonischen Polynome von Grad l , d.h. $K_l = \text{Ker } \Delta$, hat also die Dimension

$$\dim K_l \geq \dim H_l - \dim H_{l-2} = (l+1) + l = 2l + 1. \quad (\text{B.2})$$

Andererseits ist nach (b) und $r^l = (\vec{x}^2)^k r^{l-2k}$

$$H_l \supset r^l (\mathcal{Y}_l \oplus \mathcal{Y}_{l-2} \oplus \dots) \quad (\text{B.3})$$

mit Dimensionen

$$\begin{aligned} \dim H_l &\geq \dim K_l + \dim K_{l-2} + \dots \\ &\geq (l+1) + l + (l-1) + \dots + 1 = \dim H_l. \end{aligned}$$

Es folgt, dass in (B.2, B.3) Gleichheit gilt.

d) Nach (B.3) (mit $=$) sind die endlichen Linearkombinationen von Kugelfunktion identisch mit den Einschränkungen von Polynomen auf Ω . Nach dem Weierstrassschen Approximationssatz approximieren diese die stetigen Funktionen auf Ω gleichmässig. Letztere sind dicht in $L^2(\Omega)$. \square

Der Raum \mathcal{Y}_l trägt nach Beispiel 3 auf S. 69 eine irreduzible Darstellung \mathcal{D}_l . Er kann somit mit einer orthonormierten Basis $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$, ($m = -l, \dots, l$) ausgerüstet werden, die die Gleichungen (7.26), und insbesondere

$$M_3 Y_{lm} = m Y_{lm}, \quad (\text{B.4})$$

erfüllt; durch diese ist die Basis bis auf eine Phase bestimmt. Da $Y_{l0}(0, 0) \neq 0$, kann diese konventionsweise durch

$$Y_{l0}(0, 0) > 0 \quad (\text{B.5})$$

festgelegt werden. Aus (B.4) und $M_3 = -i\partial/\partial\varphi$ folgt, dass $Y_{l0}(\theta, \varphi)$ (bis auf Vielfache) die einzige Funktion in \mathcal{Y}_l ist, die invariant unter Drehungen um die 3-Achse, d.h. unabhängig von φ , ist.

Die expliziten Ausdrücke der $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ benötigen wir nicht. Im Folgenden erläutert ist der Bezug zu den Legendre-Polynomen.

Definition. Die Legendre-Polynome

$$P_l(z), \quad (z \in [-1, 1]),$$

($l = 0, 1, 2, \dots$) sind definiert durch die erzeugende Funktion

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2tz + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(z), \quad (\text{B.6})$$

d.h.

$$P_l(z) = \frac{1}{l!} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^l \frac{1}{\sqrt{1 - 2tz + t^2}} \Big|_{t=0}.$$

Bemerkungen: 1. $P_l(u)$ ist ein (reelles) Polynom in u , da Radikand = 1 bei $t = 0$.

2. Aus $g(-t, -u) = -g(t, u)$ folgt

$$P_l(-u) = (-1)^l P_l(u). \quad (\text{B.7})$$

3. Aus $g(t, 1) = (1 - t)^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l$ folgt

$$P_l(1) = 1. \quad (\text{B.8})$$

• Bezug auf Y_{l0} :

$$P_l(\cos \theta) = c_l Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (\text{B.9})$$

mit

$$c_l = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}. \quad (\text{B.10})$$

Denn: Nach (B.7) enthält P_l für l gerade (ungerade) nur Monome gerader (ungerader) Ordnung. Damit ist

$$r^l P_l\left(\frac{x_3}{r}\right), \quad (r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \quad (\text{B.11})$$

ein Polynom in (x_1, x_2, x_3) und zwar offensichtlich ein homogenes vom Grad l . Harmonisch ist es auch, denn

$$\sum_{l=0}^{\infty} t^l r^l P_l\left(\frac{x_3}{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{1 - tx_3 + t^2 r^2}} = \frac{1}{|\vec{x} - t\vec{e}_3|}$$

ist es für $\vec{x} \neq t\vec{e}_3$. Schliesslich ist (B.11) invariant unter Drehungen um die 3-Achse. Zusammen: Die Einschränkung $P_l(\cos \theta)$ auf $r = 1$ erfüllt (B.9) aufgrund der Definition von Y_{l0} , wobei c_l noch zu bestimmen bleibt.

• Orthogonalität:

$$\int_{-1}^1 P_{l'}(u) P_l(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (\text{B.12})$$

Denn: Für $l' \neq l$ folgt dies mit $u = \cos \theta$ aus

$$\int_{-1}^1 \overline{P_{l'}(u)} P_l(u) du = c_{l'} c_l \int_0^\pi \overline{Y_{l'0}(\theta, \varphi)} Y_{l0}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \frac{c_{l'} c_l}{2\pi} \int_{\Omega} \overline{Y_{l'0}(\vec{e})} Y_{l0}(\vec{e}) d^2 e \quad (\text{B.13})$$

und aus (b) des Satzes. Für $l' = l$: Einerseits ist

$$\begin{aligned} t \int_{-1}^1 g(t, u)^2 du &= \int_{-1}^1 \frac{t}{1 - 2tu + t^2} du = -\frac{1}{2} \log(1 - 2tu + t^2) \Big|_{u=-1}^{u=1} \\ &= -\frac{1}{2} \log \frac{(1-t)^2}{(1+t)^2} = \log \frac{1+t}{1-t}; \end{aligned}$$

andererseits

$$t \int_{-1}^1 g(t, u)^2 du = \sum_{l=0}^{\infty} t^{2l+1} \int_{-1}^1 P_l(u)^2 du .$$

Vergleich und Ableitung nach t liefern

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)t^{2l} \int_{-1}^1 P_l(u)^2 du = \frac{d}{dt} \log \frac{1+t}{1-t} = \frac{2}{1-t^2} = 2 \sum_{l=0}^{\infty} t^{2l}$$

und so (B.12). Nun folgt Gl. (B.10) aus (B.12, B.13) und aus (B.5, B.8).

• Expliziter Ausdruck:

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l .$$

Denn: Für kleine t und $|u| \leq 1$ liegen die Nullstellen z_1 und z_2 von $z \mapsto z^2 + z + (2ut - t^2)/4$ in der Nähe von $z = 0$, bzw. $z = -1$. So kann die erzeugende Funktion als

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=\frac{1}{2}} \frac{dz}{z^2 + z + (2ut - t^2)/4} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=\frac{1}{2}} \frac{dz}{(z - z_1)(z - z_2)}$$

geschrieben werden: Die Contour umschliesst nur z_1 , und der Ausdruck ist gleich

$$\frac{1}{z_1 - z_2} = \frac{1}{\sqrt{1 - 2tu + t^2}} .$$

Mit der Variablensubstitution $z = -wt/2$ wird

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u + (t/2)(1 - w^2)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u} \frac{1}{1 - \frac{t}{2} \frac{(w^2 - 1)}{(w - u)}} .$$

Für kleine t und $|u| \leq 1$ ist der Betrag des letzten Terms nahe $|tw/2| = 1/2$, also

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(t/2)^l (w^2 - 1)^l}{(w - u)^l} .$$

Der l -te Term entspricht einem Pol bei $w = u$ der Ordnung $l + 1$, also

$$g(t, u) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{t}{2} \right)^l \frac{d^l}{dw^l} (w^2 - 1)^l \Big|_{w=u} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l .$$

C Anhang: Die Methode der stationären Phase

Wir untersuchen die Asymptotik von Integralen des Typs

$$f(t) = \int_{x_1}^{x_2} dx g(x) e^{ith(x)}$$

für $t \rightarrow \infty$. Zuerst sei $h'(x) \neq 0$ im ganzen Intervall $x_1 \leq x \leq x_2$. Dann erhält man durch partielle Integration:

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{it} \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{g(x)}{h'(x)} \frac{d}{dx} e^{ith(x)} \\ &= \frac{1}{it} \frac{g(x)}{h'(x)} e^{ith(x)} \Big|_{x_1}^{x_2} - \frac{1}{it} \int_{x_1}^{x_2} dx \left(\frac{d}{dx} \frac{g(x)}{h'(x)} \right) e^{ith(x)} \\ &= O(t^{-1}) . \end{aligned}$$

Nehmen wir an, $h'(x)$ besitze eine einzige, einfache Nullstelle im Integrationsgebiet:

$$h'(x_0) = 0 ; \quad h''(x_0) \neq 0$$

mit $x_0 \in (x_1, x_2)$. Nach dem oben Gesagten ist nun

$$f(t) = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx g(x) e^{ith(x)} + O(t^{-1})$$

für beliebiges $\varepsilon > 0$. Im so verkleinerten Integrationsgebiet setzen wir $s = x - x_0$ und entwickeln

$$g(x) = g(x_0) + sg'(x_0) + \dots , \quad h(x) = h(x_0) + \frac{s^2}{2} h''(x_0) + \dots$$

und finden:

$$f(t) = e^{ith(x_0)} g(x_0) \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} ds e^{it \frac{s^2}{2} h''(x_0)} + e^{ith(x_0)} g'(x_0) \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} ds s e^{it \frac{s^2}{2} h''(x_0)}}_{=0} + O(t^{-1}) . \quad (\text{C.1})$$

Im ersten Term benützen wir $\tau = s(t|h''(x_0)|)^{1/2}$ als neue Integrationsvariable. Für $t \rightarrow \infty$ gehen dann die Grenzen $\rightarrow \pm\infty$ und es entsteht das Fresnel-Integral (3.38)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\pm i\tau^2/2} = e^{\pm i\pi/4} \cdot \sqrt{2\pi} , \quad (\pm = \text{sgn } h''(x_0)) .$$

Resultat: für $t \rightarrow \infty$ ist

$$f(t) = \left(\frac{2\pi}{t|h''(x_0)|} \right)^{1/2} e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn } h''(x_0)} \cdot g(x_0) e^{ith(x_0)} + O(t^{-3/2}) .$$

(Eine Abschätzung des Fehlerterms zeigt, dass er relativ zum führenden klein ist, sofern $t \gg (|g''||h''| + |g'| |h'''|) |h''|^{-2} |g|^{-1}$ mit Auswertung bei $x = x_0$). Analoge, n -dimensionale Integrale

$$f(t) = \int_G d^n x g(x) e^{ith(x)}$$

behandelt man ebenfalls, indem man die Phase um jeden stationären Punkt x_0 , $\partial h/\partial x_i(x_0) = 0$, quadratisch approximiert:

$$h(x) = h(x_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n s_i s_j \frac{\partial^2 h}{\partial x_i \partial x_j}(x_0) + \dots .$$

Die symmetrische Matrix $\partial^2 h(x_0) = (\partial^2 h/\partial x_i \partial x_j)(x_0)$ kann auf Hauptachsenform gebracht werden und das (C.1) entsprechende Integral faktorisiert. Resultat:

$$f(t) = \left(\frac{2\pi}{t}\right)^{n/2} |\det \partial^2 h(x_0)|^{-1/2} e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn} \partial^2 h(x_0)} \cdot g(x_0) e^{ih(x_0)} + O(t^{-(n/2+1)}) , \quad (\text{C.2})$$

wobei $\text{sgn} A = (\# \text{ positive} - \# \text{ negative})$ Eigenwerte von A .

D Anhang: Symmetrien in der Quantenmechanik

Es soll hier der Satz von Wigner auf S. 63 wiederholt und bewiesen werden.

Satz. Sei $\Pi(\mathcal{H})$ die Menge der 1-dimensionalen orthogonale Projektoren. Jede Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$ mit

$$\text{tr}(\Pi_1 \Pi_2) = \text{tr}(\Pi'_1 \Pi'_2) . \quad (\text{D.1})$$

ist dargestellt als

$$S(\Pi) = U \Pi U^* \quad (\text{D.2})$$

mit U einer linearen oder antilinearen Isometrie $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$. Die Alternative ist eindeutig und U selbst ist es bis auf Multiplikation mit einer Phase $c \in \mathbb{C}$, $|c| = 1$.

Als Vorbemerkung zum Beweis sei bemerkt, dass eine Isometrie von selbst linear oder antilinear ist. Besser: falls $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$, $a \mapsto a' = U(a)$

$$(a', b') = \begin{cases} (a, b) \\ (b, a) \end{cases}, \quad (\text{D.3})$$

erfüllt, so gilt

$$(a + b)' = a' + b', \quad (\lambda a)' = \begin{cases} \lambda a' \\ \bar{\lambda} a' \end{cases}. \quad (\text{D.4})$$

Dann ist nämlich für alle $\phi' = U(\phi)$, a_1, a_2

$$\begin{aligned} (\phi', (a_1 + a_2)') &= \begin{cases} (\phi_1, a_1 + a_2) = (\phi_1, a_1) + (\phi_1, a_2) \\ (a_1 + a_2, \phi) = (a_1, \phi) + (a_2, \phi) \end{cases} \\ &= (\phi', a'_1) + (\phi', a'_2) = (\phi', a'_1 + a'_2) \end{aligned}$$

und somit auch für ϕ' in der abgeschlossenen linearen Hülle von $\{U(\phi) | \phi \in \mathcal{H}\}$. Es folgt die erste Gleichung (D.4). Die zweite folgt analog.

Der folgende Beweis (Hunziker) des Satzes beruht auf vier elementaren Lemmas:

Lemma 1. i) Die Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$ besitzt sowohl eine lineare wie auch eine antilineare Erweiterung $S : [\Pi(\mathcal{H})] \rightarrow [\Pi(\mathcal{H}')]$ auf die \mathbb{C} -lineare Hülle $[\Pi(\mathcal{H})]$. Sie erfüllen

$$\text{tr} S(A)^* S(B) = \begin{cases} \text{tr} A^* B & (\text{linear}) \\ \overline{\text{tr} A^* B} & (\text{antilinear}). \end{cases} \quad (\text{D.5})$$

Für $A = A^*$, $B = B^*$, $[A, B] = 0$ gilt ferner

$$S(A)S(B) = S(AB) \quad (\text{D.6})$$

ii) $[\Pi(\mathcal{H})] = \{\text{Operatoren } \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}' \text{ von endlichem Rang}\}$.

Beweis. i) Die Identität

$$\left(\sum_j \tilde{\lambda}_j \tilde{\Pi}_j \right)^* \left(\sum_i \lambda_i \Pi_i \right) = \sum_{j,i} \overline{\tilde{\lambda}_j} \lambda_i \tilde{\Pi}_j \Pi_i$$

und (D.1) zeigen:

- Die Definition

$$S\left(\sum_i \lambda_i \Pi_i\right) = \sum_i \overset{(-)}{\lambda_i} \Pi'_i$$

ist wohldefiniert, denn mit $(A = 0 \Leftrightarrow \text{tr } A^* A = 0)$, $\tilde{\Pi}_i = \Pi_i$, $\tilde{\Pi}'_i = \Pi'_i$, $\tilde{\lambda}_i = \lambda_i$ (bzw. $\tilde{\lambda}_i = \overline{\lambda_i}$) folgt

$$\sum_i \lambda_i \Pi_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_i \overset{(-)}{\lambda_i} \Pi'_i = 0 .$$

- Gl. (D.5) gilt.
- Unter der zusätzlichen Voraussetzung können A, B gemeinsam diagonalisiert werden, also $\tilde{\Pi}_i = \Pi_i$. Dann ist $\Pi_i \Pi_j = \delta_{ij} \Pi_i$ und ebenso $\Pi'_i \Pi'_j = \delta_{ij} \Pi'_j$, da $\Pi \tilde{\Pi} = 0 \Leftrightarrow \text{tr}(\Pi \tilde{\Pi}) = 0$.

ii) Es ist $|a\rangle\langle a| \in [\Pi(\mathcal{H})]$. Operatoren vom Rang 1 sind von der Form $|a\rangle\langle b|$ und damit

$$|a\rangle\langle b| = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^k |a + i^k b\rangle\langle a + i^k b| \in [\Pi(\mathcal{H})] .$$

□

Korollar. Für jene der beiden Abbildungen, deren (Anti-)Linearität mit derjenigen von U aus dem Satz übereinstimmt, gilt

$$S(A) = U A U^* .$$

Lemma 2. Sei $M \subset \mathcal{H}$, $\dim M < \infty$. Dann gibt es $M' \subset \mathcal{H}$, $\dim M' = \dim M$ mit

$$R(\Pi) \subset M \quad \Rightarrow \quad R(\Pi') \subset M' .$$

(Notationen: $R(\Pi)$ Wertebereich (Bild) von Π ; $M' = S(M)$).

Beweis. $P'_M := S(P_M)$ ist nach (D.6) ein Projektor derselben Dimension wie P_M ($\text{tr } P = \dim R(P)$). Setze $M' = R(P'_M)$. Die Behauptung folgt aus (D.6) und

$$R(\Pi) \subset M \quad \Leftrightarrow \quad P_M \Pi = \Pi P_M = \Pi .$$

□

Lemma 3. Die Behauptung (D.2), und somit auch das Korollar, gelten für $\dim \mathcal{H} = 2$.

Beweis. Durch Einführung von orthonormierten Basen in \mathcal{H} und $S(\mathcal{H}) \subset \mathcal{H}'$ können wir annehmen $\mathcal{H} = S(\mathcal{H}) = \mathbb{C}^2$. Dann ist

$$\Pi(\mathcal{H}) = \left\{ \Pi = \frac{1}{2}(1 + \vec{e} \cdot \vec{\sigma}) \mid \vec{e} \in S^2 \right\}$$

und S stiftet eine Abbildung $S : S^2 \rightarrow S^2, \vec{e} \mapsto \vec{e}'$ mit (wegen (D.1))

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = \vec{e}'_1 \cdot \vec{e}'_2 ,$$

d.h. eine Abbildung $S \in O(3)$. Wir unterscheiden:

i) $\det S = +1$: Nach (4.12) ist

$$S \vec{e} \cdot \vec{\sigma} = U(\vec{e} \cdot \vec{\sigma})U^* ,$$

d.h. $S(\Pi) = U\Pi U^*$ mit $U \in SU(2)$ (**unitärer** Fall).

ii) $\det S = -1$: Angesichts von i) genügt es, eine einzige Drehung mit $\det S = -1$ zu betrachten:

$$S \vec{e} = (e_1, -e_2, e_3).$$

Dann ist

$$U\sigma_i U^* = \begin{cases} \sigma_i , & (i = 1, 3) \\ -\sigma_i , & (i = 2) \end{cases}$$

für die **antiunitäre** Abbildung $U \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{z}_1 \\ \bar{z}_2 \end{pmatrix}$. Also $S(\Pi) = U\Pi U^*$. \square

Bemerkung. S , nicht aber $\det S$, hängt von obiger Basiswahl ab.

Im allgemeinen Fall sei $M \subset \mathcal{H}$ ein beliebiger Teilraum mit $\dim M = 2$ und sei $S \upharpoonright M$ die Einschränkung von S auf $\Pi(M)$.

Lemma 4. $\det(S \upharpoonright M)$ ist unabhängig von M (Bezeichnung: $\text{sgn } S$).

Beweis. Wegen (D.1) ist

$$\text{tr}(\Pi'_1 - \Pi'_2)^2 = \text{tr}(\Pi_1 - \Pi_2)^2$$

und somit ist $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H})$ stetig. Für eine stetige Familie $M(t)$ von Teilräumen können die Basen in $M(t)$ und $S(M(t))$ stetig gewählt werden. Damit ist $\det S(M(t))$ stetig und folglich konstant. \square

Beweis des Satzes. Sei $M \subset \mathcal{H}$, $\dim M = 2$ beliebig und $U(M) : M \rightarrow \mathcal{H}'$ der (anti-)lineare Operator aus Lemma 3. Wähle ein festes $\Pi_0 \in \Pi(\mathcal{H})$ und feste $e \in R(\Pi_0)$, $e' \in R(\Pi'_0)$ mit $\|e\| = \|e'\| = 1$. Dann ist für jedes $M \ni e$

$$\Pi'_0 U(M)e = U(M)\Pi_0 e = U(M)e$$

und wir legen die Phase von $U(M)$ fest durch

$$U(M)e = e' . \tag{D.7}$$

Konstruktion von $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$:

$$a' \equiv U(a) := U(M)a , \quad (a \in \mathcal{H}) ,$$

wobei $M \ni e, a$. (M , und damit a' , ist eindeutig, falls a, e linear unabhängig sind; andernfalls ist es a' wegen (D.7) trotzdem). Zu zeigen bleibt die Alternative (D.3), und zwar je nach $\text{sgn } S$. Betrachte dazu die Erweiterung aus dem Korollar für $M \ni e, a$:

$$S(|e\rangle\langle a|) = U(M)|e\rangle\langle a|U(M)^* = |e'\rangle\langle a'| ,$$

und ebenso für $a \rightsquigarrow b$. Dann ist einerseits

$$\text{tr } S(|e\rangle\langle b|)^* S(|e\rangle\langle a|) = \text{tr}(|e'\rangle\langle b'|)^* |e'\rangle\langle a'| = \text{tr}(|b'\rangle\langle e'|e'\rangle\langle a'|) = (a', b') ,$$

was andererseits nach (D.5) im linearen Fall auch gleich

$$\text{tr}(|e\rangle\langle b|)^* |e\rangle\langle a| = (a, b)$$

ist, und $= (b, a)$ im antilinearen. \square

Literaturhinweise

- [1] G. Auletta, M. Fortunato, G. Parisi, “Quantum mechanics”, Cambridge University Press 2009
- [2] G. Baym, “Lectures on quantum mechanics”, Addison-Wesley Publishing 1996
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, “Quantenmechanik”, de Gruyter 1999
- [4] R. P. Feynman, “Vorlesungen über Physik (Band 3: Quantenmechanik)”, Oldenbourg 1999
- [5] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “Quantenmechanik”, Akademie Verlag 1990
- [6] A. Messiah, “Quantum mechanics”, Dover 1999
- [7] W. Pauli, “Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik”, Springer 1990
- [8] A. Peres, “Quantum theory: concepts and methods”, Kluwer 1995
- [9] F. Scheck, “Nichtrelativistische Quantentheorie”, Springer 1999
- [10] F. Schwabl, “Quantenmechanik”, Springer 2002
- [11] N. Straumann, “Quantenmechanik”, Springer 2002
- [12] B. Thaller, “Visual quantum mechanics”, Springer 2000
- [13] W. Thirring, “Quantum mathematical physics: atoms, molecules and large systems”, Springer 2003

Index

- Absorption, 11
- Auf- und Absteigeoperatoren, 68
- Balmer-Formel, 6
- Breit-Wigner Resonanz, 53
- Clebsch-Gordan Reihe, 71
- Darstellung, 40
- Doppelspaltexperiment, 14
- Drehimpuls, 7, 40, 42, 67
- Dynamik, 28
- Eichtransformationen, 28
- Entartung, 10, 44
- Erhaltungsgrösse, 40
- Erwartungswert, 23, 26
- Erzeugungsoperator, 32
- freies Teilchen, 15
- Hamilton-Jacobi Gleichung, 9, 10
- Hamiltonoperator, 28
- harmonischer Oszillator, 2, 32
- Heisenberg-Bild, 29
- Heisenberg-Gleichung, 20
- Helium-Atom, 59
- Impulsoperator, 24
- induzierte Emission, 11
- infinitesimale Drehung, 66
- irreduzible Darstellung, 68
- kanonische Quantisierung, 28
- kohärente Zustände, 35
- Kontinuitätsgleichung, 17
- Korrespondenzprinzip, 8, 19
- Messwerte, 26
- Min-Max Prinzip, 57
- Operator, 22
- orthogonaler Projektor, 22, 25
- Ortsoperator, 23
- Pauli-Matrizen, 72
- photoelektrischer Effekt, 6
- Präparation der Zustände, 28
- Produktbasis, 70
- projektive Darstellung, 65
- Projektor, 25
- Quantenbedingung, 4, 7, 8
- Raumspiegelung, 64
- Schrödinger-Bild, 29
- Schrödinger-Gleichung, 15
- Schwankungsquadrat, 23
- Spektralsatz, 25
- Spektrum, 23
- Spin, 14, 76
- spontane Emission, 11
- Störung, 54
- Stark-Effekt, 56
- Strahlungsgesetz, 4
- Streuquerschnitt, 48
- Symmetrie, 63
- Symmetriegruppe, 40
- Tensorprodukt, 70
- Tensorproduktdarstellung, 71
- unitäre Darstellung, 66
- Unschärferelation, 27
- Vernichtungsoperator, 32
- Verschiebungsoperator, 34
- vollständig separable Systeme, 9
- Wahrscheinlichkeit, 11, 18, 22, 25
- Wasserstoff-Atom, 6, 11, 43
- Wellenfunktion, 17
- Wirkung, 8
- Zeeman-Effekt, 75
- Zeitumkehr, 64